



03091
Universidad Nacional Autónoma
de México 2

UNIDAD DE CICLOS PROFESIONALES
Y DE POSGRADO
COLEGIO DE CIENCIAS Y HUMANIDADES

Posgrado en Ciencias de la Tierra

MODELACION MATEMATICA DE LOS
NIVELES DE CONTAMINACION EN LA
CIUDAD DE GUADALAJARA, JALISCO
MÉXICO.

T E S I S

Que para obtener el Grado Académico de
DOCTORA EN CIENCIAS (Física Atmosférica)
presenta

VALENTINA DAVYDOVA BELITSKAYA

2001



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

*Mi agradecimiento al Dr. Yuri Nicolaevich Skiba, Director de Tesis,
por su interés y asesoría en la elaboración de este trabajo.*

Agradezco a los profesores:

Dr. Carlos Gay García

Dra. Graciela Binimelis de Raga

Dr. Víctor M. Mendoza Castro

Dr. Arturo Quintanar

Dra. Ma. Esther G. Ruiz Santoyo

Dr. Sergei N. Bulgakov

Por la revisión de la tesis y por

aceptar ser miembros del jurado

CONTENIDO

	Página
Resumen	4
Abstract	5
Introducción	6
Capítulo I. Situación ecológica de la Zona Metropolitana de Guadalajara.	
I.1 Generalidades	12
I.2 Análisis de la variación temporal de contaminantes	16
I.3 Particularidades de los campos de contaminantes en la región de estudio	19
I.4 Estimación de la eficiencia de la red de monitoreo ambiental (RAMA) de la ZMG	27
Capítulo II. Microclima y algunas estadísticas de la región.	
II.1 Clima de la Zona Metropolitana de Guadalajara	31
II.2 Desarrollo urbano	40
Capítulo III. Principios físicos del problema de propagación y difusión de contaminantes.	
III.1 Introducción	43

III.2 Ecuaciones de predicción	44
III.3 Difusión turbulenta en la capa límite planetaria	45
III.4 Condiciones meteorológicas y su efecto en la dispersión de los contaminantes	48
III.5 Origen y clasificación de las fuentes de contaminación	62

Capítulo IV. Formulación matemática del problema.

IV.1 Formulación del problema y condiciones iniciales y de frontera. Ecuaciones integrales del balance y la norma	69
IV.2 Espacio de Hilbert y operador adjunto	73
IV.3 Modelo adjunto. Formulación del problema y condiciones iniciales y de frontera	78

Capítulo V. Estimaciones directa y adjunta.

V.1 Estimaciones directas	80
V.2 Estimaciones adjuntas	81
V.3 Particularidades de las estimaciones directa y adjunta	82
V.4 Aplicación de las estimaciones adjuntas	
V.4.1 Localización óptima de plantas industriales	84
V.4.2 Varios ejemplos de estimaciones de emisiones de plantas industriales operativas	87

Capítulo VI. Modelo numérico del transporte y difusión de contaminación en la ciudad de Guadalajara.

VI.1 Discretización del modelo en espacio.	90
VI.2 Discretización del modelo en tiempo.	92

VI.3 Método de factorización para resolver los problemas separados unidimensionales. Caso del modelo directo.	94
VI.4 Discretización del problema adjunto.	97
VI.5 Método de factorización para el modelo adjunto.	99
VI.6 Estimaciones discretas del modelo directo y adjunto.	101

Capítulo VII Experimentos Numéricos

VII.1 Selección de las zonas ecológicamente sensitivas y parámetros para experimentos numéricos.	103
VII. 2 Soluciones del problema adjunto para 4 zonas, viento climático tipo I.	106
VII.3 Soluciones del problema adjunto para 4 zonas, viento climático tipo II.	111
VII.4 Comportamiento temporal de las funciones de peso, $g(r, t)$	116
VII.5 Aplicación de las soluciones adjuntas en estimaciones de niveles de contaminación para 4 zonas.	121
VII.6 Otras aplicaciones del método adjunto en la Zona Metropolitana de Guadalajara	123
VII.7 Soluciones del problema directo.	127

Conclusiones	133
---------------------	-----

Referencias Bibliográficas	138
-----------------------------------	-----

Anexo

Programa de transporte de contaminantes en (x, y) espacio. Problema adjunto.	149
Programa de transporte de contaminantes en (x, y) espacio. Problema directo.	154

RESUMEN

Guadalajara, capital del estado de Jalisco es la segunda ciudad más grande en México. Un intenso crecimiento industrial y demográfico, sin una planeación integral han dado lugar a un desarrollo ambientalmente desequilibrado, y como consecuencia, malos índices de la calidad del aire. Para establecer un sistema de control sobre la atmósfera urbana se realiza un estudio integral del microclima, topografía y situación ecológica de la Zona Metropolitana de Guadalajara utilizando una base de datos de la estación climatológica de la Universidad de Guadalajara (1881-1999) y de 8 estaciones de la Red Automática de Monitoreo Ambiental (RAMA) perteneciente a la Comisión Estatal de Ecología de Jalisco (1994-1999). Las series de datos comprenden registros de temperatura, precipitación, presión atmosférica, dirección y velocidad del viento, ozono, monóxido de carbono, dióxido de nitrógeno, dióxido de azufre y partículas suspendidas (fracción respirable). El impacto de las emisiones industriales sobre el área metropolitana de la ciudad de Guadalajara se estima por medio de las concentraciones promedio de un contaminante en algunas zonas ecológicamente importantes. Se analiza la dependencia de estas estimaciones con el viento, las posiciones y las tasas de emisión de las plantas industriales. El estudio está basado en el uso de varias soluciones de dos modelos: el de transporte de contaminantes y su adjunto. Se muestra que las soluciones del modelo adjunto aportan información importante sobre el papel que cada fábrica juega en el proceso de contaminar una u otra zona ecológica. Tales soluciones se calculan con ayuda de esquemas en diferencias finitas basados en el método de separación y son balanceados, absolutamente estables y de segundo orden de aproximación con respecto a todas las variables del problema. Como resultados más importantes obtenidos en este trabajo mencionaremos: estimación de las características climatológicas de la zona de estudio y su variación en tiempo y espacio; estimación de la eficiencia de la RAMA; determinación de los patrones de la distribución anual y diurna de los contaminantes monitoreados; determinación de las zonas ecológicamente vulnerables en la ciudad; desarrollo de un modelo bidimensional simple de transporte de contaminantes y de su adjunto; derivación de las estimaciones de los niveles de contaminación y el estudio de su sensibilidad, cálculo de las funciones de influencia de varias fábricas preseleccionadas; localización óptima de nueva planta industrial; estimación de los niveles de contaminación en Guadalajara.

ABSTRACT

Guadalajara, being the capital of Jalisco State, is the second largest city of Mexico. An intensive chaotic industrial and demographical growth has resulted in an unbalanced development from the point of view of environmental protection. An integral study of the microclimate, topography and ecological situation of the Guadalajara Metropolitan Zone (GMZ) is carried out in order to establish a system of control for urban air quality. The study is based upon large series of climatological data obtained from the meteorological station of the University of Guadalajara (1881 – 1999), and five-years of data (1994-1999) from the Automatic Environmental Network (8 stations) belonging to the State Ecological Commission of Jalisco. The database contains observations of temperature, precipitation, atmospheric pressure, relative humidity, wind velocity and direction, ozone, carbon monoxide, nitrogen dioxide, sulfur dioxide, and suspended particles. The impact of industrial emissions on the GMZ is estimated by means of average pollution concentrations in a few ecologically sensitive zones of the area. We study the dependence of these estimates on characteristics wind and upon emissions rates and positions of industrial plants is studied. The study is based upon solutions to the pollution transport model and its adjoint. It is shown that the adjoint model solutions provide valuable information on the role of each industrial plant in polluting one or another ecologically important zone. These solutions are calculated with balanced, absolutely stable 2nd-order finite-difference schemes based on the splitting method. The more important results obtained from this work were an estimate of climatological characteristics in the region of study, and their variations in time and space, an estimate of the efficiency of the Automatic Environmental Network, the daily and yearly distribution pattern of the monitored pollutants, a determination of the ecologically vulnerable regions of the city, the development of a simple two-dimensional model of transport and diffusion of pollutants and its adjoint; derivation of the estimation of pollution levels and their sensitivity to parametric variations; computation of the weight function for several selective industrial plants; optimum localization of new industrial plants; an estimation of pollution levels in Guadalajara.

Palabras claves: Modelo de transporte y difusión, modelo adjunto, contaminación del aire

INTRODUCCIÓN

Durante las últimas décadas México, al igual que la mayoría de los países del mundo, experimenta graves problemas de contaminación ambiental, en donde la contaminación atmosférica es quizás la de mayor relevancia. No es de asombrarse, ya que la contaminación del aire es un fenómeno de localización restringida, especialmente a zonas industriales y metropolitanas en donde normalmente se concentra la mayor parte de la población.

El problema de contaminación atmosférica es muy amplio y complejo. La dificultad de controlarlo consiste de diversos factores: la cantidad y variedad de las fuentes de contaminación, la complejidad de las reacciones físicoquímicas de los contaminantes en el aire, microclima y condiciones meteorológicas presentes, actividades de asentamientos humanos y políticas de las entidades que participan en la solución del problema.

En 1973 la Secretaría de Salubridad y Asistencia, con participación del Programa de las Naciones Unidas para el desarrollo, elaboró un proyecto en el que se pretendía realizar un estudio completo de contaminación atmosférica, lo que incluía un inventario de fuentes de emisiones, monitoreo de contaminantes atmosféricos, control de la calidad del aire entre otros. Este proyecto se realizó en el período de abril 1975 a febrero de 1977 en México DF, Monterrey, N.L. y Guadalajara, Jal. creando una red manual de 48 estaciones en total y utilizando una metodología adecuada. Sin embargo, el estudio se llevó a cabo con muchas deficiencias y dificultades (Bravo, 1987).

En el año 1983 se iniciaron los trámites para la instalación de una nueva red automática de monitoreo de calidad del aire en la ciudad de México DF., la cuál inició su operación en el año 1985 con 25 estaciones. Ocho años después, en noviembre de 1993, se instaló otra red automática con 8 estaciones en Guadalajara, Jal., en donde cada una de las estaciones fue equipada para medir los contaminantes: ozono (O_3), fracción respirable por partículas suspendidas (PM_{10}), monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrógeno (NO_x), bióxido de nitrógeno (NO_2), bióxido de azufre (SO_2), y cuatro parámetros meteorológicos: temperatura (t , °C), humedad relativa (RH , %), velocidad (v , m/s) y dirección del viento (d , grad), generando la información que permite realizar un análisis completo de la problemática de contaminación atmosférica.

El análisis realizado en el marco de esta tesis de los registros recopilados de la Red Automática de Monitoreo Ambiental (RAMA) en Guadalajara, Jal. manejada por la Comisión Estatal de Ecología (COESE) permitió establecer que entre los principales contaminantes que afectan la calidad del aire en la ciudad, el primer lugar lo ocupa el ozono, el segundo las partículas suspendidas (fracción respirable), el tercer y cuarto lugar bióxido de nitrógeno y monóxido de

carbono respectivamente y el quinto bióxido de azufre. Cabe mencionar que a partir del verano de 1998 cada una de las estaciones en la Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG) fue equipada adicionalmente con sensores para medir concentración de hidrocarburos lo que puede ampliar y actualizar las estadísticas del trabajo presente.

La industria principal que influye en la contaminación atmosférica es la energética. México es un país con poca eficiencia en el uso de energéticos y requiere de mayores cantidades de energía primaria para producir una misma cantidad de bienes y servicios que en otras partes del mundo, en donde el desarrollo industrial es superior y los climas a menudo menos favorables (Bravo, 1987). El consumo de gasolina en el sector del transporte representa el mayor gasto relativo de energía y la mayor aportación de contaminantes con respecto al volumen total (monóxido de carbono, óxidos de nitrógeno, hidrocarburos y plomo). Las mayores emisiones de bióxido de azufre, óxidos de nitrógeno y partículas suspendidas totales encuentran su contraparte proporcional en la industria y los servicios (González, 1995). La Zona Metropolitana de Guadalajara no es ajena a esta problemática ambiental, su alta densidad demográfica y vehicular y su gran actividad industrial se han reflejado recientemente en los altos niveles de contaminación que en la actualidad prevalecen. El estudio de la situación ecológica de la Zona Metropolitana de Guadalajara arroja la información que se discute en el primer capítulo del presente trabajo.

El análisis de la problemática ambiental en la República Mexicana muestra una marcada relación entre la contaminación y la orografía del medio, el tamaño y la dinámica de los asentamientos humanos y el crecimiento económico. La presión ejercida por el crecimiento demográfico e

industrial y la falta de planeación integral del uso del suelo y sus recursos han dado lugar a un desarrollo ambientalmente desequilibrado. Existen variables que contribuyen en los niveles de contaminación por permitir ya sea la dispersión o bien la acumulación de los agentes contaminantes en una área determinada, de ahí la importancia de tomar en consideración los factores climáticos, geográficos y características meteorológicas (Jáuregui, 1988; Jáuregui y Romales, 1996; Oke et al, 1992). Su evaluación se realiza en el segundo capítulo del presente trabajo.

Finalmente, para la investigación integral del microclima de la ZMG, su topografía y situación ecológica, como objetivo final se aplicó un modelo matemático y numérico de transporte y difusión de contaminantes que permite pronosticar los niveles de contaminación del aire en la ciudad y poder así implementar algunas acciones para controlar la calidad del aire urbano (Skiba, 1993, 1997). Para poder discutir las particularidades del modelo propuesto se revisan los principios físicos del problema de propagación y difusión de contaminantes (Berlyand, 1975 y 1991; Pasquill, 1974; Nicuwstadt y Van Dop, 1982; Marchuk, 1986 y Turner, 1994) y su aplicación en los modelos ya conocidos. La revisión de la física del problema se da en el tercer capítulo.

Para resolver el problema de control de contaminación en la ciudad no hay por el momento ninguna alternativa basada en modelos analíticos o en laboratorio (altos costos de equipos y experimentación en general), mientras la modelación matemática es la única que permite simular los niveles de contaminación, desarrollar estrategias de manejo de emisiones, etc. ya que la experimentación en la computadora es la más barata y no ofrece riesgo alguno. Además la

modelación por computadora es el método que da mayores posibilidades en la estimación de la influencia de cada uno de los parámetros de modelación en problemas de contaminación del medio ambiente. La formulación de un modelo matemático del problema de transporte de contaminantes se da en el cuarto capítulo de la tesis, en donde se describe su postulación, condiciones de frontera e iniciales y se demuestra la unicidad y estabilidad de la solución a través de la ecuación de balance y su norma, además se describe la técnica de ecuaciones adjuntas que se utiliza en la formulación del modelo adjunto que se desarrolla en este mismo capítulo.

El capítulo cinco muestra la solución del modelo de transporte de contaminantes, el denominado estimador directo y la solución del modelo adjunto, llamado estimador adjunto, se discuten además las ventajas y desventajas de cada modelo y particularidades de sus estimadores.

En el siguiente capítulo para ambos modelos se desarrollan los correspondientes esquemas numéricos usando las diferencias finitas y los métodos de balance y de separación (Marchuk y Skiba, 1976; Skiba 1993). Los esquemas numéricos obtenidos aproximan modelos continuos con el segundo orden respecto a los tamaños de malla y pasos de tiempo. Estos esquemas son absolutamente estables y balanceados. Se describe en detalle el algoritmo numérico para hallar la solución del modelo directo y su adjunto.

En el último capítulo de la tesis se discuten los resultados de los experimentos numéricos realizados para diferentes tipos de viento climatológico. Los experimentos desarrollados con el modelo directo simulan los niveles de contaminación para monóxido de carbono siendo la emisión típica de las fuentes móviles consideradas en el trabajo presente como fuentes lineales y bióxido de

azufre en calidad de emisión típica de fuentes fijas o de industria en general. El modelo adjunto se aplicó para calcular las funciones de peso para varias fuentes fijas de emisiones en la ciudad, para determinar el papel (la contribución) de cada fábrica en contaminar una zona ecológica, para estudiar la sensibilidad de las estimaciones de las soluciones del modelo con respecto a variaciones en el número de fábricas, en las posiciones de las fábricas, en las tasas de emisión de contaminante de cada fábrica, en los parámetros externos del modelo (coeficientes σ , μ , viento, etc.) y en la distribución inicial del contaminante en toda el área. El método adjunto aplicado en este trabajo permite resolver varios problemas importantes de la estimación, regulación y control sobre contaminantes en el área, por ejemplo, la búsqueda de una posición óptima para una fábrica nueva, la detección de las fábricas que violan normas preestablecidas de las tasas de emisión, el control (determinación) de las tasas de emisión de cada fábrica con el fin de bajar el nivel de contaminantes en las zonas hasta una norma sanitaria.

Finalmente, se dan las conclusiones sobre la estimación de la contaminación y su variación en algunas zonas ecológicamente sensitivas situadas sobre el territorio de la Zona Metropolitana de Guadalajara.

El apéndice contiene los programas computacionales para ambos modelos.

CAPITULO I. Situación ecológica de la Zona Metropolitana de Guadalajara.

I. 1 Generalidades

La ciudad de Guadalajara, capital del estado de Jalisco es la segunda ciudad más grande en México. Su área urbana se ubica en una región geográfica con coordenadas: latitud 20°41' N., longitud - 103°20' W., altitud - 1578 m sobre el nivel del mar. La Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG), con un área de 340 Km.², se sitúa principalmente sobre el valle de Atemajac (Fig. 1.1), y está rodeada por los siguientes accidentes geográficos. Hacia el Norte y Noreste de la ciudad se localiza una falla geológica conocida como barranca de Huentitan - Oblatos el Alto, en el fondo de la cual fluyen los ríos Verde y Santiago. Al este se encuentra un macizo reolítico muy erosionado llamado Sierra de San Esteban. Al sur y sudeste se localiza el valle de Toluquilla, también considerado parte de la ZMG, de la cual es separado por una pequeña cordillera basáltica y algunos volcanes basálticos, como los cerros La Cúpula, de la Reina o de Tonalá y de Cholo. Al sudoeste se encuentran varios cerros de importante altura como el cerro El Cuatro, de las Juntas, Santa María de Tequepexpan y el cerro del Tesoro. Al oeste se limita por la sierra de la venta del Astillero (Díaz, 1946). Esta cadena de cerros rodea al valle en forma de letra U, determinando su cuenca atmosférica y régimen de los vientos locales. Alrededor de la ciudad se encuentran pocas áreas boscosas, de las cuales la realmente importante y considerada como pulmón de la ciudad se llama bosque La Primavera, localizada en las afueras de la ciudad hacia el sur - suroeste. El bosque (parque) "Los Colomos" se localiza dentro de la urbe y forma la zona verde más importante dentro de la ciudad. Otro objeto geográfico importante que además influye sobre el clima de Guadalajara es el lago de Chapala (con un área de 1112 Km.²), el lago más grande de la República Mexicana, y que se encuentra a escasos 40 Km. al sur - sudeste de la ZMG.

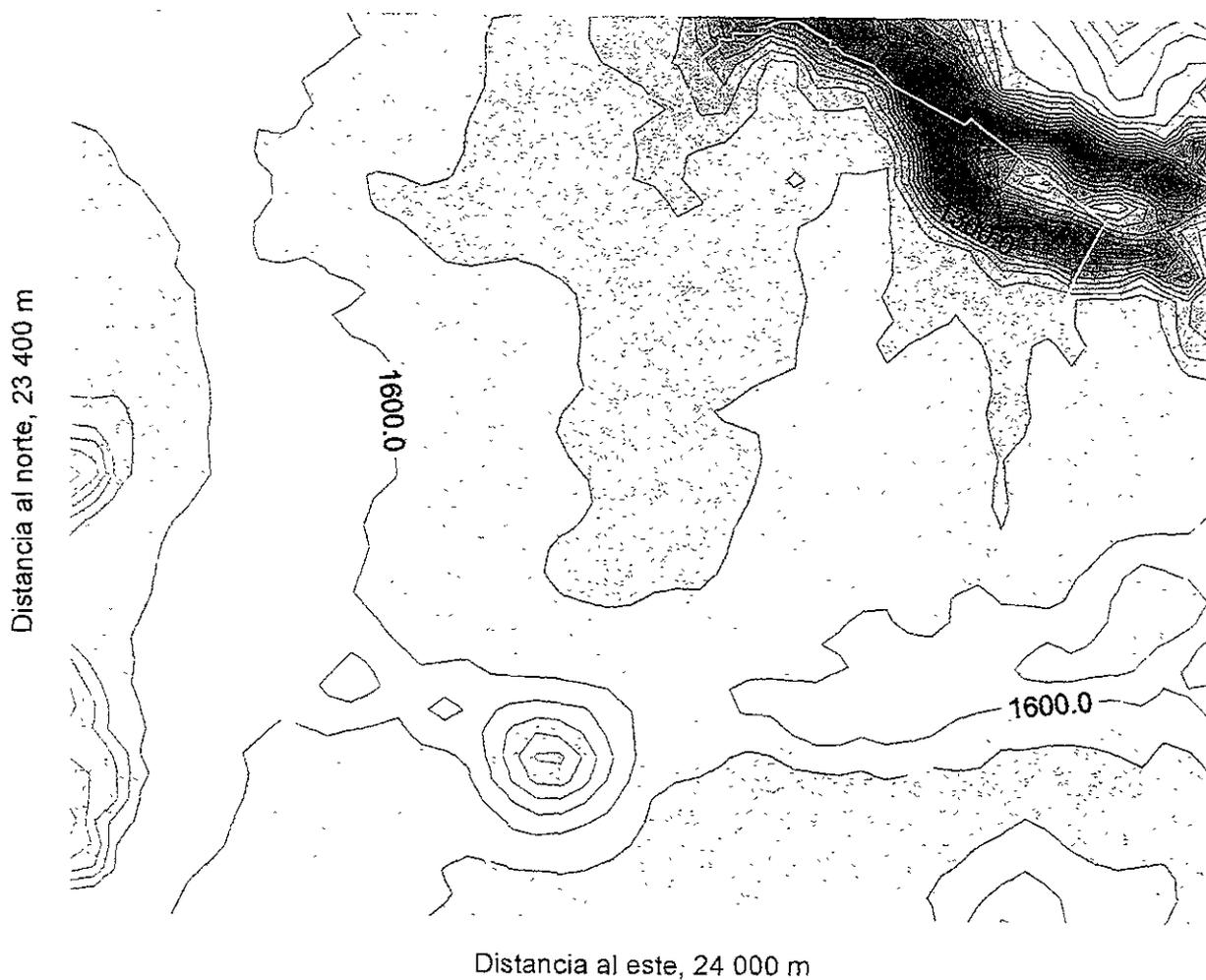


Fig. 1.1 Zona Metropolitana de Guadalajara situada sobre el Valle Atemajac, Jalisco, México.

Un intenso crecimiento industrial y demográfico, sin una planeación integral han dado lugar a un desarrollo ambientalmente desequilibrado, y como consecuencia, malos índices de la calidad del aire en la ciudad la cual varía de no satisfactoria a mala casi en 7 de cada 10 días del año. Para establecer un sistema de control sobre la atmósfera urbana se realiza un estudio integral del microclima, topografía y situación ecológica de la Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG). Este análisis se realizó utilizando una base de datos de 8 estaciones de la Red Automática de

Monitoreo Ambiental (RAMA) por un período comprendido de 1994 a 1999, proporcionada por la comisión Estatal de Ecología de Jalisco (COESE). La serie de datos comprende registros horarios de cinco contaminantes: ozono, monóxido de carbono, bióxido de nitrógeno, bióxido de azufre y partículas suspendidas.

Para resaltar la importancia de los estudios y control sobre la calidad del aire se hizo el cálculo de frecuencias de días con diferentes niveles de contaminación según los Índices Mexicanos de Calidad del Aire en la Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG) de 1994 a 1999, proporcionados por la COESE. Este estudio arrojó los siguientes datos: en 1994 se registró un 70% de los días con la calidad de aire no satisfactoria a mala, en 1995 aumentó a 74%, en 1996 el total fue de 77%, en 1998 y 1999 disminuyó a 68% respecto de los días que no responden a los estándares de calidad del aire establecida por las normas mexicanas (Tabla 1.1).

Tabla 1.1. Normas mexicanas de Calidad del Aire.

Contaminante	Valor norma	Período	Valor norma	Período	Normatividad
Ozono, O ₃	0.110 ppm	1 hora			NOM-020-SSA1-1993
Bióxido de azufre, SO ₂	0.130 ppm	24 horas	0.03 ppm	med. anual	NOM-022-SSA1-1993
Bióxido de nitrógeno, NO ₂	0.210 ppm	1 hora			NOM-023-SSA1-1993
Monóxido de carbono, CO	11.0 ppm	8 horas			NOM-021-SSA1-1993
Fracción respirable por partículas suspendidas, PM10	150.0 µg/m ³	24 horas	50 µg/m ³	med. anual	NOM-025-SSA1-1993

Fuente: Página de Internet con la dirección: www.coese.gob.mx

Analizando datos con el fin de determinar los contaminantes de mayor incidencia en el problema de calidad del aire en la ZMG para un período de seis años (1994-1999), obtenemos la siguiente relación: 1^{er} lugar: partículas suspendidas menores de 10 μm o fracción respirable, 2^o lugar: ozono, 3^{er} lugar: monóxido de carbono, 4^o lugar: bióxido de nitrógeno, 5^o lugar: bióxido de azufre.

Es importante notar que las estadísticas pasadas acumuladas (1975-1992) con datos tomados de estaciones manuales determinaron como contaminantes principales los gases bióxido de nitrógeno y bióxido de azufre (Zúñiga, 1993). La diferencia obtenida respecto a las concentraciones de SO_2 durante estos dos períodos se puede explicar por el cambio de calidad de combustible en la industria, la cual utilizaba diesel rico en azufre. El nuevo combustible que se utiliza en la industria de la ZMG a partir de los años noventa y que posee una menor cantidad de azufre en su composición química según la información proporcionada por la COESE, minimizó la emisión de SO_2 . Sin embargo para ciertas temporadas y años en particular (en 1997 se registró la concentración máxima promedio anual de SO_2 dos a tres veces mayor que en los años 1994, 1996, 1998 y 1999) este contaminante muestra valores arriba de la norma de calidad del aire ($340 \mu\text{g}/\text{m}^3$ o 0.13 ppm).

El análisis del comportamiento de las partículas en suspensión (fracción respirable) muestra altas concentraciones observadas durante los meses de noviembre a marzo para ambos períodos: actual (1994 - 1999) y anterior (1975 - 1992). Este comportamiento está condicionado por la presencia de una circulación anticiclónica dominante durante el período de invierno, la cual se caracteriza

con una gran estabilidad de la atmósfera acompañada con efectos de inversiones térmicas. Estas condiciones de estancamiento impiden la dispersión de la contaminación y como consecuencia produce su acumulación (Jáuregui et al., 1992, 1997b; Davydova, 1993). El fenómeno de acumulación de las partículas fracción respirable actualmente presenta problemas tanto de exposición aguda como de exposición crónica violando su promedio de $50.0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Tabla 1.1) en forma significativa. De tal manera, que en 1994 el promedio anual fue de $83.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$, en 1996 se observó $76.3 \mu\text{g}/\text{m}^3$, en 1997 el promedio anual de PM_{10} fue $57.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$, en 1998 alcanzó el 73.4 y en 1999 se registró el $65.0 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

I.2 Análisis de la variación temporal de contaminantes

Utilizando las técnicas estadísticas descriptivas se estableció que cada uno de los contaminantes poseen distribuciones: diurna, semanal y anual. Las figuras 1.2 y 1.3 presentan las curvas típicas de distribuciones diurna y anual de CO , NO_2 , O_3 , SO_2 y PM_{10} calculadas para el período de 1994 a 1999. Analizando los resultados de su comportamiento se puede resaltar lo siguiente:

1. Los contaminantes monóxido de carbono, bióxido de azufre y partículas suspendidas poseen un doble máximo, el principal a las 9 a.m. y secundario a las 9 p.m. Los dos máximos del comportamiento diurno coinciden con las horas de máximo tráfico en la zona urbana (horas pico). La mayor magnitud del máximo en las horas matutinas se explica por una alta estabilidad de la atmósfera matutina, que impide la dispersión de los contaminantes (Fig. 1.2, curvas $-\diamond-$, $-o-$, $- \cdot -$, $- \square -$, $- \times -$).

2. El contaminante de bióxido de nitrógeno también tiene un doble máximo, en donde el principal se registra a las 10 a.m. y el secundario igual a las 9 p.m. (Fig. 1.2, curva -x-).

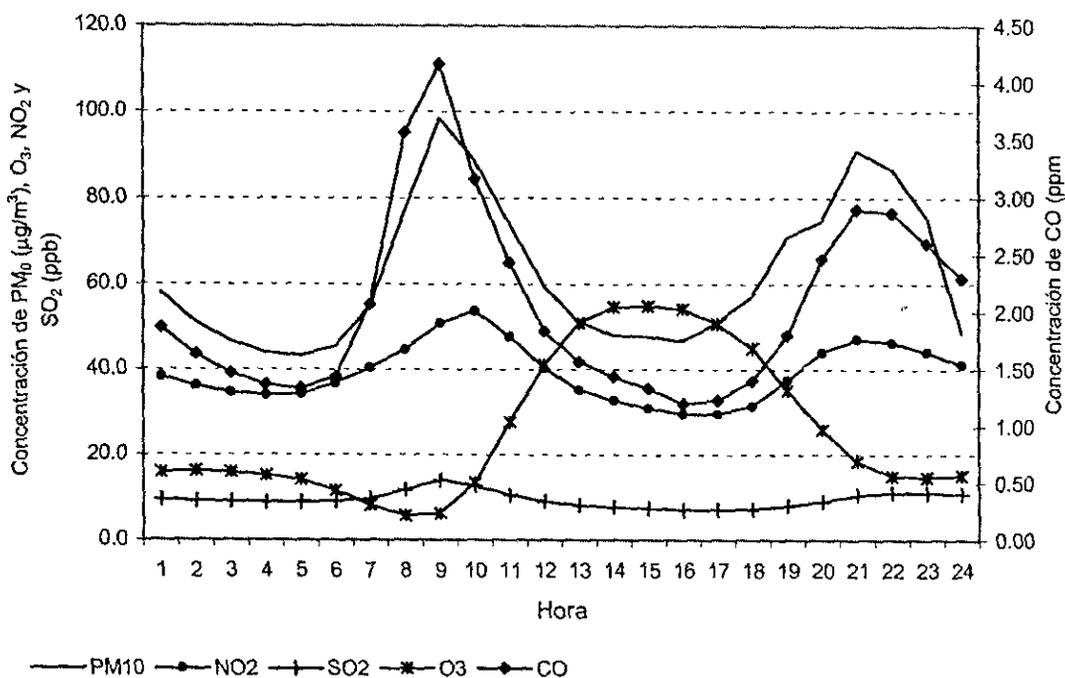


Fig. 1.2 Distribución horaria de los contaminantes O_3 , CO , NO_2 , PM_{10} y SO_2 , en la ZMG.

3. El ozono posee el único máximo a las 14 - 15 horas y un mínimo a las 8 a.m.. Ya que ozono es un contaminante fotoquímico, su distribución esta acorde con el comportamiento diurno de radiación global, registrando el máximo aproximadamente una hora antes de la temperatura máxima observada de la región (Fig. 1.2, curva -x-).

4. El principal máximo en el comportamiento anual de los promedios mensuales PM_{10} y CO se observa en el mes de enero y el segundo en el mes de mayo, en donde el principal máximo puede ser explicado por el efecto de acumulación de los contaminantes en el transcurso de los

meses de invierno en presencia de la circulación anticiclónica dominante y por lo tanto una atmósfera muy estable (Fig. 1.3, curvas — y -◆-).

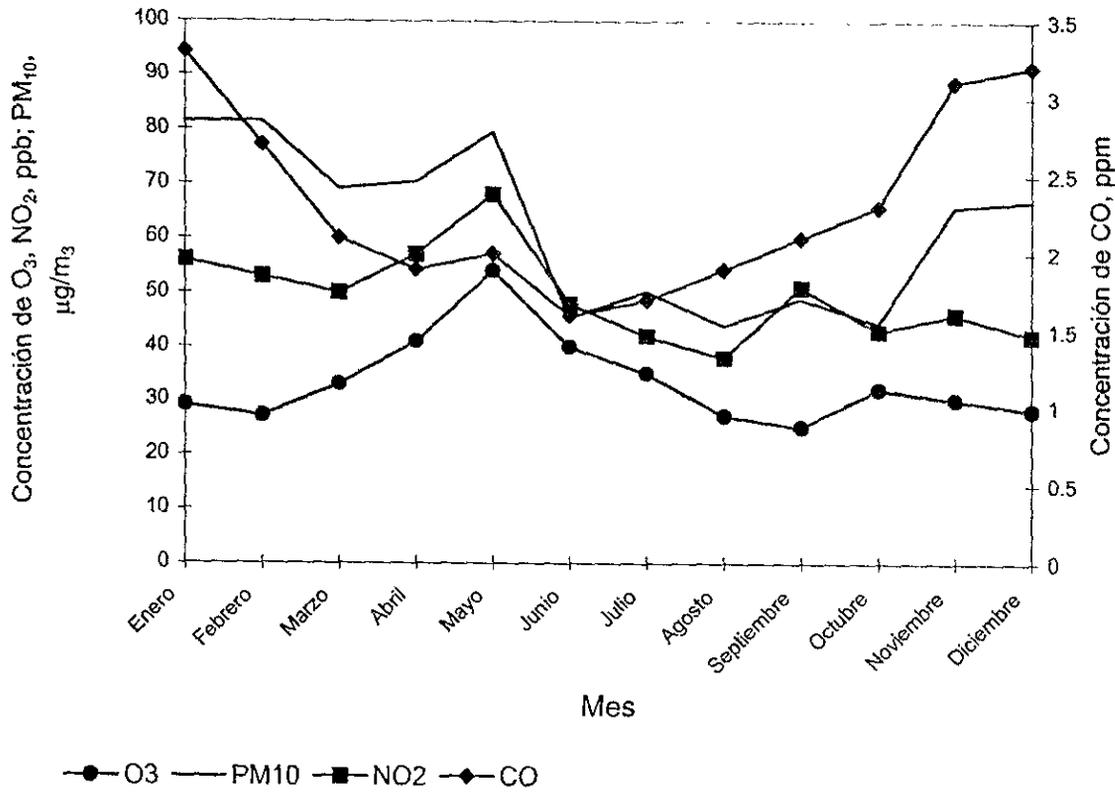


Fig. 1.3. Distribución anual de contaminantes en la ZMG.

5. En el caso de ozono se registró el único máximo en el mes de mayo, cuando se observan máximo flujo de radiación global y máximas temperaturas en la región de estudio (Fig. 1.3, curva -○-).
6. El bióxido de nitrógeno posee el principal máximo en el mes de mayo igual que el ozono, pero además tiene un máximo secundario, registrado en enero (Fig. 1.3, curva -◆-).

I.3 Particularidades de los campos de contaminantes en la región de estudio

Con el fin de realizar el análisis de la distribución espacial se seleccionaron los contaminantes de PM_{10} , CO y SO_2 para los cuales se construyeron los campos de su distribución mensual, por temporada y anual utilizando la información de las 8 estaciones de la RAMA y el método de interpolación de Shepard (Kincaid y Cheney, 1994). Entre los resultados obtenidos resaltan:

1. La distribución espacial de la media anual de partículas suspendidas fracción respirable muestra que el máximo del promedio anual, $P\overline{M}_{10}$ ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) calculado para los años 1996 a 1999 se registró en la estación "Miravalle" (Fig. 1.4).
2. La región sur de la Zona Metropolitana de Guadalajara muestra niveles de concentración de $P\overline{M}_{10}$ mayores que la región norte de la ciudad, aunque ambas regiones registraron valores de $P\overline{M}_{10}$ superiores a las normas de exposición crónica ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$), excepto el año 1999 cuando en la región norte de la ZMG se observaron los niveles de $P\overline{M}_{10} < 50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Fig. 1.4 d).
3. La distribución espacial de la concentración máxima promedio anual de partículas suspendidas fracción respirable muestra que su epicentro se registró en la misma estación "Miravalle" (Fig. 1.5).
4. Se observaron los siguientes niveles de la concentración máxima promedio anual: en 1996 el máximo promedio fue de 181.9, en 1997 se registro 153.5, en 1998 y 1999 fueron 181.2 y 159.2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ respectivamente. Sin embargo en la estación Miravalle se observa una tendencia creciente en la concentración media anual y máxima promedia anual.

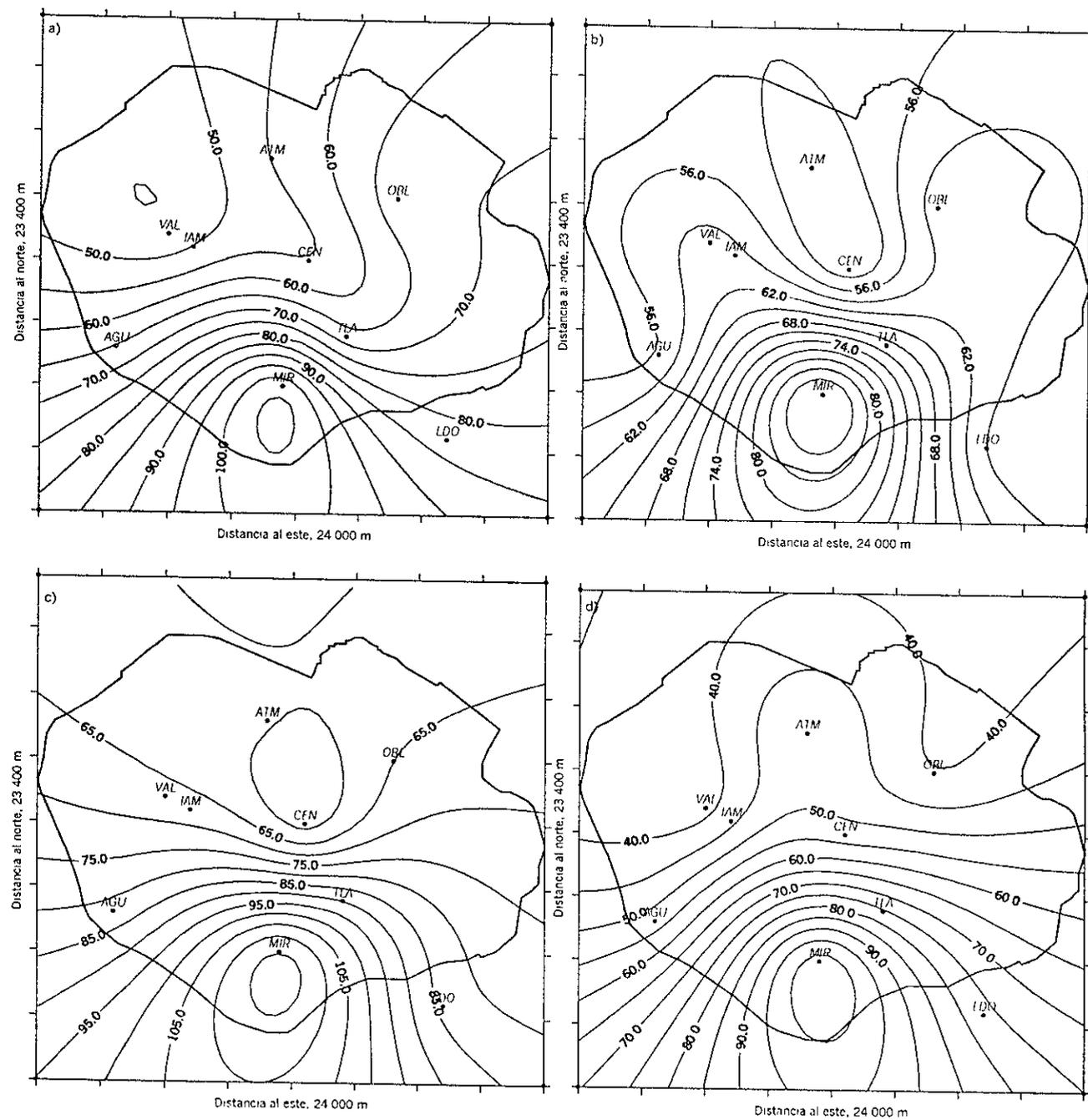


Fig. 1.4 Distribución espacial de la concentración media anual de PM_{10} ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) en la ZMG:

a) 1996, b) 1997, c) 1998 y d) 1999.

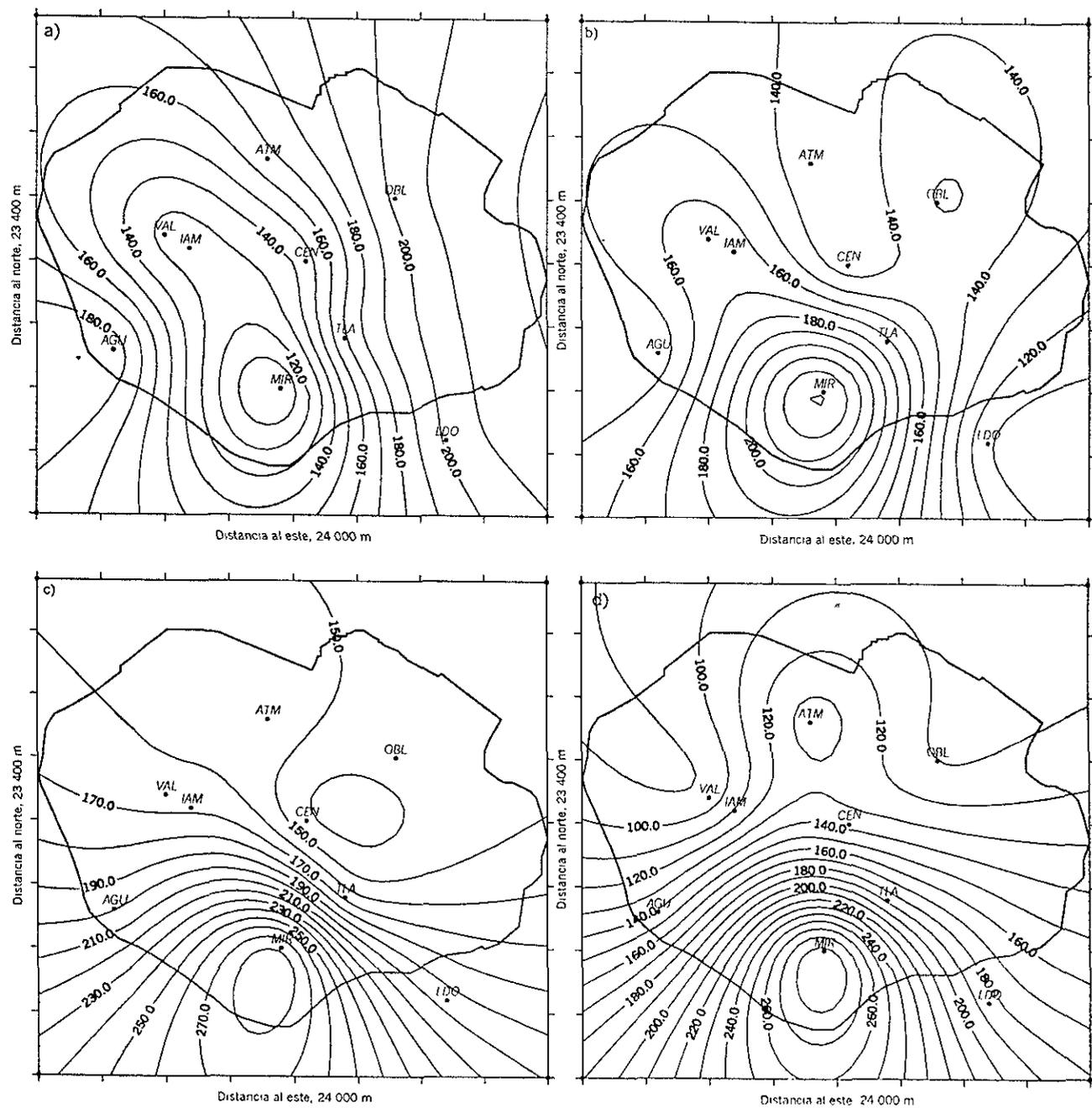


Fig. 1.5 Distribución espacial de la concentración máxima promedio anual de PM_{10} ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) en la ZMG: a) 1996, b) 1997, c) 1998 y d) 1999.

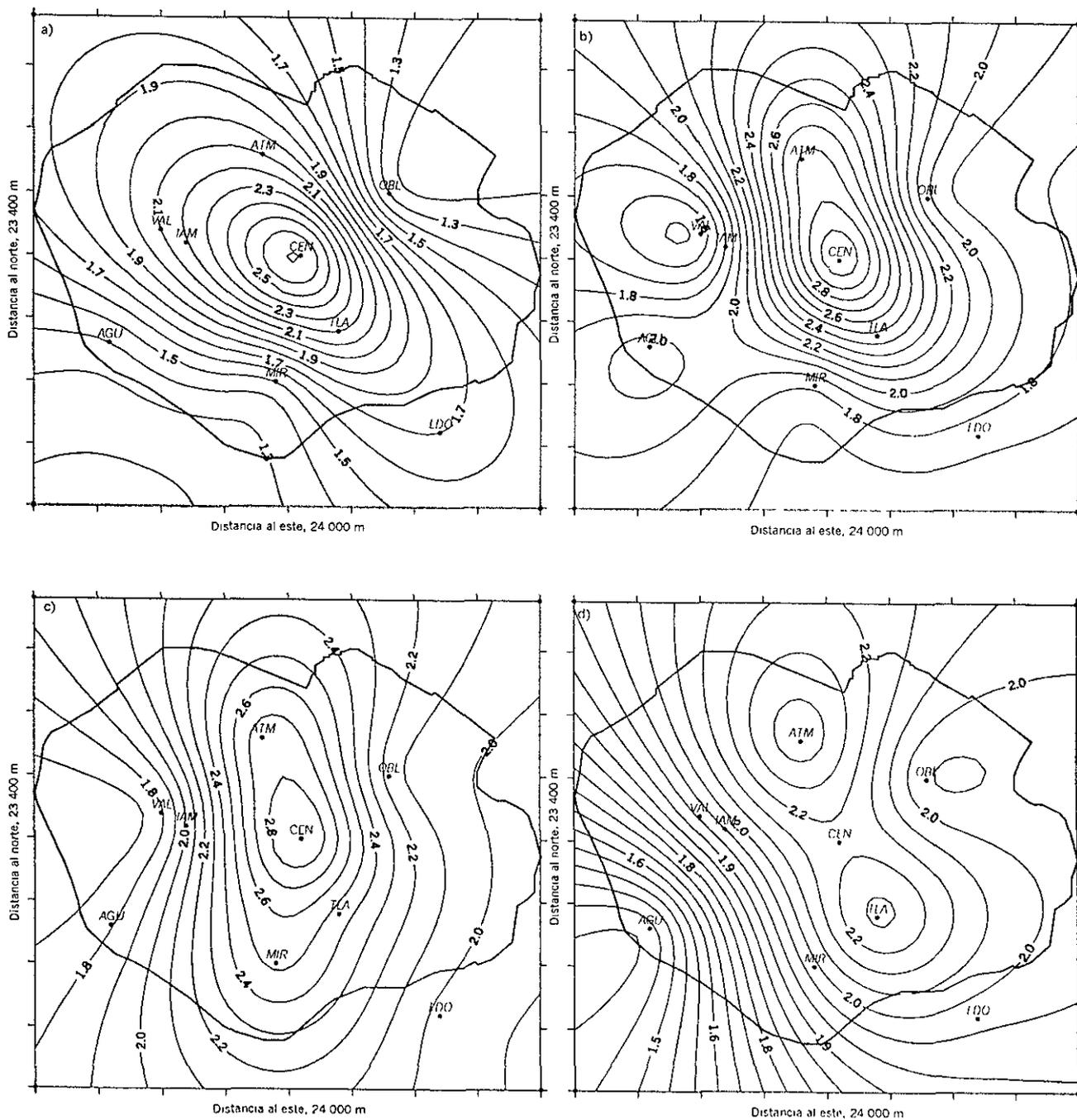


Fig. 1.6 Distribución espacial de la concentración promedio anual de CO (ppm) en la ZMG:

a) 1996, b) 1997, c) 1998 y d) 1999.

5. La distribución espacial de la concentración media anual de CO (ppm) para 1996 a 1999 muestra campos homogéneos con el único máximo registrado en el centro de la ciudad, estación “CEN” (Fig. 1. 6).
6. Los campos de la concentración media anual de la máxima concentración de CO (ppm) también son homogéneos y registran el único máximo entre las estaciones “CEN” y “ATM” (Fig. 1.7) y, además permiten observar una tendencia decreciente de la concentración máxima promedio anual (de 6.0 ppm en 1996 a 5.5 y 5.7 ppm en 1998 y 1999 respectivamente), mientras que la concentración máxima observada de PM_{10} se registro en 1998.
7. La distribución espacial de la concentración media anual de SO_2 (ppb) para 1996 a 1999 muestra campos heterogéneos con el único máximo registrado en la estación de Miravalle durante 1996 (Fig. 1. 8 a); un doble máximo los años 1997 y 1998 registrados en la estación “ATM” y entre las estaciones “CEN” y “MIR” (Fig. 1. 8 b y c); y en 1999 el único máximo se observa en la estación “CEN” (Fig. 1. 8 d).
8. Los campos de la concentración media anual de la máxima concentración de SO_2 (ppb) también son heterogéneos registrando la zona de concentración máxima entre las estaciones “VAL”, “CEN”, “TLA” y “MIR” (Fig. 1.9 a); el único máximo en la estación “ATM” en 1997 (Fig. 1.9 b); la zona de concentración máxima entre las estaciones “VAL” y “MIR” en 1998 (Fig. 1.9 c) y, d) un doble máximo en las estaciones “VAL” y “TLA” en 1999 (Fig. 1.9 d); además permiten observar que la concentración máxima promedia anual del bióxido de azufre en 1997 es dos veces mayor que en 1996 y 3 veces mayor que en los años 1998 y 1999.

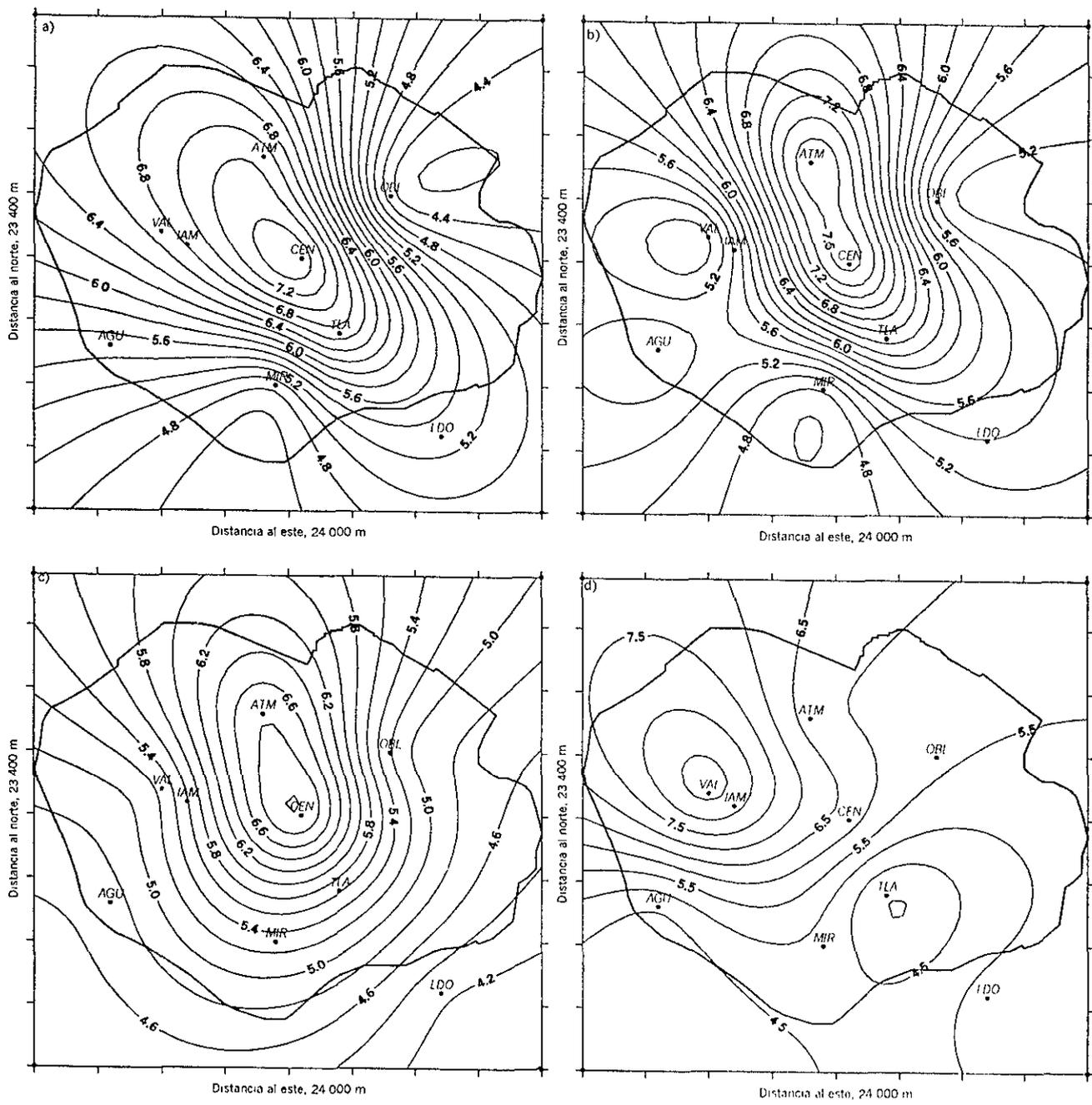


Fig. 1.7. Distribución espacial de la concentración máxima promedio anual de CO (ppm) en la ZMG: a) 1996, b) 1997, c) 1998 y d) 1999.

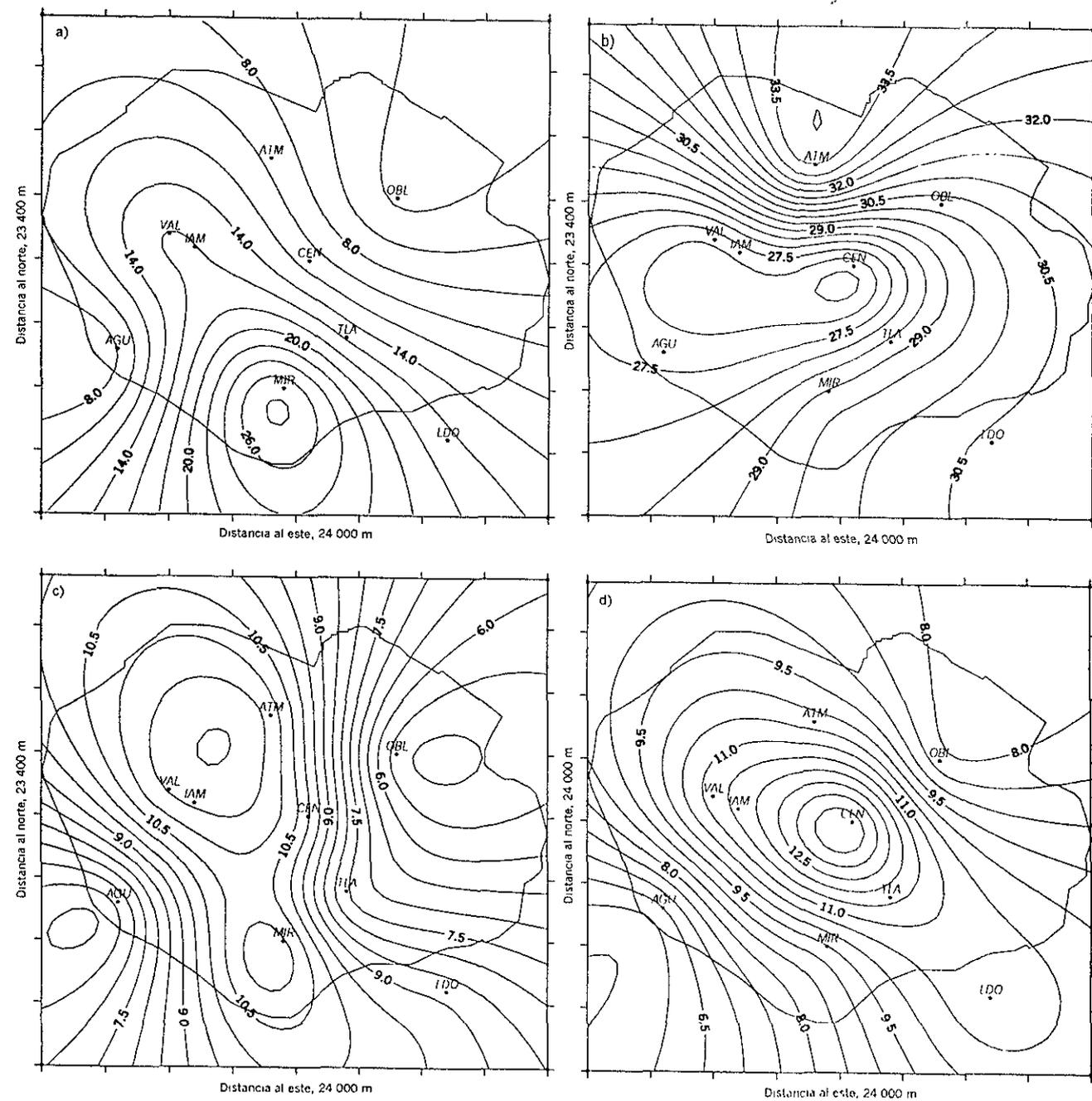


Fig. 1.8 Distribución espacial de la concentración promedio anual de SO_2 (ppb) en la ZMG:

a) 1996, b) 1997, c) 1998 y d) 1999.

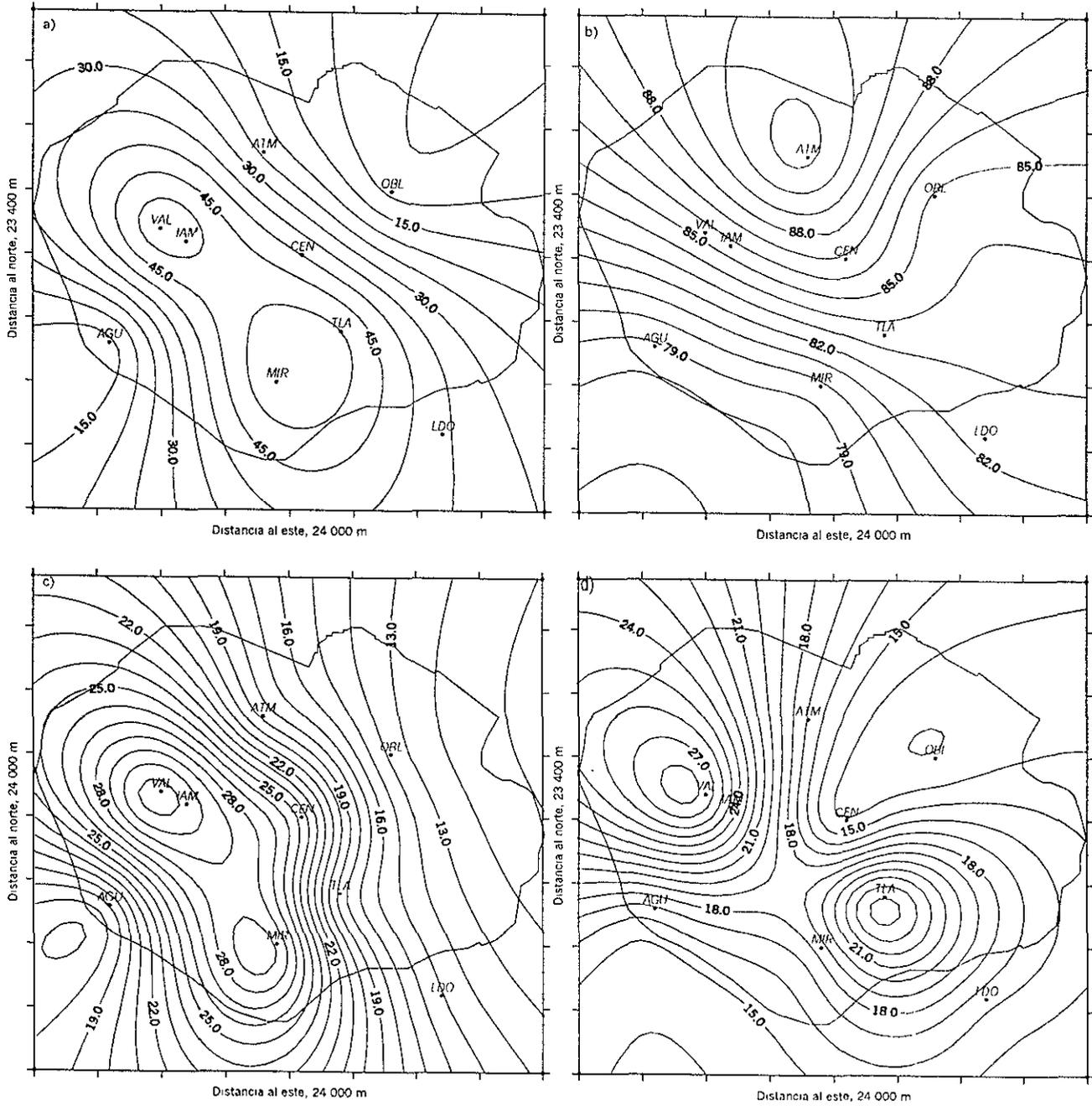


Fig. 1.9 Distribución espacial de la concentración máxima promedia anual de SO_2 (ppb) en la ZMG: a) 1996, b) 1997, c) 1998 y d) 1999.

I.4 Estimación de la eficiencia de la red de monitoreo ambiental (RAMA) de la Zona

Metropolitana de Guadalajara.

Uno de los objetivos principales del programa operativo de la Red Automática de Monitoreo Ambiental (RAMA) instalada en noviembre de 1993 es diagnosticar los niveles de contaminación en la ZMG con el fin de prever las situaciones ambientales críticas y poder aplicar a tiempo programas de contingencias ambientales. Otra de las tareas de importancia es la generación de una base de información ambiental que permita la aplicación de modelos matemáticos de transporte y difusión de contaminantes con el fin de predecir los niveles de contaminación en la región debido a las variaciones en las condiciones meteorológicas, régimen y cantidad de emisiones, etc. Su buena realización depende de la calidad y cantidad de los datos iniciales, es decir de la información que genera la RAMA, por lo que es muy importante realizar una estimación de la eficiencia de la red de monitoreo existente.

Con el fin de estimar la eficiencia de la red de monitoreo se aplicó la técnica de correlación espacial (Serón et al., 1993) e interpolación polinomial de Shepard (Kincaid y Cheney, 1994):

1. Se calcula el coeficiente de correlación múltiple entre las estaciones de monitoreo en la ZMG

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (C_{1i} - \bar{C}_1)(C_{2i} - \bar{C}_2)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (C_{1i} - \bar{C}_1)^2 \sum_{i=1}^n (C_{2i} - \bar{C}_2)^2}}, \quad (1.1)$$

donde

$$\bar{C}_1 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n C_{1i} \text{ y } \bar{C}_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n C_{2i} \quad (1.2)$$

Aquí C_{1i} y C_{2i} son i -ésimas mediciones de algún contaminante determinado en la estación 1 y 2 respectivamente, y \bar{C}_1 y \bar{C}_2 son los valores promedios de las n mediciones en las estaciones 1 y 2 respectivamente.

2. Se calcula la varianza explicada para cada serie de contaminantes en cada una de las estaciones, utilizando técnicas de análisis de varianza.

$$\text{Varianza explicada} = \frac{\sum_{i=1}^n (\tilde{C}_{ki} - \bar{C}_k)^2}{n - 2}$$

aquí \tilde{C}_{ki} es la estimación de cada i -ésima observación de algún contaminante determinado en k -ésima estación, \bar{C}_k es el valor promedio de las n mediciones de k -ésima estación.

3. Se calcula el coeficiente de correlación crítico (Ezekiel, 1941):

$$\text{Varianza explicada} = r^2_{\text{critico}} \quad (1.3)$$

4. Se compara el coeficiente de correlación crítico con los calculados según la formula (1.1). Si el coeficiente de correlación calculado es mayor que el crítico, entonces las dos estaciones están en una zona homogénea y, tal vez, duplican las observaciones. Si el coeficiente de correlación es igual ó próximo al coeficiente crítico entonces las estaciones están distribuidas en forma óptima y por lo tanto, la red se puede considerar eficiente. Si el coeficiente de correlación calculado es menor o incluso mucho menor que el coeficiente de correlación crítico, entonces entre las estaciones hay zonas de poco control ambiental, lo que puede introducir grandes errores en la realización de estimaciones de la calidad del aire y su pronóstico, sobre todo, cuando en este territorio sin monitoreo alguno, existen algunas fuentes moderadas de emisiones

5. Se analiza la distribución de la red de monitoreo y su eficiencia.

Siguiendo el esquema de análisis planteado anteriormente, se calcularon los coeficientes de correlación para la información original sin corregir. Los resultados obtenidos indican lo siguiente:

- No se pudo encontrar una correlación satisfactoria entre estaciones, cuando se usaron mediciones de bióxido de nitrógeno, debido a una falta grave de datos de mediciones en las estaciones Las Águilas (AGU) y Tlaquepaque (TLA).
- Los mismos resultados se obtuvieron en el caso de las observaciones sobre bióxido de azufre.
- Para recuperar los datos en las dos estaciones (AGU y TLA) se realizó la interpolación lineal a la matriz de datos originales y se aplicó el análisis de correlación espacial nuevamente sobre la matriz de datos recuperados. Sin embargo, la falta de información original impide la determinación del coeficiente de correlación espacial crítico para SO_2 , ya que en algunos casos la varianza explicada tuvo valores cercanos al cero.
- Los resultados del análisis de correlación para ozono son muy satisfactorios (Tabla 1.2). La varianza explicada calculada para cada una de las estaciones llega hasta 0.86 (Tabla 1.3), lo que permite calcular el coeficiente de correlación crítico para la ZMG y determinar la distancia óptima que debe existir entre cada par de estaciones de monitoreo.

Tabla 1. 2. Correlaciones espaciales de ozono en la ZMG.

	AGU	ATM	CEN	LDO	MIR	OBL	TLA	VAL
AGU	1.0000	0.8964	0.8578	0.7300	0.7712	0.8482	0.9032	0.8979
ATM	0.8964	1.0000	0.9732	0.9009	0.6899	0.9311	0.9787	0.9807
CEN	0.8578	0.9732	1.0000	0.8731	0.6399	0.9426	0.9577	0.9815
LDO	0.7300	0.9009	0.8731	1.0000	0.6547	0.8421	0.9131	0.8545
MIR	0.7712	0.6899	0.6399	0.6547	1.0000	0.5590	0.7338	0.6467
OBL	0.8482	0.9311	0.9426	0.8421	0.5590	1.0000	0.9340	0.9667
TLA	0.9032	0.9787	0.9577	0.9131	0.7338	0.9340	1.0000	0.9631
VAL	0.8979	0.9807	0.9815	0.8545	0.6467	0.9667	0.9631	1.0000

Tabla 1. 3. Varianza explicada para ozono en la ZMG.

	AGU	ATM	CEN	LDO	MIR	OBL	TLA	VAL
AGU	1.00	0.78	0.71	0.51	0.58	0.69	0.80	0.79
ATM	0.78	1.00	0.95	0.81	0.45	0.86	0.96	0.96
CEN	0.71	0.95	1.00	0.76	0.37	0.88	0.91	0.96
LDO	0.51	0.81	0.76	1.00	0.42	0.70	0.84	0.72
MIR	0.58	0.45	0.37	0.42	1.00	0.27	0.52	0.39
OBL	0.69	0.86	0.88	0.70	0.27	1.00	0.86	0.93
TLA	0.80	0.96	0.91	0.84	0.52	0.86	1.00	0.92
VAL	0.79	0.96	0.96	0.72	0.39	0.93	0.92	1.00

- Realizando los cálculos correspondientes utilizando las observaciones de ozono como la serie más completa se determinó que el coeficiente de correlación crítico para obtener una distribución óptima de la red de mediciones es igual a 0.92 (la raíz cuadrada de la media aritmética de las varianzas explicadas mostradas en la tabla 1.2), que da la distancia óptima de 4940 m o 5 Km. aproximadamente, y la cual se determinó realizando recorridos de control en la unidad móvil de la RAMA.

Basándose en estos cálculos se puede considerar que la red ambiental de la zona metropolitana de Guadalajara es satisfactoria siempre y cuando todas las estaciones funcionen al 100 % de su capacidad. Esto se demostró ampliamente después de aplicar el análisis de correlación espacial sobre la matriz de datos recuperados con técnicas de interpolación lineal. Sin embargo, para obtener una red de mayor eficiencia es recomendable incrementar el número de estaciones, formando una red de 16 estaciones sobre el territorio creciente de la ZMG. Considerando la distancia óptima entre las estaciones, la red de la ZMG debe contar con 36 estaciones de monitoreo ambiental.

CAPITULO II. Microclima y algunas estadísticas de la región.

II.1 Clima de la Zona Metropolitana de Guadalajara.

La información meteorológica a analizar fue obtenida de las ocho estaciones de la Red Automática de Monitoreo Ambiental (RAMA) proporcionada por la Comisión Estatal de Ecología de Jalisco. Cada una de las estaciones realiza el monitoreo continuo de los parámetros contaminantes que fueron definidos en el capítulo anterior y además está equipada con los sensores de medición de temperatura (t , °C), humedad relativa (RH , %), velocidad (v , m/s) y dirección del viento (d , grad), lo que permite estudiar la variación del clima local no solo en el tiempo, sino también en el territorio creciente de la ZMG. Por medio de técnicas estadísticas se estimaron los parámetros climatológicos de Guadalajara: aquí la temperatura y precipitación se determinó utilizando una serie de más de 100 años de observaciones en la estación climatológica del Instituto de Astronomía y Meteorología (IAM), Universidad de Guadalajara. En cambio para los parámetros climatológicos de humedad relativa, presión atmosférica, dirección y velocidad del viento fueron calculados con la serie de los últimos 36 años de mediciones en la misma estación.

La ciudad de Guadalajara se encuentra en una zona climática templada, subhúmeda con lluvias en verano según la clasificación del clima por Köppen (García E., 1988). El período de mayo a octubre se comprende como temporada de lluvias (precipitación de 700 a 900 mm) y el resto del año forma el período seco (precipitación menor de 70 mm).

Utilizando las series largas de temperatura mínima, máxima (t_{min} y t_{max} , °C) y precipitación total anual (r , mm) para los períodos 1890 a 1999 y 1881 a 1999 respectivamente; y de humedad

relativa (RH , %), dirección (d , grad) y velocidad del viento (v , m/s) de 1960 a 1999 obtenidas de la estación climatológica del Instituto de Astronomía y Meteorología, se determinaron las principales características climatológicas de la región (Tabla 2.1) y su variación durante el período de observaciones.

Tabla 2.1. Parámetros climatológicos de la ciudad de Guadalajara, Jalisco, México.

Parámetro climatológico	Media	Desviación estándar
Temperatura max, °C	26.5	7.8
Temperatura min, °C	11.9	4.3
Temperatura med, °C	19.2	5.4
Humedad Relativa, %	62.4	14.8
Precipitación, mm	892.2	153.5
Presión atmosférica, mb	845.5	6.7
Dirección del viento, grad	225.0	---
Velocidad del viento, m/s	3.4	2.1

El análisis de la variación permite establecer una tendencia creciente en la temperatura mínima a partir de 1927 con un gradiente de $0.59\text{ }^{\circ}\text{C}/10\text{ años}$ (Fig. 2.1).

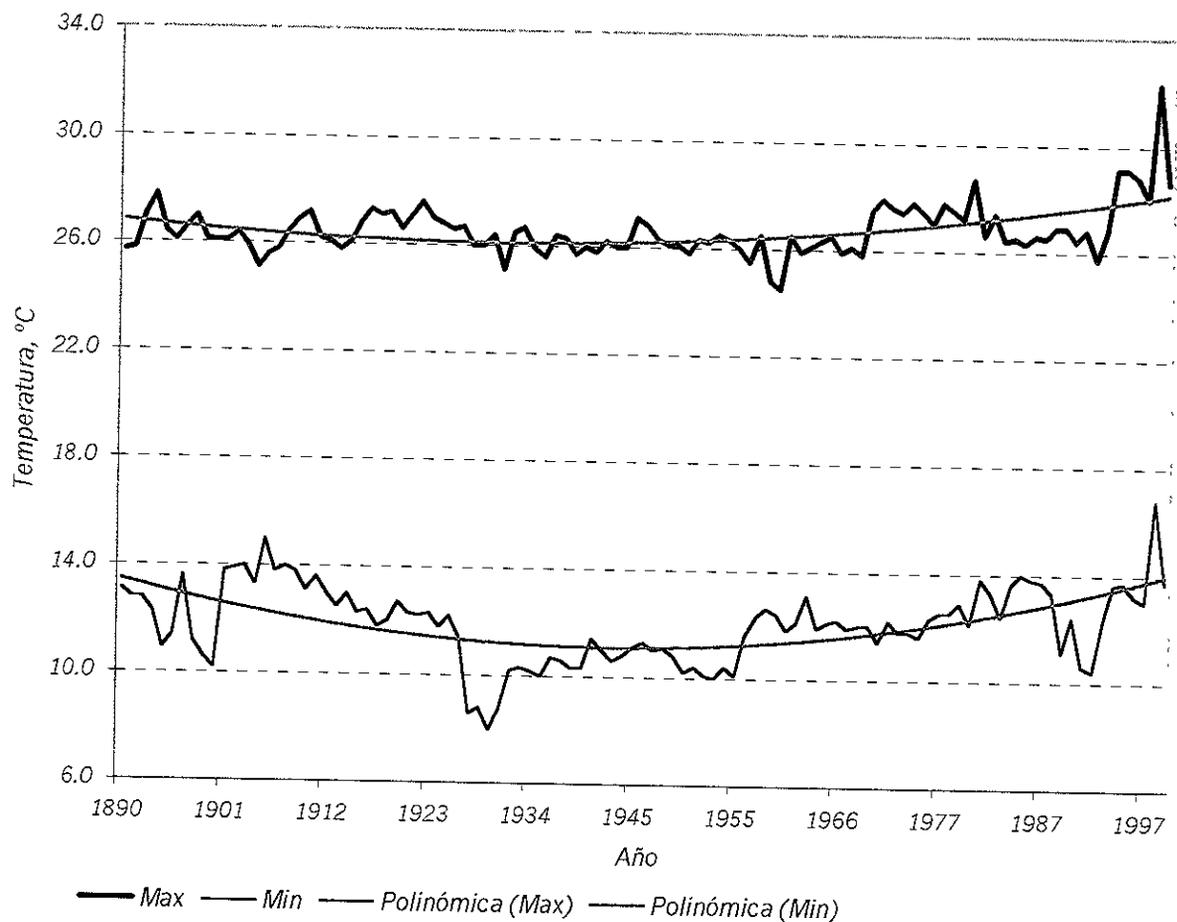


Fig. 2.1 Distribución de la temperatura máxima y mínima promedio anual, Guadalajara, Jalisco.

El período de 1890 a 1927 se caracteriza con una tendencia inversa, pero según la información histórica durante este período la estación climatológica en varias ocasiones fue reubicada sobre el territorio creciente de la ciudad de Guadalajara (Díaz, 1934), por lo tanto este período se considera poco confiable para su análisis e inferencias hasta conocer las fechas y lugares exactos de los traslados de la estación.

La tendencia lineal de la serie de precipitación total anual también es creciente con un gradiente de 1.75 mm/año (Fig. 2.2, curva -). Sin embargo, un ajuste polinomial de 2° grado al del

comportamiento histórico de la lluvia total anual establece un período de distribución uniforme (1881 - 1931), después del cual se observa un rápido incremento del total anual con un gradiente de 2.65 mm/año (Fig. 2.2, curva ---). De tal manera que el total anual de precipitación ha incrementado su valor de 866.9 mm (1881-1964), a 970.2 mm para el período de 1961 a 1999 (Davydova y Skiba, 1998). Recientes estudios muestran que este incremento se debe a los efectos de grandes ciudades tales como la existencia de la “isla de calor”, gases y aerosoles contaminantes presentes en la atmósfera urbana y modificación de las propiedades radiativas de la superficie por la urbanización de la región (Wallas and Hobbs, 1977).

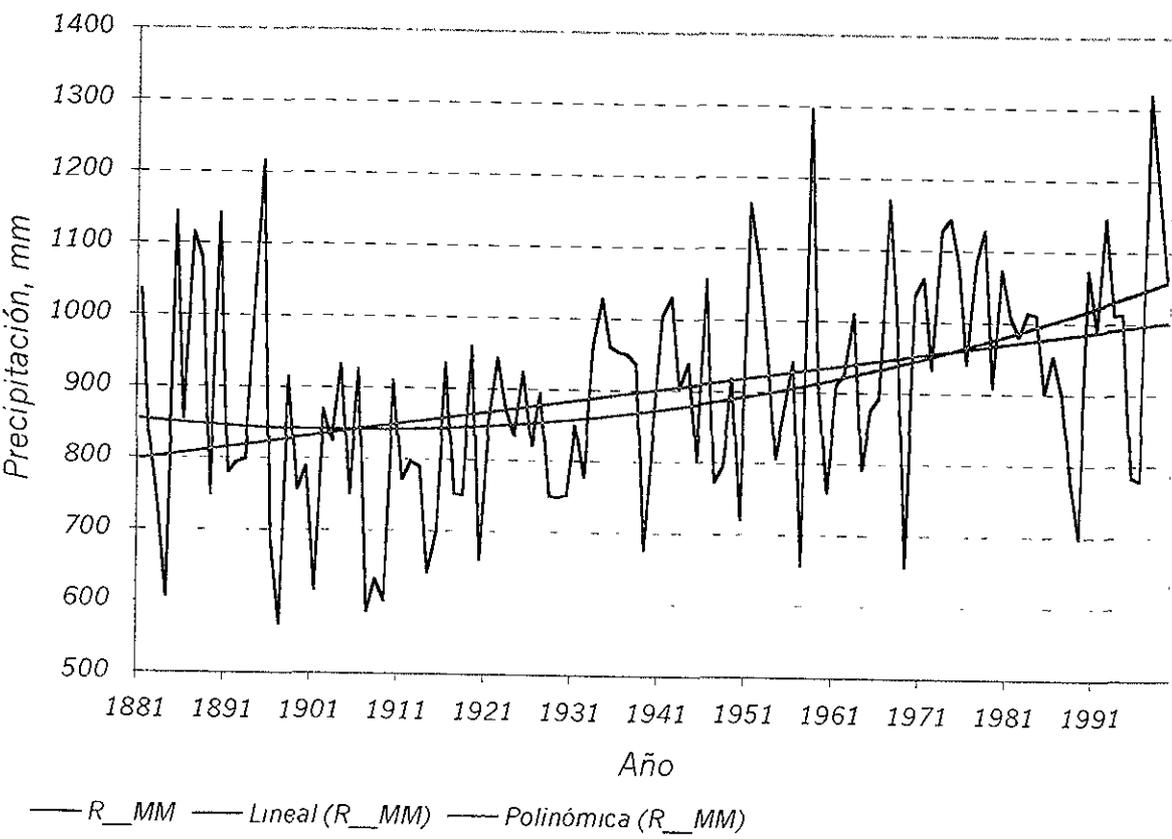


Fig. 2.2. Distribución de la precipitación total anual, mm en Guadalajara, Jalisco, México

Comparando las estadísticas del viento dominante de la Secretaría de Agricultura y Recursos Hidráulicos, SARH (Plan Lerma, 1966) con las observaciones hechas en la estación climatológica del Instituto de Astronomía y Meteorología, IAM, se aprecia una significativa degradación de la velocidad del viento dominante en la Zona Metropolitana de Guadalajara de 8.0 m/s (1881-1964) a 4.8 m/s (1960 -1996). Este decrecimiento está relacionado con el desarrollo de la ciudad: construcciones de edificios altos próximos a la estación climatológica y expansión de la zona urbana en general, originando el incremento del parámetro de rugosidad y fuerzas de fricción, característico para urbes grandes (Davenport, 1963). Sin embargo, el patrón de la distribución anual de velocidad del viento dominante sigue siendo el mismo para ambos períodos presentando vientos más intensos durante los meses marzo, abril y mayo conocidos como vientos alisios (Tabla 2.2). El análisis de la dirección del viento dominante mensual también muestra variaciones significativas. Si las estadísticas de Plan Lerma indican la dominación de flujos zonales con la dirección oeste (*W*) durante el período seco y su cambio a la dirección este (*E*) para el tiempo de lluvias; las últimas tres décadas muestran una mayor variedad en la dirección (Tabla 2.2), que tal vez, puede explicarse como resultado de fuertes turbulencias del flujo dominante producidas por altas y densas construcciones en la zona urbana e influencia de los vientos térmicos, producto de la “isla del calor” de Guadalajara.

Tabla 2.2. Comportamiento de los vientos dominantes mensuales en el Valle de Atemajac (PLAN LERMA, 1966).

Años	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII
1881-1964	E-3.0 m/s	W-6.0 m/s	W-6.0 m/s	W-6.0 m/s	W-8.0 m/s	W-3.0 m/s	E-3.0 m/s	E-3.0 m/s	E-3.0 m/s	E -3.0 m/s	NW-3.0 m/s	W-3.0 m/s
1960-1996	WSW-2.0 m/s	WNW-2.5 m/s	NNE-4.0 m/s	W-4.8 m/s	E-3.7 m/s	E-3.5 m/s	ESE-3.3 m/s	ESE-3.3 m/s	SE-3.2 m/s	SE-3.4 m/s	ESE-3.2 m/s	SW-3.0 m/s

Además del análisis climatológico estadístico fueron investigados los campos de temperatura y humedad relativa utilizando la información de las 8 estaciones de la RAMA (Davydova y Skiba, 1998). Como resultados mas importantes en el estudio del campo de temperatura fueron obtenidas la ubicación e intensidad de la “isla de calor” en la ZMG (Fig. 2.3), con una intensidad máxima observada para el mes de marzo igual a $0.65\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{km}$.

Estudiando los campos de humedad relativa se obtuvo otro resultado de importancia y fue la correspondencia entre las particularidades de la distribución espacial de temperatura y la topografía de la región, es decir, los centros de mínima humedad relativa se encuentran justo sobre las zonas de máxima temperatura y regiones de mayor altitud del valle de Atemajac en donde esta situada la gran urbe (Fig. 2.4).

Los campos de velocidad del viento dominante mensual y anual construidos sobre la información de las 8 estaciones de la RAMA para el período de 1994 a 1999 reflejan el patrón del comportamiento de flujos locales condicionado por la circulación dominante de macro o mesoescala y el diseño urbanístico de la localidad (Fig. 2.5). Aquí las zonas uniformes del viento débil corresponden a las colonias y fraccionamientos de construcciones densas y edificios altos; a su vez, los corredores del viento máximo coinciden con las particularidades topográficas de la región (regiones entre dos o más elevaciones sobre el valle Atemajac).

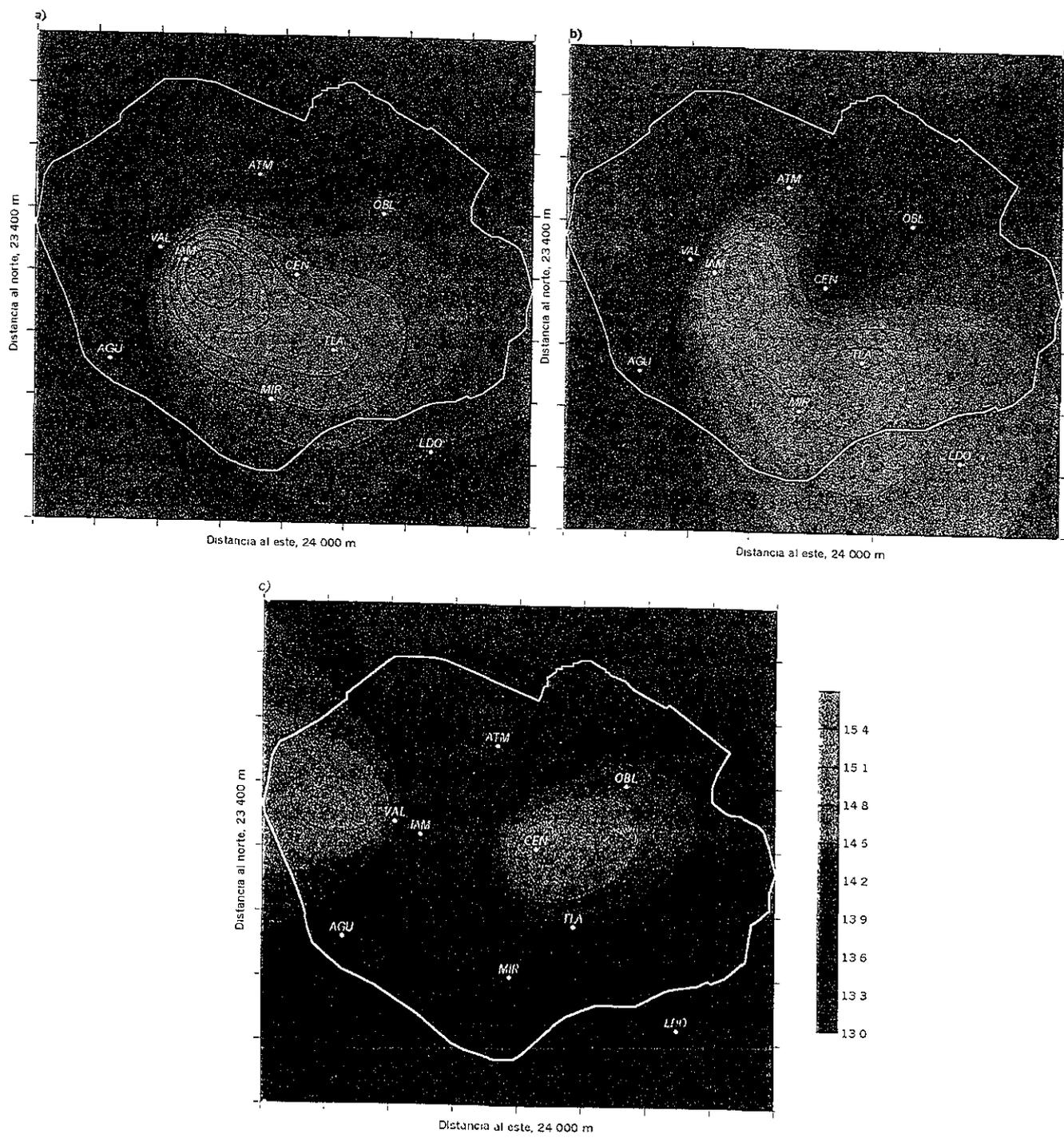


Fig. 2.3 Distribución espacial de la temperatura a) media anual, b) máxima promedio anual, y c) mínima promedio anual en la Zona metropolitana de Guadalajara, 1994 – 1999.

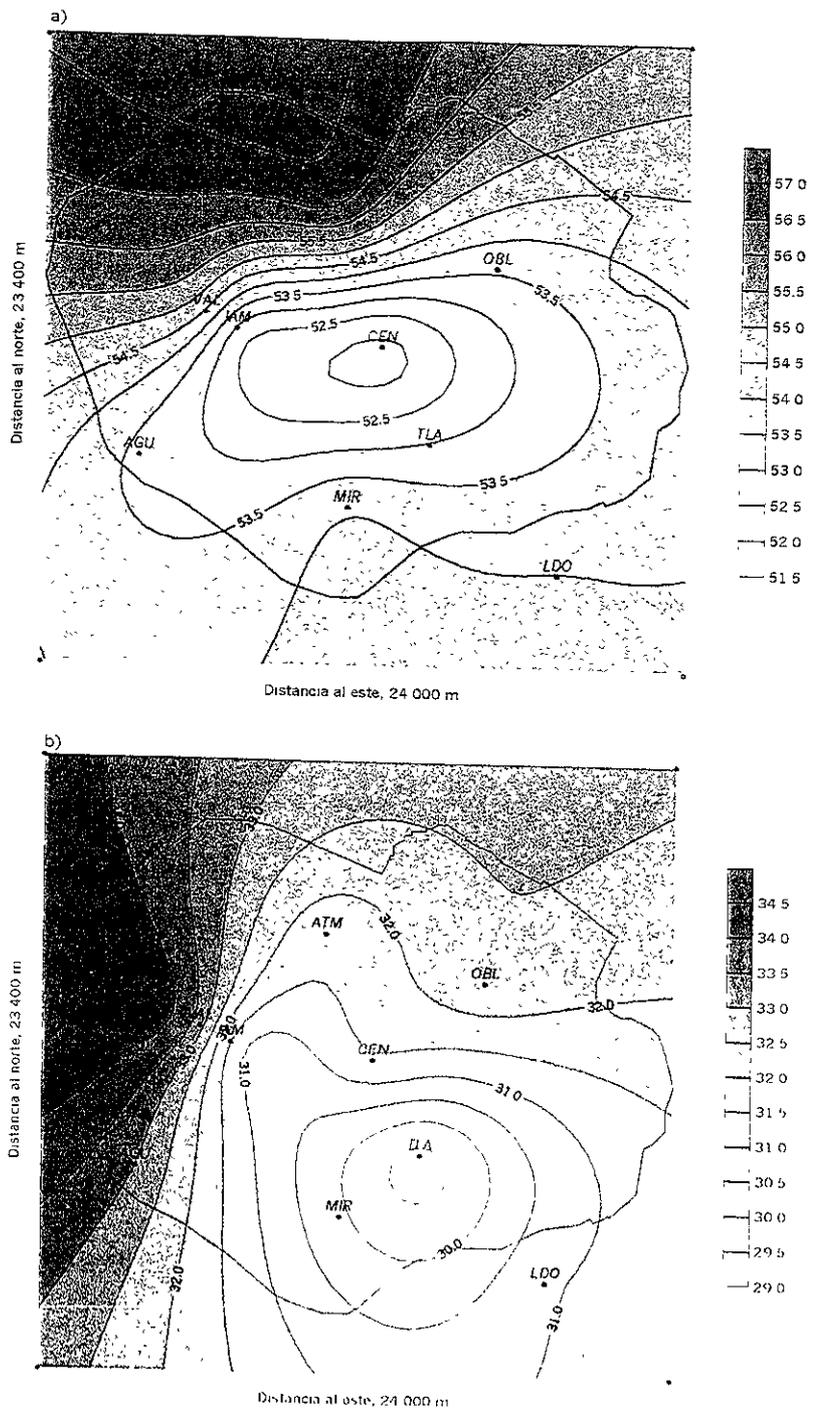


Fig. 2.4 Distribución espacial de la humedad relativa a) media anual y b) mínima promedio anual en la Zona Metropolitana de Guadalajara, 1994 – 1999.

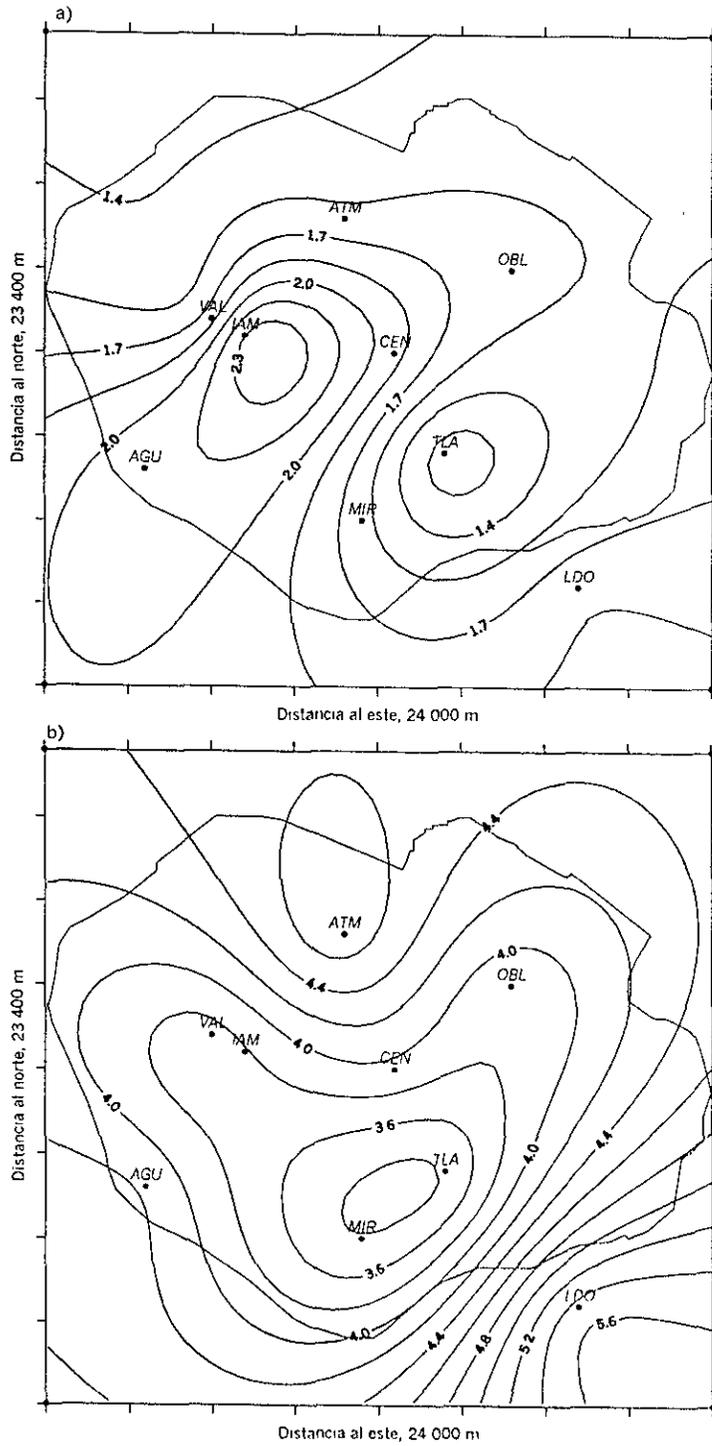


Fig. 2.5. Distribución espacial de la velocidad del viento a) media anual y b) máxima promedio anual en la ZMG, 1994 - 1999.

II.2 Desarrollo urbano

a) Población

La ciudad de Guadalajara fue fundada en 1542 con 563 familias indígenas y españolas. En 1850, inicia la industrialización de la región, con una población de 25 000 habitantes aproximadamente. En 1890 la población llegó a 90 mil habitantes y en 1900 ya sumaba más de 120 mil habitantes. Para el año de 1940 la ciudad llegó a conformarse de un total de 229 000 habitantes. Veinte años después los habitantes sumaban alrededor de 736 800, un 30 % de la población de Jalisco. En 1970 el total de la población rebasó un millón doscientos mil habitantes, aproximadamente un 36 % de toda la población del estado. En el año 1975 se denomina Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG) a la zona urbana de la capital, que había alcanzado e incorporado a las poblaciones de Tlaquepaque, Zapopan y unos años más tarde a ésta se integro el municipio de Tonalá.

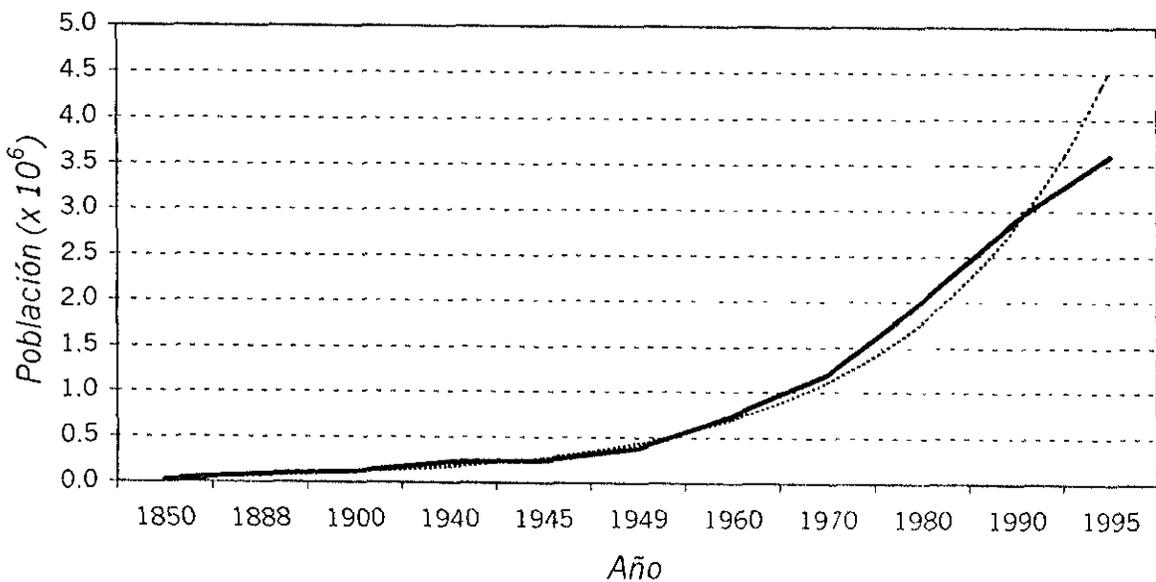


Fig. 2.6. Crecimiento de la población (—) en Guadalajara, Jalisco y su ajuste exponencial (---).

Por lo tanto, los datos de población total en la ZMG, según los censos de 1990 y 1995, arrojaron un número de 2.9 y 3.6 millones de habitantes respectivamente, establecidos sobre un área de 320 y 340 mil km². El análisis de los datos anteriores indica, que el crecimiento de la población tiene un carácter exponencial y se pronostica que para el año 2010 el número de habitantes llegará a sumar un total de 4.6 millones aproximadamente (Fig. 2.6).

b) Transporte

En 1975 empezaron a registrarse índices crecientes de bióxido de azufre, debido a que los autobuses del transporte público comienzan a utilizar motores de diesel. El factor de emisión de SO₂ del diesel es de 6.5 gr. por cada kilómetro recorrido (Alvarado y Reyes, 1986). En 1980 el parque vehicular de Guadalajara suma más de 250 000 automóviles. El censo de 1990 indicó que el parque vehicular es de 407 354 automóviles, camiones y omnibuses. En 1995 ya existen 620 000 vehículos circulando en la zona metropolitana, contribuyendo con un 75 % de la contaminación que es emitida al aire y que equivale a una emisión total de 730 000 toneladas de contaminantes por año (González, 1995).

c) Industria

En 1850 (unos trescientos años después de su fundación) Guadalajara empezó su desarrollo industrial con la instalación de fábricas textiles e industrias tabacalera y del tequila. En 1888 la ciudad contaba con 295 establecimientos. En 1960 - 1970 se establece una amplia zona industrial en el sur de la región, la cual continua creciendo de tal manera que a principios de los años ochenta la ZMG cuenta ya con trece zonas industriales (González, 1995): Zona Industrial de Guadalajara, Corredor Industrial González Gallo - Dr. R. Michel, Parque Industrial belenes

Norte, Ciudad Granja, Álamo Industrial, Anillo Periférico Sur, Barrio El Retiro, Colonia Seattle, Corredor Nogales - Periférico, El Colli, Las Fuentes, Av. Vallarta - Av. México, Colonia del Fresno. El número de giros industriales contaminantes asentado en estas zonas y que fue estimado durante la elaboración del Plan Estatal de Ecología del Estado, fue de 6 000, de los cuales 220 fueron tipificados como de alta contaminación, siendo los principales giros: fundiciones, cementeras, químicas de productos ácidos, químicas de plaguicidas, minerales no metálicos, de fabricación de acumuladores, fabricantes de grasas, aceites y derivados. Otros 1200 son tipificados como de nivel medio de contaminación, destacando los giros de embutidos, bebidas, industria textil, huleras, curtidurías, metálica básica y alimenticia. El resto de los giros se consideran de bajo potencial de contaminación, siendo estos principalmente de la rama de la industria del calzado, impresiones, plástica, química general y de limpieza (González, 1995).

La contaminación atmosférica causada por el ser humano proviene de dos fuentes principales: fuentes fijas y móviles. Las fijas están compuestas principalmente por industrias y edificaciones domesticas, que producen emisiones en calentadores, estufas, chimeneas etc. Las fuentes fijas son los principales contaminantes en zonas y corredores industriales del país, sin embargo, en las áreas metropolitanas las fuentes móviles son las que llegan producir hasta el 75 % en volumen de la contaminación del aire. Ecología Estatal de Jalisco realizó una investigación para determinar la situación ecológica de la capital del estado. Los resultados de ésta investigación mostraron que en la Zona Metropolitana de Guadalajara, aproximadamente el 20 % de la contaminación del aire es debida a procesos industriales, lo que representa alrededor de 533 toneladas por día ó 125 544 toneladas por año (González, 1995).

CAPITULO III. Principios físicos del problema de propagación y difusión de contaminantes.

III. 1 Introducción

El desarrollo del método de predicción de contaminación en la atmósfera se ha basado sobre los conocimientos obtenidos de estudios teóricos y experimentales del transporte y difusión de contaminantes provenientes de varias fuentes. Tales estudios generalmente han seguido una de las dos principales líneas de investigación al respecto. La primera es la elaboración de la teoría de difusión atmosférica basado en la descripción matemática de propagación de polución aérea mediante la solución de la ecuación de difusión turbulenta (Berlyand, 1975; Marchuk *et al*, 1979; Stern, 1985; Marchuk, 1986; Nieuwstadt y Van Dop, 1982). Ésta línea es más universal, ya que permite la estimación de difusión de contaminación atmosférica para diferentes tipos de fuentes de emisión y para diferentes parámetros del medio ambiente incluyendo parámetros de difusión turbulenta, un factor esencial en la predicción de los niveles de contaminación (Berlyand, 1991).

La segunda línea está principalmente relacionada con el análisis empírico – estadístico de transporte de contaminantes atmosféricos y aplicación de modelos de interpolación, predominantemente del tipo Gaussiano. Los modelos tipo Gaussiano son comparativamente fáciles de emplear para la descripción de la difusión de contaminantes del aire. Tales modelos fueron desarrollados y descritos detalladamente en varias investigaciones (Pasquill, 1974; Turner, 1979; Turner, 1994; Wark y Warner, 1996). Para comprender la física del problema de transporte y difusión de contaminación atmosférica analizaremos los principales objetivos y elementos de investigación.

III. 2 Ecuaciones de predicción

El problema de predicción de la concentración de un contaminante del aire matemáticamente puede ser representado en una forma general como la solución de una ecuación diferencial, sujeta a ciertas condiciones iniciales y de frontera (Skiba, 1993).

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi + U \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi - \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial \phi}{\partial z} = \sum_{i=1}^I Q_i(t) \delta(r - r_i) \quad (3.1)$$

para el contaminante con una concentración $\phi(r, t)$ en un intervalo de tiempo $(0, T)$. Aquí $r = (x, y, z)$, k_z y μ son coeficientes de difusión vertical y horizontal respectivamente (ver pag. 103). ∇ es el gradiente bidimensional en la (x, y) - dirección, σ es el coeficiente de decrecimiento de la contaminación por los procesos de deposición seca, por precipitación y procesos químicos. $Q_i(t)$ es la tasa de emisión de i -ésima fuente de contaminación en la zona de estudio, y $U(r, t) = \{u, v, w\}$ es el vector de la velocidad del viento que satisface a la ecuación de continuidad

$$\text{div} U \equiv \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3.2)$$

Dado los componentes horizontales del viento $u(x, y, t)$ y $v(x, y, t)$ la componente vertical $w(x, y, t)$ se calcula como

$$w(x, y, z, t) = - \int_0^z \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) dz \quad (3.3)$$

que significa que la componente vertical de la velocidad del viento en una superficie plana es diferente a cero, excepto en $z = 0$ cuando $w(x, y, 0, t) = 0$.

III. 3 Difusión turbulenta en la Capa Límite Planetaria (CLP)

El objetivo principal del pronóstico de contaminantes atmosféricos es determinar la concentración de contaminantes próxima a la superficie terrestre, en donde estos tienen un mayor efecto sobre receptores biológicos, por lo que, el estudio de la capa de la atmósfera de 50 a 100 metros sobre la superficie adquiere una importancia especial. Pero, como fue mostrado en múltiples trabajos, los procesos de transporte y difusión en esta capa dependen del efecto de estabilidad atmosférica, cambios de la velocidad del viento, temperatura y turbulencia con la altura (Lumley y Panofsky, 1964; Matveev, 1984; Mestayer y Anquetin, 1995; Wark y Warner, 1996). Para tomar en consideración movimientos verticales en el problema de predicción de calidad del aire se utilizan conceptos y propiedades de la capa límite planetaria de la atmósfera (CLP) con un espesor hasta de 1000 metros en promedio aproximadamente, el cual está definido como espesor en el cual se observa la influencia significativa de la superficie terrestre.

Un estudio detallado de la capa límite fue realizado por McBeam (1979) y con base en el cual se realizaron múltiples modelos de predicción. La mayor parte de estos modelos se basa en resultados obtenidos de la teoría de similitud de Monin y Obukhov (1954). Ellos introducen características parametrizadas de velocidad del viento U_* (fricción o velocidad dinámica), de temperatura, T_* y la escala L_* , que recibió el nombre de escala de Monin – Obukhov.

$$U_* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}}, \quad T_* = \frac{P_0}{\chi C_p \rho U_*}, \quad L_* = \frac{u_*^2 T_a}{\chi^2 g T_*} \quad (3.4)$$

Aquí L_* es la escala de Monin – Obukhov, $\tau_0 = \rho k_z \frac{\partial u}{\partial z}$, $P_0 = -\rho C_p k_z \frac{\partial T}{\partial z}$. Aquí T_a es la temperatura del aire (en K), ρ es la densidad y C_p es capacidad calorífica del aire, $\chi = 0.4$ es la constante de von Karmán. Ahora, describimos la dependencia de velocidad del viento y coeficiente de turbulencia con altura

$$u = \frac{u_*}{\chi} \left(\ln \frac{z}{z_0} + \beta_* \zeta \right), \quad (3.5)$$

en donde $\zeta = z/L_*$, y β_* es una constante.

Las ecuaciones que describen la dependencia de velocidad del viento y coeficiente de turbulencia con la altura, ambas dependen del coeficiente empírico β_* que clasifica la estabilidad atmosférica (Byzova y Veltishcheva, 1987; Panofsky y Dutton, 1984). Sin embargo, es muy frecuente que no necesitemos tomar en cuenta una descripción tan detallada de la distribución del coeficiente de turbulencia con la altura (Yudin y Shvetz, 1940). Según la teoría propuesta por Yudin y Shvetz (1940) se puede describir la distribución de la velocidad del viento y del coeficiente de turbulencia con una precisión suficiente considerando que el coeficiente de movimiento vertical depende linealmente de la altura z , además que en z_0 este coeficiente es próximo a 0. La altura z_0 se conoce aquí como rugosidad de la superficie terrestre.

$$\begin{cases} u = u_1 \frac{\ln z/z_0}{\ln z_1/z_0}, & k_z = v + k_1 z/z_1 & z \leq h \\ k = v + k_1 h/z_1 & & z > h \end{cases} \quad (3.6)$$

Aquí las distribuciones de u y k son características de las condiciones meteorológicas frecuentemente observadas u ocurridas y h es la altura de CLP.

Sin embargo, la postulación del problema de transporte como lo muestra (3.1) – (3.6) requiere observaciones de la temperatura del aire y velocidad del viento como mínimo en dos niveles sobre la superficie. Estas observaciones se realizan solamente en unas estaciones meteorológicas especializadas, que consideran mediciones de gradiente de temperatura, velocidad del viento, humedad, balance de calor, etc. No siempre esta información está disponible para realizar este tipo de modelos. Por lo tanto, para construir un modelo utilizando observaciones meteorológicas de rutina en redes existentes, se han desarrollado modelos matemáticos estadísticos tipo Gaussiano que podrían aportar consideraciones sobre la estabilidad de la capa superficial (Pasquill, 1974; Turner, 1979; Turner, 1994).

De acuerdo a Pasquill (1974) existen 6 clases de estabilidad atmosférica para la capa superficial. Él considera que las primeras tres clases comprenden inestabilidad alta, moderada y débil, la 4ª es estabilidad neutral y quinta y sexta clases son de estabilidad moderada y alta. Además para cada clase Pasquill establece intervalos de valores de velocidad del viento, insolación y horas del día. Posteriormente la clasificación de Pasquill fue modificada por Turner (1979, 1994), Byzova (1974) y otros, tomando en cuenta algunos otros parámetros característicos del área de estudio: elevación del Sol, la nubosidad, cubierta de nieve, etc. En 1968, Hino presento la relación entre la clasificación de Pasquill y parametrización de Monin – Obukhov. Esta dirección de investigación fue continuada por Godev y Kandchov (1972) determinando dependencias de clases de estabilidad de Pasquill sobre el valor L^* y parámetro de rugosidad, creando una presentación gráfica de fácil consulta. En otra investigación (Bowling, 1985), se dan valores característicos del gradiente vertical de la temperatura para las clases de Pasquill – Turner.

III. 4 Condiciones meteorológicas y su efecto en la dispersión de los contaminantes.

Todos los contaminantes del aire emitidos por fuentes estacionarias o móviles son transportados, dispersados, o concentrados por condiciones meteorológicas y topográficas. El ciclo de estancia de un contaminante en el aire se inicia con la emisión, seguido por su transporte y difusión en la atmósfera, depositación sobre las superficies del suelo y del agua por la fuerza de gravedad y lluvias (depositación seca y por la precipitación) o cuando se escapan al espacio. Existen regiones geográficas en donde las condiciones meteorológicas son favorables a la dispersión de los contaminantes, producidos en áreas urbanas. Mientras que se conocen otras regiones geográficas donde las condiciones meteorológicas y topográficas conducen a la acumulación y concentración de los contaminantes, por ejemplo, Los Ángeles, USA; Londres, UK; México, DF. etc.

a) Circulación del viento

La dispersión de un contaminante en la atmósfera es el resultado de tres mecanismos (Wark y Warner, 1996):

1. el movimiento medio general del aire que transporta el contaminante en la dirección del viento
2. las fluctuaciones turbulentas de la velocidad del viento que dispersan el contaminante
3. la difusión de masa debido a los grandes gradientes de concentración

El movimiento medio general del aire es el resultado de un sistema dinámico de escala planetaria. La rotación de la Tierra, la diferencia de las temperaturas de la atmósfera entre el ecuador y los polos, en contraste de temperatura entre los continentes y sobre los océanos, son causa de los movimientos de macro y mesoescalas. En meteorología se conocen dos tipos de viento de macro y mesoescala: *viento geostrófico* y *viento gradiente*. El viento geostrófico es un viento ideal que se aproxima a las condiciones existentes en la atmósfera a unos mil o más metros por encima de la superficie terrestre. En el caso del viento geostrófico las isobaras coinciden con las líneas de corriente del flujo.

El viento gradiente está asociado con las isobaras curvas. Dichos recorridos curvos son evidentes alrededor de regiones de alta (anticiclón) y baja (ciclón) presión. Los vientos geostróficos y de gradiente son de interés práctico en ausencia de una fuerza significativa de fricción. La región vertical entre la superficie de la Tierra y los niveles superiores de la atmósfera en donde es válido el concepto del viento gradiente se llama Capa Límite Planetaria (CLP). El espesor de la capa límite planetaria y la magnitud del retraso de la velocidad del viento con la altura son funciones de la rugosidad superficial del terreno, así como del gradiente de temperatura en la atmósfera inferior. El efecto de esta fuerza de fricción más las fuerzas de presión y de Coriolis, es hacer girar el aire hacia la derecha del viento gradiente en la región de baja presión y hacia izquierda en la región de alta presión. De tal manera, que en la región de baja presión se producirá un movimiento contra las manecillas del reloj y se observará la convergencia del flujo que se dirigirá hacia arriba, mientras en la región de alta presión se observará el flujo dirigido hacia abajo y hacia fuera (divergencia del flujo). Por lo tanto, los contaminantes acumulados en la parte inferior de la atmósfera serán arrastrados hacia arriba y se dispersarán en la presencia de un ciclón, pero

en las condiciones de alta presión o anticiclón cuando se da flujo descendente se observará el fenómeno denominado *asentamiento* o *subsistencia* que constituye un posible inhibidor de la dispersión de los contaminantes en la atmósfera (Matveev, 1984; Wark y Warner, 1996).

b) Estabilidad de la atmósfera

Para estimar la capacidad de la atmósfera de dispersar los contaminantes que recibe es necesario conocer el grado de estabilidad de la atmósfera. Se conocen tres tipos de estratificación atmosférica denominados como inestable, neutral, y estable en donde la clase de estratificación estable en a veces se subdivide en estable y muy estable. Aquí la atmósfera *estable* es aquella que no muestra movimientos verticales o cuando su tasa de cambio, $-\frac{dT}{dz}$ es menor que la tasa de cambio adiabática seca, $\Gamma_a = 0.98$ °C/100 m y *muy estable*: es cuando su tasa de cambio, $-\frac{dT}{dz}$ es *significativamente* menor que la tasa de cambio adiabática seca, Γ_a (Turner, 1994). La distribución inversa o incremento de temperatura con altura produce efecto de estratificación estable, y a mayor gradiente en la distribución inversa, mayor estabilidad atmosférica observada. En su presencia no se observan perturbaciones del flujo zonal y por lo tanto, la intensidad de intercambios verticales disminuye considerablemente. En los casos de estratificación inestable, cuando la tasa de cambio de la atmósfera es mayor que Γ_a , se incrementan perturbaciones en el flujo zonal del aire y como consecuencia, se incrementan intercambios turbulentos o verticales (Lumley y Panofsky, 1964). Cuando la tasa de cambio de la temperatura es aproximadamente igual a Γ_a , la atmósfera se caracteriza como *neutral*, y no se observan desplazamientos hacia

arriba o hacia abajo y la porción del aire permanecerá en su posición de desplazamiento (Turner, 1994).

Cuando la temperatura aumenta con la altura, la tasa de cambio es negativa. Este fenómeno se conoce en meteorología como inversión térmica y es una condición de gran estabilidad. El efecto de la inversión es reducir la dispersión vertical de los contaminantes y así aumentar la concentración de contaminación localmente. Se conocen varios tipos de inversiones térmicas, pero los más usuales son formados por la irradiación nocturna del suelo y por el descenso de una capa del aire dentro de una masa de aire a alta presión. El primer tipo se conoce como inversión térmica tipo radiación y el segundo inversión por asentamiento o subsidencia (Wark y Warner, 1996). Otros tipos de inversiones térmicas se clasifican por procesos de advección, isotermia e inversión alta en tropopausa. La probabilidad de ocurrencia de cada tipo de inversión en la zona metropolitana de Guadalajara se da en la tabla 3.1 (Davydova, 1993).

Tabla 3.1 Probabilidad mensual de inversiones térmicas en Guadalajara (1988 – 1993).

	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII
Radiación	0.38	0.292	0.297	0.297	0.357	0.349	0.109	0.167	0.216	0.331	0.359	0.392
Advección	0.141	0.104	0.027	0.297	0	0.048	0.135	0.056	0.118	0.113	0.151	0.075
Subsidencias	0.31	0.438	0.514	0.081	0.238	0.325	0.351	0.167	0.333	0.427	0.293	0.258
Isotermia	0.127	0.167	0.162	0.135	0.167	0.121	0.135	0.25	0.137	0.105	0.179	0.242
Tropopausa	0.042	0	0	0.189	0.238	0.157	0.27	0.361	0.196	0.024	0.028	0.033

Fuente: Estación de radiosondeo GDL – 612, Servicio Meteorológico Nacional, México

La distribución anual de probabilidad de ocurrencia de inversiones térmicas (Tabla 3.2) muestra que los meses de mayor frecuencia de inversiones térmicas y por lo tanto que presentan las situaciones favorables a la acumulación de los contaminantes en la zona urbana son octubre, noviembre, diciembre y enero, es decir para el período otoño – invierno, conocido en nuestra región tropical como el período seco, cuando predomina la circulación anticiclónica.

Tabla 3.2 Distribución anual de probabilidad de ocurrencia de inversiones térmicas en Guadalajara (1988 – 1993).

	Radiación	Advección	Subsidencias	Isotermia	Tropopausa
Enero	0.095	0.116	0.061	0.059	0.028
Febrero	0.056	0.073	0.065	0.059	0
Marzo	0.047	0.014	0.083	0.051	0
Abril	0.047	0.029	0.045	0.085	0.085
Mayo	0.065	0	0.045	0.085	0.141
Junio	0.056	0.014	0.048	0.034	0.141
Julio	0.017	0.072	0.057	0.042	0.141
Agosto	0.026	0.029	0.026	0.076	0.183
Septiembre	0.047	0.087	0.074	0.059	0.141
Octubre	0.177	0.203	0.230	0.110	0.042
Noviembre	0.164	0.232	0.135	0.161	0.042
Diciembre	0.203	0.130	0.135	0.246	0.056

Fuente: Estación de radiosondeo GDL - 612, Servicio Meteorológico Nacional, México

c) Efecto de “isla de calor”

La atmósfera de una gran ciudad tiene características que la distinguen de las zonas rurales. Densas y altas construcciones hechas de aluminio, concreto, vidrio y otros materiales que tienden a absorber mayor cantidad de energía solar durante el día y la conserva por un período más largo durante la noche a diferencia de lo que ocurriría con un área rural igual, producen un fenómeno conocido como la “isla de calor”. El epicentro de la isla normalmente se encuentra en el centro de la zona urbana, quizá por la concentración y altura de los edificios, calles pavimentadas y ausencia de áreas verdes. Este aire caliente se eleva arrastrando la contaminación, se expande y fluye hacia la periferia de la zona urbana, pero al expandirse el aire se enfría en una determinada altura sobre la ciudad y de nuevo fluirá desde la periferia hacia el centro cerca del suelo. De esta manera se forma un sistema circulatorio cerrado, que conservará el contenido de la atmósfera urbana y como consecuencia favorecerá a las altas concentraciones de contaminación en la ciudad (Mestayer and Anquetin, 1995).

d) Depositación seca y por precipitación

El coeficiente σ en la ecuación de transporte y difusión de contaminación (3.1) es un coeficiente que estima cuantitativamente la degradación de la concentración de especies transportadas en el aire, o su extracción, y el cual se puede definir como tasa de decrecimiento de concentración de gases y partículas suspendidas.

Los mecanismos de extracción de partículas y gases contaminantes atmosféricos se dividen en cuatro grandes grupos (Boubel y otr., 1994):

- sedimentación por gravedad
- transformaciones químicas y fotoquímicas
- deposición seca (transferencia de gases y partículas transportados por el aire hacia la superficie terrestre en la capa superficial de la atmósfera con espesor de ~ 100 m)
- deposición por precipitación o húmeda (son los procesos por los cuales las especies transportadas por el aire se transfieren hacia la Tierra en forma acuosa, es decir, lluvia, nieve o niebla).

En las más contemporáneas consideraciones la deposición seca incluye los procesos tanto de sedimentación por gravedad como de transferencia de gases y partículas transportadas en el aire hacia la tierra en ausencia de cualquier tipo de precipitación (Hicks et al., 1998).

Antes de que las especies contaminantes se eliminen de la atmósfera por procesos naturales, estos sufren cambios en su composición química, tamaño y cantidad por varios procesos físicos y químicos. Este decrecimiento frecuentemente se describe con una ley exponencial (Boubel *et al.*, 1994)

$$\phi(t) = \phi_0 \exp(-0.693t / L) \quad (3.7)$$

en donde $\phi(t)$ y ϕ_0 son las concentraciones de contaminante en el medio ambiente al momento t y al inicio ($t = 0$) respectivamente, L es la vida media o tiempo que tarda en descomponerse o desaparecer la mitad de sustancia química ϕ_0

Cuando las especies se encuentran muy cerca de la superficie terrestre, el mecanismo principal de extracción es por depositación seca; mientras en alturas de más de 100 m, la depuración por precipitación o formación de nubes es el mecanismo de eliminación predominante.

Considerando el estado estacionario, es decir estado cuando la especie llegará a un equilibrio en un suficientemente pequeño volumen de aire de tal manera, que (Seinfeld and Pandis, 1998)

$$F_{in} - F_{out} + P - R = \frac{d\phi}{dt}, \quad \frac{d\phi}{dt} = 0 \quad (3.8)$$

en donde F_{in} es la tasa de especie entrante, F_{out} es la tasa de especie saliente, P es la tasa de emisiones de especie, R es la tasa de eliminación de especie de la atmósfera, ϕ es la tasa de concentración de especie en un volumen de aire imaginario. De aquí

$$F_{in} + P = F_{out} + R \quad (3.9)$$

En el caso de la atmósfera entera $F_{in} = 0$ y $F_{out} = 0$, entonces $P = R$. Entonces, el tiempo de residencia de especie es

$$\tau = \frac{\phi}{P} = \frac{\phi}{R} \quad (3.10)$$

Frecuentemente la tasa de eliminación de contaminante en la atmósfera es proporcional a la tasa de su concentración (Seinfeld and Pandis, 1998).

$$\tau = \frac{\phi}{\lambda\phi} = \frac{1}{\lambda} \quad (3.11)$$

Consideramos que la especie se remueve de la atmósfera vía dos procesos: el primero con una tasa $k_1\phi$ y el otro con la tasa $k_2\phi$. Aquí k_1 y k_2 son los coeficientes de extracción, entonces

$$\tau = \frac{1}{k_1 + k_2} \quad \text{o} \quad \frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} \quad (3.12)$$

es decir el tiempo de residencia de una especie depende de dos tiempos de extracción individuales,

$$\tau = \frac{\tau_1 \tau_2}{\tau_1 + \tau_2} \quad (3.13)$$

Cuando $\tau_1 \gg \tau_2$, el proceso 1 de eliminación de la especie es mucho más largo y por lo tanto el proceso 2 es el mecanismo de extracción más efectivo. Por lo tanto, en la estimación de los procesos de extracción de especies contaminantes la mayor importancia se da a los procesos más rápidos y, como resultado, más efectivo (Manahan, 1991; Seinfeld and Pandis, 1998). Por lo tanto, cuando una de las velocidades es mucho más grande que la otra, se puede ignorar el proceso de deposición de velocidad poco efectiva.

Para definir cuál de los procesos es de mayor importancia: deposición seca, deposición húmeda – por precipitación o reacciones químicas, sobre todo en localidades específicas, se analizan los siguientes parámetros: actividad química o fotoquímica de la especie, si es un gas o sustancia en forma de partículas, solubilidad de la especie en agua, cantidad de precipitación en la región, tipo de terreno y parámetro de rugosidad entre otras.

Para estimar la tasa de deposición seca se utiliza su universalmente conocida formulación, la cual es directamente proporcional a la concentración local de especie, ϕ

$$F = -V_d \phi \quad (3.14)$$

en donde V_d es la velocidad de deposición seca, F es el flujo vertical de deposición seca, o la cantidad de material depositado sobre una unidad de área de la superficie por unidad de tiempo.

Ya que ϕ depende de la altura, z , entonces V_d también dependerá de la altura. La ventaja de esta definición está en que todas las complejidades de deposición seca están unidas en el único parámetro, su velocidad. La desventaja, que este parámetro depende de varios procesos físicos y químicos los cuales pueden ser difíciles de especificar propiamente.

En general, el proceso de deposición seca puede ser representado como compuesto de tres etapas: 1) transporte aerodinámico a través de la capa superficial de la atmósfera hacia una muy delgada capa de acumulación de sedimentos aéreos (capa de aire estancado) adyacente a la tierra, 2) transporte molecular para gases o transporte Browniano para partículas a través de la capa de estancamiento hacia la superficie, y finalmente, 3) la absorción irreversible o reversible por la superficie terrestre (Seinfeld and Pandis, 1998)

$$V_d = \frac{1}{r^a + r^b + r^c} \quad (3.15)$$

Aquí, r^a es la resistencia aerodinámica; r^b es la resistencia de capa quasi - laminar; y r^c es la resistencia de absorción por la superficie, sobre todo la vegetación en la superficie ("canopy resistance"). Entonces

$$F = \frac{\phi_3 - \phi_2}{r^a} = \frac{\phi_2 - \phi_1}{r^b} = \frac{\phi_1 - \phi_0}{r^c} \quad (3.16)$$

en donde ϕ_3 es la concentración de contaminante en el tope de la capa superficial, ϕ_2 es la concentración en el tope de subcapa quasi - laminar, ϕ_1 es la concentración de contaminante en el fondo de la capa quasi - laminar y $\phi_0 = 0$ en la propia superficie.

La resistencia aerodinámica de deposición seca se basa en la teoría de transporte turbulento de especies a través de la capa superficial y se expresa en términos de difusión turbulenta, la

componente vertical del viento, multiplicado por el gradiente de concentración. Como consecuencia, es una componente que depende de parámetros micro meteorológicos, teoría de similitud, velocidad de fricción sobre la superficie, rugosidad de la misma, estabilidad atmosférica y escala de Monin – Obukhov (Seinfeld, 1986; Seinfeld and Pandis, 1998)

$$F^a = K_z \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_{z=z_1} = V_d \phi(x, y, z_1, t) \quad (3.17)$$

La resistencia quasi – laminar depende de la difusión molecular (para gases) o Browniana (para partículas). A menor tamaño de partícula mayor dominación de difusión molecular, mientras para las partículas grandes predomina la difusión Browniana.

La resistencia debida a la absorción por la superficie es la componente más difícil de evaluar analíticamente, ya que depende de propiedades de la superficie y su reactividad con los gases. Por lo tanto se realiza su estimación como

$$r^c = V_d^{-1} - r^a - r^b \quad (3.18)$$

o se desarrolla un trabajo para estimar el valor de r^c como una función de especies químicas, tipo de superficie, y condiciones meteorológicas, asumiendo que una vez depositada la especie sobre la superficie está capturada irreversiblemente y no puede reingresar a la atmósfera (condiciones de inversiones térmicas, vientos muy débiles, suelos húmedos etc).

La evaluación de velocidad de depositación seca para SO_2 ha mostrado su significativa variación diurna, sin embargo se pueden establecer los valores típicos de su velocidad de depositación seca, la cual varía de 0.5 a 1.2 cm/s (Boubel *et al.*, 1994), 0.5 – 1.0 cm/s (Hidy, 1994); 1.0 cm/s (Seinfeld and Pandis, 1998).

La complejidad de la estimación de la deposición húmeda consiste de una variedad de parámetros involucrados: solubilidad del gas o de partícula en agua, condiciones meteorológicas presentes (niebla, lluvia o nieve), intensidad de precipitación observada, humedad relativa, intercepción de gases en las nubes y altura de la capa baja de nubes. De tal manera, la tasa de transformación de un gas soluble o una partícula a una gotita de lluvia debajo de nubes se puede estimar como

$$W_{gas / rain}^i = \Lambda_{ig} \phi_{i,gas} \quad \text{o} \quad W_{aeros / rain}^i = \Lambda_{ip} \phi_{i,part} \quad (3.19)$$

Aquí, Λ_{ig} y Λ_{ip} son los coeficientes de depuración húmeda para i -ésima especie (Chamberlain, 1953). Sea $\phi_g(z, t)$ la concentración de una especie en la atmósfera horizontalmente homogénea, entonces la tasa de depuración por la lluvia debajo de las nubes, F_{bc} , se puede describir como (Seinfeld and Pandis, 1998)

$$F_{bc}(t) = \int_0^h \Lambda_g(z, t) \phi_g(z, t) dz \quad (3.20)$$

Si la atmósfera es homogénea entonces se puede definir el promedio del coeficiente de depuración húmeda

$$F_{bc}(t) = \phi_g(t) \int_0^h \Lambda_g(z, t) dz = \bar{\Lambda}_g h \phi_g(t) \quad (3.21)$$

asumimos que no hay flujo advectivo y la difusión molecular es insignificativamente menor que la deposición húmeda, entonces

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\bar{\Lambda} \phi \quad (3.22)$$

Integrando la ecuación con respecto a tiempo, obtenemos (Boubel *et al.*, 1994; Seinfeld and Pandis, 1998)

$$\phi(t) = \phi_0 \exp(-\bar{\Lambda}t) \quad (3.23)$$

Utilizando las observaciones de $\phi(t)$ y ϕ_0 se puede estimar el coeficiente de depuración húmeda promedio durante el período $[0, t]$

$$\bar{\Lambda} = (-t) \ln \frac{\phi(t)}{\phi_0} \quad (3.24)$$

Según las evaluaciones de MacMahon y Denison (1979) y Chamberlain (1953) el coeficiente de “lavado” para SO_2 se estima como

$$\Lambda = 10^{-4} I^{0.53} \quad (3.25)$$

en donde I es la intensidad de lluvia en mm / h.

Desde el punto de vista termodinámico, el bióxido de azufre tiene una fuerte tendencia de ser reactivo con el oxígeno en el aire, por la reacción estequiométrica,



Pero la tasa de esta reacción es tan baja en las condiciones de catálisis libre en la fase gaseosa que esta puede ser omitida en transformaciones químicas considerables de SO_2 . Sin embargo, la reacción de bióxido de azufre en fase gaseosa en presencia del radical hidroxilo ($OH\cdot$) es la dominante en transformaciones de bióxido de azufre que tienden a disminuir su concentración formando trióxido de azufre y posteriormente ácido sulfúrico (Stockwell and Calvert, 1983). El tiempo de vida de SO_2 cuando se observan los niveles de OH -radical normales es de una semana aproximadamente. Pero en latitudes tropicales, en donde hay mayor cantidad de vapor de agua y energía solar su tiempo de vida es significativamente menor y depende de la temporada del año, según la climatología de latitudes tropicales. Además, en conjunto con la depositación seca

durante la temporada seca, en donde la velocidad estimada de depositación seca es de 10^{-2} m/s, el tiempo de vida de SO_2 en la capa límite de la atmósfera es poco más de 1 día. Durante la temporada húmeda la eliminación de SO_2 es predominantemente vía depositación por precipitación y oxidación química y fotoquímica (Seinfeld and Pandis, 1998).

Los procesos de oxidación también se pueden parametrizar conociendo niveles de hidroxilo, de tal manera que (Seinfeld and Pandis, 1998)

$$\tau = \frac{\phi}{k[OH \cdot]\phi} = \frac{1}{k[OH \cdot]} \quad (3.27)$$

en donde k es la tasa constante de reacción, y $R = k[OH \cdot]\phi$ es la tasa de eliminación de bióxido de azufre vía reacciones químicas. Como resultado la velocidad de oxidación de SO_2 se estima como

$$\tau^{-1} = k[OH \cdot] \quad (3.28)$$

Supongamos que la oxidación de una i -ésima especie en la atmósfera se puede describir como

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -R_i = -k[OH \cdot]\phi_i \quad (3.29)$$

Integrando la ecuación con respecto a tiempo obtenemos

$$\phi_i(t) = \phi_{i,0} \exp(-k[OH \cdot]t) \quad (3.30)$$

La oxidación de bióxido de azufre se incrementa en la presencia de algunos otros componentes químicos presentes en la atmósfera, de tal manera que en una atmósfera limpia el decrecimiento de SO_2 es de 1- 5 % por hora cuando la humedad relativa es menor de 90%. Si la humedad relativa es mayor de 90 % o en la presencia de una niebla la tasa de oxidación se estima hasta 8 %

por hora. En las atmósferas urbanas su valor llega hasta 10 % por hora, incrementando la depuración por los procesos de oxidación hasta 13 -15 % cuando la humedad relativa es mayor de 90 %. La oxidación de bióxido de azufre dentro de las nubes es aproximadamente 10 % por minuto (Manahan, 1991).

Basándose en lo anterior y considerando $\bar{V}_d = V_d / H$, en donde H es la altura de capa de mezcla, el coeficiente σ del modelo de transporte y difusión de contaminantes (3.1) es la suma de las tres velocidades de deposición seca, por precipitación o húmeda y de oxidación

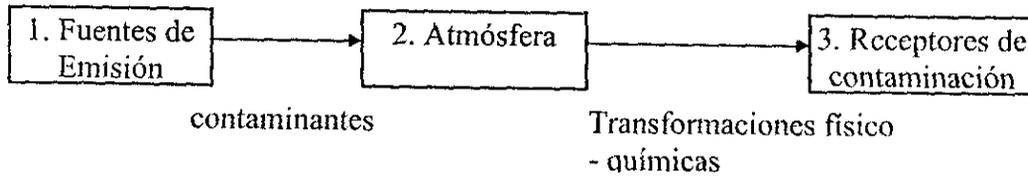
$$\sigma = \bar{V}_d + \Lambda + k[OH \cdot] \quad (3.31)$$

considerando para la temporada seca $\Lambda \ll \bar{V}_d$ y para la temporada húmeda $\bar{V}_d \ll \Lambda$ (ver pag. 103).

III. 5 Origen y clasificación de las fuentes de contaminación

La contaminación del aire puede ser definida como cualquier condición atmosférica en la cual los contaminantes del aire se presentan en concentraciones bastante altas con respecto a su nivel normal en el medio ambiente y producen un efecto dañino en hombres, animales, vegetación, y materiales (Seinfeld J., 1986). Por "sustancias" determinamos cualquier elemento químico natural o de origen antropogénico o formado por los compuestos del aire como resultado de procesos fotoquímicos. Estas sustancias pueden existir en la atmósfera como gases, gotas de líquido, o partículas sólidas.

El problema de la polución del aire se puede presentar simplemente como un sistema que consta de tres componentes básicos:



Aquí las fuentes de emisión determinan el tipo y la génesis de la contaminación del aire; la atmósfera es responsable en su transporte, difusión y transformaciones físico químicas y los receptores poseen medios de detección de la contaminación del aire (instrumental o por medio de personas, animales o plantas).

Existen diferentes tipos de clasificación de la contaminación del aire. Una de las más generales representa diferentes grupos de contaminantes según su composición química:

1. Compuestos que contienen azufre.
2. Compuestos que contienen nitrógeno.
3. Compuestos que contienen carbón.
4. Compuestos halogenados.
5. Partículas o materia particulada.
6. Compuestos radiactivos.
7. Compuestos orgánicos.

También, los contaminantes se clasifican según su estado físico: gaseosos, líquidos y sólidos. Otro tipo de clasificación de los contaminantes atmosféricos es por su origen en la atmósfera (Tabla 3.3).

Tabla 3.3. Clasificación general de los contaminantes gaseosos del aire (Wark y Warner, 1996).

Clase	Contaminantes primarios	Contaminantes secundarios
Compuestos con azufre	SO ₂ , H ₂ S	SO ₃ , H ₂ SO ₄ , MSO ₄
Compuestos orgánicos	Compuestos de C ₁ - C ₅	Cetonas, aldehídos, ácidos
Compuestos con nitrógeno	NO, NH ₃	NO ₂ , MNO ₃
Oxidos de carbono	CO, CO ₂	Ninguno
Halógeno	HCl, HF	Ninguno

1. *Primarios* son aquellos que son emitidos a la atmósfera directamente de las fuentes.
2. *Secundarios* son los que se forman en la atmósfera en el proceso de reacciones químicas y fotoquímicas.

La concentración de cualquier sustancia contaminante se mide en ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) y partes por millón por volumen, (*ppm*), en donde su relación se describe como

$$\text{concentraci3n en ppm} = \frac{C_i}{C} \times 10^6 \quad (3.32)$$

aquí C_i y C son moles por volumen del i -ésimo contaminante y aire respectivamente para una temperatura y presión atmosférica determinadas. Si se conoce la masa de la concentración del i -ésimo contaminante m_i , entonces

$$C_i = \frac{10^{-6} m_i}{M_i} \quad (3.33)$$

en donde M_i es la masa molecular del i -ésimo contaminante,

$C = p / RT$: p [mb], es la presión de la atmósfera, T (K), es la temperatura del aire y $R = 8.314 \times 10^{-2}$ [(mb*m³)/(K* mol)], es la constante de gas. Finalmente tenemos

$$\text{concentraci3n en ppm} = \frac{8.314 \times 10^{-2} T}{pM_i} \times \text{concentraci3n en } [\mu\text{g} / \text{m}^3] \quad (3.34)$$

Una vez que se hayan estudiado algunas sustancias seleccionadas, las cuales se declararon como contaminantes, es de mucho interés conocer las principales fuentes de dichas sustancias. Estas fuentes de emisiones que producen la poluci3n atmosférica se pueden clasificar en dos grandes grupos: **de origen natural** y **antropogénico** (las últimas resultado de actividades del hombre). A su vez las fuentes naturales se pueden dividir en varios grupos, tales como fuentes biológicas, biogénicas, microbiológicas, químicas, geoquímicas y físico químicas (Tabla 3.4). Las fuentes biológicas y microbiológicas son causadas por organismos vivientes (respiraci3n, fotosíntesis, degradaci3n de materia orgánica, etc.), como resultado se forman gases como bióxido de carbono, oxígeno, metano, amoníaco y otros que contienen elementos de carbono, nitrógeno y azufre. Las erupciones volcánicas, oleajes oceánicos, yacimientos de carb3n y petróleo, que se acompañan de emisiones de gas natural se conocen como fuentes geoquímicas y físico químicas. En el proceso de su actividad se forman gases como el bióxido de azufre, bióxido de carbono, metano, hidrógeno, monóxido de carbono, etc. Las descargas eléctricas durante tormentas eléctricas provocan la ionizaci3n de las moléculas de nitrógeno y oxígeno, lo que a su vez favorece a las reacciones químicas que producen óxidos de nitrógeno y ozono.

Las fuentes de emisiones de origen antropogénico también muestran una gran diversidad: emisiones de transporte vehicular, aéreo, ferrocarril; procesos industriales; quema de combustible en fuentes estacionarias; residuos sólidos y otros. Para facilitar su estimaci3n todas éstas fueron

divididas en dos grandes grupos: fuentes estacionarias y fuentes móviles. Según las estimaciones realizadas el 63.8 % del monóxido de carbono (CO) se emite por el transporte (vehicular: 59.0%, aviones: 2.4%, ferrocarriles: 0.1%, otro tipo de transporte motorizado: 2.3%), mientras que el 19.3 % de emisiones de CO se producen por las fuentes fijas tipo combustión de productos energéticos en las plantas estacionarias, y 16.9 % de CO se emiten a la atmósfera de cualquier otro tipo de origen natural o antropogénico (incendios forestales, quema agrícola, etc.). Las emisiones de óxido de azufre se deben a las fuentes fijas por los procesos de combustión de productos energéticos en 73.5 %, por los procesos industriales en 22%, por el transporte en 2.4 % y el resto, 2.1 %, es de cualquier otro tipo de origen natural o artificial. La contaminación atmosférica de óxidos de nitrógeno se debe a las emisiones de fuentes fijas en 48.5 % por la combustión de los productos energéticos, 3.9 % por procesos industriales, 39.3 % por el transporte, en donde los vehículos motorizados de gasolina y diesel producen hasta el 32 y 2.9 % respectivamente, los ferrocarriles producen 1.9 % y otros transportes motorizados hasta el 2.5 %. El resto, de 8.3 % de óxidos de nitrógeno se produce por cualquier otra fuente de contaminación (incendios forestales, quema agrícola, etc.). La emisión de partículas suspendidas totales (PST) se debe en 31.4 % del total a la combustión de productos energéticos, 26.4 % a los procesos industriales, 4.3 % por el transporte, 3.9 % por eliminación de desechos sólidos y 33.9 % de fuentes diversas (García, 1997). El ozono se forma a partir de la reacción entre el oxígeno molecular y el atómico por la reacción química catalizada por la luz solar, es decir, el ozono es un contaminante fotoquímico secundario que se forma como consecuencia de la aparición en la atmósfera de oxidantes originados al reaccionar los óxidos de nitrógeno, hidrocarburos y el oxígeno en presencia de la radiación solar (Brimblecombe, 1986).

Para poder controlar la cantidad de emisiones en una región determinada es importante conocer el tipo y fuentes de emisiones, pero para poder simular su comportamiento en la atmósfera (transporte según los vientos dominantes, disipación o transformaciones físico químicas) es muy importante saber el tiempo de vida de las moléculas de cada una de las sustancias contaminantes en un ambiente “limpio” (Tabla 3.4) con el fin de realizar la estimación de su tiempo real de residencia en el aire urbano.

En primer lugar, es necesario estimar el problema de acumulación de los contaminantes en condiciones de alta estabilidad atmosférica. La circulación anticiclónica, la cual es dominante en el período invernal en nuestras latitudes, produce condiciones atmosféricas estables y muy estables con vientos débiles y altas temperaturas, situaciones sinópticas que pueden durar de decenas de horas hasta varios días. Si existe alguna fuente de emisiones continuas de contaminantes con tiempo de vida de más de 1 día, entonces la situación ecológica del lugar puede ser bastante crítica, ya que la concentración de la contaminación ascenderá directamente proporcional a la cantidad de contaminantes emitidos por unidad de tiempo, ya que no se observan procesos de disipación en presencia de vientos débiles, ni descomposición química de las moléculas en períodos menores que el período de acumulación del contaminante en las condiciones de atmósfera estable.

Por otro lado, para determinar el paso de tiempo en los modelos numéricos se selecciona el período que debe ser mucho menor (hasta un orden de magnitud) que el período de vida de las moléculas del gas contaminante.

Tabla 3.4. Origen y tiempo de vida de los gases atmosféricos en una atmósfera estándar, (Seinfeld J., 1986).

	Concentración media, ppm	Tiempo de vida	Ciclos de origen	Observaciones
Ar	9340	-	-	Acumulado en la formación de la Tierra
Ne	18	-	-	”
Kr	1.1	-	-	”
Xe	0.09	-	-	”
N ₂	780,840	10 ⁶ años	biológico y microbiol.	-
O ₂	209,460	10 años	biológico y microbiol.	-
CH ₄	1.65	7 años	biogénico y químico	estado equilibrado
CO ₂	332	15 años	antropogénico y biológica	”
CO	0.05-0.2	65 días	antropogénico y químico	”
H ₂	0.58	10 años	biogénico, químico	”
N ₂ O	0.33	10 años	biogénico, químico	”
SO ₂	10 ⁻⁵ -10 ⁻⁴	40 días	antropogénico y químico	”
NH ₃	10 ⁻⁴ -10 ⁻³	20 días	biogénico, químico	”
NO+NO ₂	10 ⁻⁶ -10 ⁻²	1 día	antropogénico y químico	”
O ₃	10 ⁻² -10 ⁻¹	?	químico	”
HNO ₃	10 ⁻⁵ -10 ⁻³	1 día	químico	”
H ₂ O	Variable	10 días	físico - químico	”
He	5.2	10 años	físico - químico	”

CAPITULO IV. Formulación matemática del problema

IV.1. Formulación del problema y condiciones iniciales y de frontera. Ecuaciones integrales del balance y la norma

Formularemos el problema de transporte de un contaminante atmosférico en una región bidimensional limitada D con una frontera S (Fig. 4.1).

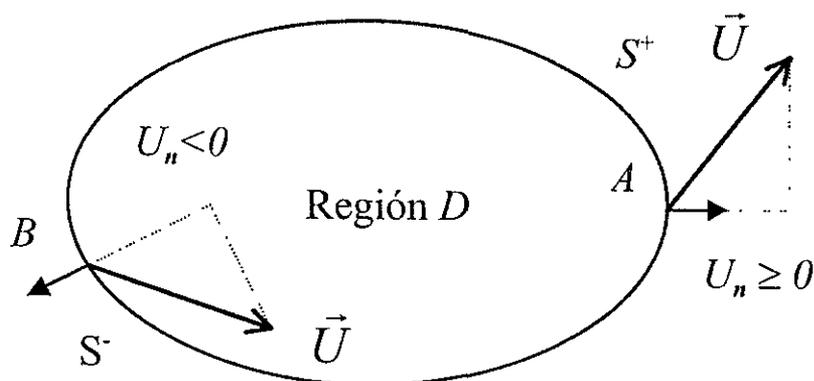


Fig. 4.1 Región de la solución del problema. Los puntos A y B pertenecen a las partes S^+ y S^- de la frontera, respectivamente.

Sea $r = (x, y)$ un punto de la región D , y sea $r_i = (x_i, y_i)$ la ubicación de la i -ésima industria que emite una sustancia contaminante con la tasa $Q_i(t)$, $i = 1, \dots, I$. Denotemos con $\phi(r, t)$ la concentración de la especie contaminante en el punto $r = (x, y)$ al tiempo t . En una primera aproximación la propagación del contaminante en la región D en un intervalo de tiempo $(0, T)$ se

puede describir mediante la ecuación del transporte y difusión la cuál es la forma integrada de la ecuación (3.1) en una capa de espesor $[0, H]$ sin considerar el efecto orográfico

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi = Q(r, t) \equiv \sum_{i=1}^I Q_i(t) \delta(r - r_i) \quad (4.1)$$

donde μ es el coeficiente de difusión y el cuál refleja las condiciones de inestabilidad atmosférica del modelo bidimensional igual que el vector de velocidad del viento, ∇ es el gradiente bidimensional, y σ es el parámetro que caracteriza el decrecimiento de la función $\phi(r, t)$ a causa de varios procesos químicos. Vamos a asumir que el vector de velocidad del viento $U(r, t) = \{u(r, t), v(r, t)\}$ es conocido y satisface a la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial x} u + \frac{\partial}{\partial y} v = 0 \quad (4.2)$$

bajo las siguientes consideraciones

$$\int_0^H \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) dz = \int_0^H \frac{\partial u}{\partial x} dz + \int_0^H \frac{\partial v}{\partial y} dz + \int_0^H \frac{\partial w}{\partial z} dz = \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + [w(H) - w(0)] = \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} = 0$$

en donde $\bar{u} = \frac{1}{H} \int_0^H u dz$, $\bar{v} = \frac{1}{H} \int_0^H v dz$, la componente vertical a nivel de la superficie, sin efecto orográfico $w(0) = 0$. Además, supongamos que la capa es suficientemente grande de tal manera que la componente vertical $w(H)$ también tiende a cero.

Los vientos climáticos (mensuales o de temporada) o vientos obtenidos de un modelo dinámico pueden ser tomados como u y v . En el momento inicial $t = 0$, el campo del contaminante es

$$\phi(r, 0) = \phi^0(r) \quad (4.3)$$

Ahora asignaremos las condiciones de frontera. Sea $U_n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}$ la proyección de la velocidad \mathbf{U} sobre el vector normal exterior \mathbf{n} a la frontera S , y dividimos S en dos partes dependiendo de si el flujo de contaminante entra a la región D o sale de D , es decir, $S = S^+ + S^-$ donde S^+ contiene todos los puntos de S en los que $U_n \geq 0$ (punto A en Fig. 4.1), mientras que $U_n < 0$ en la parte complementaria S^- (punto B en Fig. 4.1). Imponemos las siguientes condiciones de frontera para la ecuación (4.1)

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial n} - U_n \phi = 0 \quad \text{en } S^-, \quad (4.4)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad \text{en } S^+ \quad (4.5)$$

La condición (4.4) significa que en la parte de la frontera S donde el viento ingresa a D , el flujo total del contaminante (generado por la difusión y advección) es igual a cero, es decir, se supone que no existen fuentes de contaminación fuera de la región D . En la práctica, esta condición puede ser realizada extendiendo la región D a fin de incluir a esta todas las importantes fuentes de contaminación. La condición (4.5) dice que cuando el viento sale de la región D se desprecia el flujo difusivo turbulento en comparación con el flujo advectivo $U_n \phi$ del contaminante. Estas condiciones de frontera fueron definidas por Marchuk (1986) para un problema bidimensional y generalizadas al caso de tres dimensiones en Skiba (1993). Cuando no hay difusión ($\mu = 0$), la condición (4.4) se reduce a $\phi = 0$ (ausencia del contaminante sobre la frontera del flujo entrante), mientras que la condición (4.5) desaparece (Skiba and Adem 1995). Cabe mencionar que las condiciones $w(0) = 0$ y $w(H) = 0$ también se puede tomar como condiciones en la frontera S^+ para

la componente vertical, es decir $k_z \frac{\partial \phi}{\partial n} = k_z \frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$ lo que permite obtener la ecuación (4.1)

eliminando el término de la componente vertical de la ecuación (3.1)

$$-\int_0^H \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial \phi}{\partial z} dz = -k_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_{z=H} + k_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_{z=0}$$

Integrando la ecuación (4.1) en D y tomando en cuenta las condiciones (4.4)-(4.5) obtenemos la ecuación de balance

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi dr = \sum_{i=1}^I Q_i(t) - \int_D \sigma \phi dr - \int_{S^+} U_n \phi dS \quad (4.6)$$

Así pues, la concentración media del contaminante en el dominio D se incrementa debido a la presencia de las fuentes con tasas respectivas $Q_i(t)$, y decrece a causa de algunos procesos químicos ($\sigma > 0$) y flujo advectivo saliente a través de la parte S^+ de la frontera.

Sea

$$\|\phi\| = \left(\int_D |\phi(r)|^2 dr \right)^{1/2} \quad (4.7)$$

la norma de la función $\phi(r)$ y H el espacio de Hilbert que contiene todas las funciones cuya norma (4.7) es acotada. Vamos a definir un producto escalar

$$\langle \phi, g \rangle = \int_D \phi(r) g(r) dr \quad (4.8)$$

para funciones $\phi(r)$ y $g(r)$ de H . Consideraremos el producto escalar (4.8) para describir la ecuación (4.1) como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + A\phi = \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(r - r_i) \quad (4.9)$$

con la solución $\phi(r)$ en donde

$$A\phi = \text{div}(U\phi) + \sigma\phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi \quad (4.10)$$

$$\langle A\phi, \phi \rangle \geq 0 \quad (4.11)$$

es decir, A es un operador positivo semidefinido: $A \geq 0$ (Skiba, 1993). Ahora utilizando (4.11) obtenemos

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \|\phi(r, t)\|^2 = \sum_{i=1}^l Q_i(t) \phi(r_i, t) - \int_D [\sigma \phi^2 + \mu |\nabla \phi|^2] dr - \frac{1}{2} \int_{S^1} |U_n| \phi^2 dS \quad (4.12)$$

entonces

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \|\phi(r, t)\|^2 \leq \sum_{i=1}^N Q_i(t) \phi(r_i, t)$$

Es decir, la norma $\|\phi(r, t)\|$ de la solución no crecerá con el tiempo si todas las fuentes $Q_i(t)$ son igual a 0 ($i = 1, 2, \dots, N$), por lo tanto la solución es estable respecto a perturbaciones iniciales, o el problema esta bien formulado según Hadamard (1923) (véase Skiba, 1997; Skiba and Parra-Guevara, 1999; 2000).

IV.2 Espacio de Hilbert y operador adjunto

La norma (4.7) y el producto interno (4.8) en el espacio de Hilbert, H se relacionan como

$$\|\phi\| = \langle \phi, \phi \rangle^{1/2}$$

Sea A un operador lineal con un dominio de definición $D(A)$, es decir el resultado $A\phi(r)$ esta definido en H para cualquier función de $D(A)$. Entonces, el operador adjunto A^* puede ser definido por la identidad de Lagrange (Lyusternik y Sobolev, 1964, Marchuk y Skiba, 1976; Marchuk et al. 1985a,b; Marchuk, 1986)

$$\langle A\phi, g \rangle = \langle \phi, A^*g \rangle \quad (4.13)$$

el cual se cumple para cualquier $\phi(r)$ de $D(A)$ y cualquier función $g(r)$ del dominio $D(A^*)$ del operador adjunto A^* . Mostremos como se obtiene el operador adjunto en varios espacios de Hilbert (Skiba et. al. 1996).

Ejemplo 1. Aquí se define el operador adjunto para el operador $A\phi(r) = \gamma \phi(r)$, en donde $\gamma = \text{Const} > 0$. El espacio de Hilbert es un espacio de todas las funciones $\phi(r)$ definidas en el dominio D con el producto interno (4.8). Entonces, el dominio $D(A)$ coincide con H , y $\|A\| = \gamma$ es la norma del operador A . Ahora, utilizando (4.13) obtenemos

$$\langle A\phi, g \rangle = \int_D [\gamma\phi(r)]g(r)dr = \int_D \phi(r)[\gamma g(r)]dr = \langle \phi, A^*g \rangle \quad (4.14)$$

y, por lo tanto, el operador adjunto se define como

$$A^*g(r) = \gamma g(r), \quad D(A^*) = D(A)$$

Así pues, $A^* = A$, es decir, operador A es simétrico.

Ejemplo 2. Ahora obtenemos el operador adjunto para una matriz cuadrada A de dimensión n . El espacio H es un espacio vectorial Euclidiano donde el producto interno de vectores se define por

$$\langle \vec{\phi}, \vec{g} \rangle = \vec{g}^T \vec{\phi}$$

Aquí \vec{g}^T es el vector transpuesto. Entonces,

$$\langle A\vec{\phi}, \vec{g} \rangle = \vec{g}^T A\vec{\phi} = (\vec{g}^T A)\vec{\phi} = (A^T \vec{g})^T \vec{\phi} = \langle \vec{\phi}, A^T \vec{g} \rangle \quad (4.15)$$

y, utilizando la identidad de Lagrange (4.13) obtenemos $A^* = A^T$, es decir, el operador adjunto de la matriz A es su matriz transpuesta. En particular, $A^* = A$ si A es una matriz simétrica, y $A^* = -A$ si A es una matriz antisimétrica. Mencionamos que este ejemplo explica el método de construcción del operador adjunto discreto y del modelo adjunto discreto (numérico).

Ejemplo 3. Consideremos como H un espacio de funciones reales periódicas definidas en un intervalo $[a, b]$ con producto interno

$$\langle \phi, g \rangle = \int_a^b \phi(x)g(x)dx \quad (4.16)$$

y la norma

$$\|\phi\| = \langle \phi, \phi \rangle^{1/2} \quad (4.17)$$

Sea

$$A\phi(x) = \frac{\partial}{\partial x} \phi(x) \quad (4.18)$$

un operador unidimensional de advección definido en el dominio $D(A)$ de todas las funciones diferenciables y periódicas

$$\phi(b) = \phi(a)$$

Utilizando (4.16) y considerando que $D(A)$ pertenece a H tenemos

$$\langle A\phi, g \rangle = \int_a^b \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} g(x) dx = \phi(b)g(b) - \phi(a)g(a) + \int_a^b \phi(x) \left[-\frac{\partial g(x)}{\partial x} \right] dx \quad (4.19)$$

De aquí, si función $g(x)$ es también periódica, entonces $D(A^*) = D(A)$ y

$$\langle A\phi, g \rangle = \int_a^b \phi(x) \left[-\frac{\partial g(x)}{\partial x} \right] dx \quad (4.20)$$

es decir, basándose en (4.13), A es un operador antisimétrico ($A^* = -A$):

$$A^*g = -\frac{\partial g(x)}{\partial x} \quad (4.21)$$

Finalmente, supongamos que $D(A)$ es un conjunto de las funciones diferenciables con las condiciones de contorno siguientes: $\phi(a) = c$, $\phi(b) = d$, donde $c \neq d$. Es fácil ver que en este

caso, $A^*g = -\frac{\partial g(x)}{\partial x}$ solo si $D(A^*)$ consiste de tales funciones $g(x)$ que $g(a) = d$, $g(b) = c$. Sin

embargo, el operador A con dichas condiciones no es antisimétrico, ya que ϕ y g tienen diferentes condiciones de frontera y, por lo tanto, los dominios de definición $D(A^*)$ y $D(A)$ de los dos operadores son diferentes. El ejemplo nos muestra que el operador adjunto A^* está definido no sólo por su estructura (4.21), sino también por su dominio $D(A^*)$ y las condiciones de frontera.

Esta determinación del operador adjunto se utiliza en la construcción del modelo adjunto para las áreas con fronteras abiertas.

Ejemplo 4. Mostremos ahora de que manera se construye el operador adjunto para un operador

$$A\phi(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) \quad (4.22)$$

Supongamos que $D(A)$ contiene las funciones dos veces diferenciables en $[a, b]$ que satisfacen las condiciones

$$\phi(a) = 0 \text{ y } \frac{\partial \phi(b)}{\partial x} = 0 \quad (4.23)$$

en la frontera. Entonces, para cualquier función $g(x)$ dos veces continuamente diferenciable

$$\langle A\phi, g \rangle = g(b) \frac{\partial \phi(b)}{\partial x} - g(a) \frac{\partial \phi(a)}{\partial x} - \phi(b) \frac{\partial g(b)}{\partial x} + \phi(a) \frac{\partial g(a)}{\partial x} + \int_a^b \phi \left[\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \right] dx \quad (4.24)$$

De ahí, considerando las condiciones (4.23)

$$A^* g = \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \quad (4.25)$$

si

$$g(a) = 0 \text{ y } \frac{\partial g(b)}{\partial x} = 0 \quad (4.26)$$

Entonces, $D(A^*) = D(A)$, es decir, el operador A es simétrico.

Notemos que los operadores considerados en los ejemplos 1, 3 y 4 representan varias partes principales del operador del modelo de transporte (4.10): disminución de contaminantes por varios procesos físicos y químicos, advección de contaminantes por vientos y difusión de contaminante, respectivamente. Por lo tanto, dichos ejemplos nos dan una buena experiencia para construir el operador adjunto para el operador (4.10).

IV. 3 Modelo adjunto. Formulación del problema y condiciones iniciales y de frontera

Formularemos en el dominio $D \times (0, T)$ un modelo adjunto al problema (4.1)-(4.5). Con este fin utilizamos la definición del operador adjunto en un espacio de Hilbert y la identidad de Lagrange (Lyusternik y Sobolev 1964). La ecuación básica del modelo adjunto tiene la forma

$$-\frac{\partial}{\partial t} g - U \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot \mu \nabla g = P(r, t) \quad (4.27)$$

donde $P(r, t)$ es un forzamiento el cual será determinado posteriormente (véase (5.3)), y todos los demás parámetros son iguales a los de (4.1). La construcción de la ecuación (4.27) se explica en detalle, por ejemplo, en Skiba *et al.* (1996) y párrafo anterior. Si asumimos que $P(r, t) = 0$ y $Q_i(t) \equiv 0$ para todo i , y con la sustitución $t' = T - t$ cambiamos en la ecuación (4.27) la dirección de tiempo de $t = T$ a $t = 0$ entonces obtenemos que las ecuaciones homogéneas (4.1) y (4.27) difieren solamente en el signo de la velocidad U . Así la parte del flujo saliente S^+ (o la parte del flujo entrante S^-) de la frontera S para la ecuación (4.1) en el mismo tiempo es la parte del flujo entrante S^- (la parte del flujo saliente S^+) para la ecuación (4.27). Por lo tanto las condiciones de frontera para el modelo adjunto se obtienen fácilmente de las condiciones (4.4)-(4.5):

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} g = 0 \quad \text{en } S^- \quad (4.28)$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} g + U_n g = 0 \quad \text{en } S^+ \quad (4.29)$$

La ecuación (4.27) con las condiciones de frontera (4.28)-(4.29) se resuelve en la dirección opuesta de tiempo (de $t = T$ a $t = 0$) usando la condición "inicial" nula en el momento $t = T$:

$$g(r, T) = 0 \quad \text{en } D \quad (4.30)$$

El modelo adjunto (4.27) - (4.30) también es un problema bien formulado según Hadamard (Skiba, 1997; Skiba and Parra-Guevara, 2000). Notemos que la solución $g(r, t)$ es no negativa en el dominio $D \times (0, T)$ si el forzamiento $P(r, t)$ es no negativo. Ahora asumimos que $P(r, t) \equiv 0$.

Por la analogía con la ecuación (4.12) y tomando en cuenta que $t' = T - t$, tenemos

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t'} \|g(r, t)\|^2 = - \int_D [\sigma g^2 + \mu |\nabla g|^2] dr - \frac{1}{2} \int_S U_n |g|^2 dS \quad (4.31)$$

Es decir, en ausencia del forzamiento, la norma (4.7) de la solución adjunta decrece monótonamente con $t' = T - t$, y por lo tanto, reduce al cero,

$$\|g(r, 0)\| \rightarrow 0 \quad (4.32)$$

cuando t' aumenta. Las condiciones iniciales nulas (4.30) son esenciales en la derivación de las estimaciones adjuntas (Marchuk and Skiba, 1976). Es preciso notar que el modelo adjunto es un problema matemático auxiliar el cual nos ayuda a obtener estimaciones duales de contaminantes del aire, lo que vamos a explicar en un capítulo posterior.

CAPITULO V. Estimaciones directa y adjunta

V.1 Estimaciones directas

Ahora nosotros obtenemos estimaciones directas y adjuntas de la concentración de contaminantes del aire en una zona Ω del dominio D . El valor

$$J(\phi) = \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \omega(r,t) \phi(r,t) dr dt \quad (5.1)$$

donde $\omega(r, t)$ es una función de peso continua y no negativa en la zona Ω e intervalo temporal $(T-\tau, T)$, vamos a considerarlo como estimación directa de la concentración media del contaminante del aire en la zona Ω y en un intervalo de tiempo $(T-\tau, T)$ de longitud τ . En particular, si

$$\omega(r,t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau|\Omega|}, & \text{si } (r,t) \in \Omega \times (T-\tau, T), \\ 0, & \text{si no} \end{cases}$$

donde $|\Omega|$ es el área de Ω , entonces (5.1) se convierte en la concentración media de contaminante del

$$\bar{\phi}^{\Omega, \tau} = \frac{1}{\tau|\Omega|} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi(r,t) dr dt \quad (5.2)$$

Si el problema (4.1) – (4.5) se resuelve entonces su solución $\phi(r, t)$ es conocida en cada punto de la región $D \times (0, T)$, y por lo tanto, (5.1) puede ser calculada para cualquier zona Ω . De esta manera estimaciones directas (5.2) dan una idea sobre la contaminación del aire en toda la región D .

V.2 Estimaciones adjuntas

El estudio con estimaciones directas para cada Ω es algo costoso y no siempre es necesario. A veces es mas que suficiente monitorear los niveles de concentración de la contaminación de aire justo en varias zonas ecológicamente más significativas dentro del dominio D . En este caso, se puede obtener otras estimaciones (estimaciones adjuntas) equivalentes a la estimación directa (5.1). Vamos a considerar una zona ecológicamente significativa en D . El problema adjunto (4.27) – (4.30), (4.2) se resuelve con un forzamiento P determinado únicamente por la función de peso $\omega(r, t)$:

$$P(r, t) = \begin{cases} \omega(r, t), & \text{si } (r, t) \in \Omega \times (T - \tau, T) \\ 0, & \text{si no} \end{cases} \quad (5.3)$$

Entonces la estimación adjunta, equivalente a (5.1), se da como

$$J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T \int_D g(r_i, t) Q_i(t) dt + \int_D g(r, 0) \phi^0(r) dr \quad (5.4)$$

en donde $g(r_i, t)$ es el valor de la solución del problema adjunto en un punto r_i (posición de la i -ésima fuente de emisión). Para derivar (5.4), multiplicamos ecuaciones (4.1) y (4.27) por las soluciones g y ϕ respectivamente, luego substraemos los resultados e integraremos la ecuación obtenida sobre la región $D \times (0, T)$ utilizando integración por partes y las condiciones iniciales y de frontera de ambos problemas. Matemáticamente esto significa que para derivar de (5.4) estuvimos usando la identidad de Lagrange para operadores de ambos problemas (Lyusternik y Sobolev, 1964; Marchuk, 1995).

La solución adjunta sirve como la función de peso en (5.4) (Marchuk y Skiba, 1976) reflejando la parte que juega como tasas de emisión $Q(t)$ de fuentes de contaminación y condición inicial $\phi(r)$ en el valor de la concentración de contaminación del aire $J(\phi)$. Es preciso notar que la integral

$$\int_D g(r, T) \phi(r, T) dr \quad (5.5)$$

se elimina en (5.4) debido a nula condición inicial (4.30). Además se puede ver que si el intervalo $(0, T - \tau)$ es suficientemente largo entonces, según (4.32), la formula (5.4) se reduce a

$$J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(r_i, t) Q_i(t) dt \quad (5.6)$$

La forma (5.6) ignora el papel de la distribución inicial de contaminante en el área y toma en cuenta sólo tasas de emisión de las fábricas.

V.3 Particularidades de las estimaciones directa y adjunta

Existen diferencias fundamentales entre estimaciones directa y adjunta. En la estimación directa (5.1), la solución del problema de transporte de contaminantes depende de dos principales parámetros: localización r_i y tasa de emisión $Q_i(t)$ de cada fuente de contaminación y ésta es independiente de la zona seleccionada Ω . Por lo tanto, ésta se favorece si una amplia información pudiese ser obtenida sobre la concentración de contaminantes aéreos en todo el dominio D o en varias zonas Ω , o si el tiempo disponible para tomar precauciones contra el problema de contaminación en la zona Ω es suficiente (Skiba, 1996 a, *ejemplo 3*). Al contrario, la solución del problema adjunto utilizada en la estimación adjunta (5.4) depende de la zona Ω y es independiente de los parámetros r_i y $Q_i(t)$. Por lo tanto, la solución del problema adjunto puede

ser encontrada para cada zona Ω sin importar valores concretos de r_i y $Q_i(t)$, $i = 1, 2, \dots, N$. Esto hace a la estimación adjunta conveniente y muy efectiva en el análisis de sensibilidad de modelos, por ejemplo, en el estudio de r_i – dependencia o $Q_i(t)$ – dependencia de la concentración de contaminantes del aire $J(\phi)$ en la zona Ω . El método directo requiere resolver el problema del transporte de contaminantes repetidamente siempre que alguno de los parámetros r_i y $Q_i(t)$ variara, y por lo tanto, el tiempo computacional se consume considerablemente. El método adjunto es más económico, ya que no requiere la solución del problema de transporte (4.1) – (4.5), además, la solución del problema adjunto, una vez calculada, puede repetidamente ser usada en la evaluación de la concentración de contaminantes en Ω para diferentes valores de parámetros r_i , $Q_i(t)$ y I .

En general, los dos métodos directo y adjunto atractivamente se complementan uno al otro en el problema de monitoreo de la calidad del aire. En algunas situaciones se prefieren uno o el otro de las estimaciones (5.1) y (5.4) (Skiba, 1996 a). Ahora, vamos a analizar detalladamente como decidir entre ellos en la práctica.

El método adjunto es especialmente efectivo en el caso cuando el transporte de contaminantes aéreos se estudia con vientos climáticos (por ejemplo, para la temporada seca o la temporada húmeda). Aquí la solución de la ecuación adjunta puede ser calculada de antemano para cada zona ecológicamente significativa, y guardada en la computadora. Además, según (5.6), los valores de la solución adjunta se necesitan solamente en puntos de la localización de las fuentes de contaminación r_i , y por lo tanto, sólo los valores $g(r_i, t)$ de la solución adjunta en los puntos r_i

es necesario guardar en la memoria de la computadora. De aquí, si ambos parámetros r_i y $Q_i(t)$ se conocen, entonces es muy fácil dar una estimación preliminar de una concentración media de contaminante en cualquier zona ecológicamente significativa. Todo lo que hay que hacer es tomar el integral (5.6) con los valores de la solución del problema adjunto correspondiente a la zona considerada. Obviamente, esta estimación preliminar puede ser corregida utilizando el campo real de velocidades del viento en el dominio $D \times (0, T)$.

V.4 Aplicación de las estimaciones adjuntas

V.4.1 Localización óptima de plantas industriales

El índice de desarrollo económico de hoy en día ha demandado más y más construcción de instalaciones y complejos de plantas industriales eficientes. Tales proyectos industriales son generalmente construidos en ó próximamente a áreas densamente pobladas donde es posible de encontrar suficiente fuerza de trabajo. Esto impone limitaciones particulares sobre la localización de trabajo y plantas que descargan al aire aerosoles dañinos para la gente y alteran los sistemas ecológicos de la región. La localización óptima de plantas industriales es un aspecto múltiple y algorítmicamente un problema bastante complejo. Para resolver este problema, se desarrolló un modelo adjunto de acuerdo a Marchuk (1986).

Supongamos que una nueva planta industrial debe ser construida cerca de las áreas pobladas, zonas recreativas o cualquier otra zona ecológicamente importante, de tal manera que sus emisiones anuales totales con sustancias industriales nocivas no deban exceder los valores

estipulados por los requerimientos sanitarios y la carga ecológica total sobre la región D , como consecuencia de las emisiones, debe ser mínima o dentro del rango específico del reglamento sanitario global. La tarea es seleccionar una zona en donde la planta puede ser localizada de tal manera que estos requerimientos globales y locales sanitarios para emisiones se cumplan para toda la región D y zonas seleccionadas Ω_k .

Sea seleccionada la zona ecológicamente significativa Ω , y se conocen la velocidad del viento U , tasa de emisión $Q_i(t)$ y valores de T y τ . Asumimos, que esta nueva planta se localizará en una cercanía del punto $r_0 = (x_0, y_0)$. En particular, determinamos en el dominio D la posición óptima r_0 de una nueva fábrica con la tasa de emisión $Q_0(t)$ para que el valor de contaminación \tilde{J}_k en la Ω_k no supere una norma sanitaria J_0 (Marchuk, 1986). En este caso, el estimador directo (5.1) requiere resolver el modelo (4.1) – (4.5) repetidamente siempre y cuando la ubicación r_0 se cambie. Mientras que la solución del problema adjunto, una vez resuelto, puede ser utilizada repetidamente para varios valores de r_0 . Es decir, este problema se resuelve mucho más rápido con una aproximación adjunta.

Sean N plantas industriales con una tasa de emisión $Q_i(t)$, las cuales están situadas en puntos r_i del dominio D ($i = 1, 2, \dots, N$). Asumimos ahora que se programa la construcción de una nueva planta industrial en D con la tasa de emisión $Q_0(t)$ del contaminante $\phi(r, t)$ la cual no excederá una máxima tasa Q_0 :

$$Q_0 = \max_i Q_0(t) \quad (5.7)$$

Vamos a aplicar las funciones de influencia de la solución del problema adjunto para obtener una optima posición r_0 de la nueva planta industrial con el fin de no violar la norma sanitaria establecida J_0 en K zonas ecológicas Ω_k localizadas adentro del dominio D :

$$J_k \leq J_0, \quad (k=1, \dots, K) \quad (5.8)$$

Aquí

$$J_k = \sum_{i=0}^N \int_0^T g_k(r_i, t) Q_i(t) dt \quad (5.9)$$

es el estimador de la calidad del aire para la zona Ω_k en donde $N+1$ plantas están en operación.

Denotamos por

$$\tilde{J}_k = \sum_{i=1}^N \int_0^T g_k(r_i, t) Q_i(t) dt \quad (5.10)$$

el mismo estimador, pero para el caso de N plantas, nosotros obtenemos

$$\int_0^T g_k(r_0, t) Q_0(t) dt \leq J_0 - \tilde{J}_k = \hat{J}_k \quad (5.11)$$

Tomando en cuenta (5.9) nosotros obtenemos que (5.10) se cumple si

$$\int_0^T g_k(r_0, t) dt \leq \hat{J}_k / Q_0 \quad (k=1, \dots, K) \quad (5.12)$$

Para cada zona k , se puede dibujar las isolíneas de la función

$$F_k(x, y) \equiv F_k(r) = \int_0^T g_k(r, t) dt \quad (5.13)$$

$(k=1, \dots, K)$. Luego la isolínea $F_k(x, y) \equiv \hat{J}_k / Q_0$ separará el subdominio D_k en donde (5.12) se cumple de la otra parte del D en donde $F_k(x, y) > \hat{J}_k / Q_0$. De tal manera cada punto de la

intersección $\tilde{D} = \bigcap_{k=1}^K D_k$ de todos los subdominios D_k son adecuados para la ubicación de una nueva planta industrial.

V.4.2 Varios ejemplos de estimaciones de emisiones de plantas industriales operativas

La protección del medio ambiente contra la contaminación industrial está llegando como un problema principal de ciencia y tecnología. En el párrafo previo nosotros tuvimos que considerar un aspecto de este problema, el cual está relacionado con la localización de nuevas plantas industriales (que emiten aerosoles nocivos a la atmósfera) considerando sea mínima la contaminación para establecimientos cercanos, zonas recreativas, campos agrícolas y otras zonas ecológicamente importantes. En este capítulo vamos a considerar otro aspecto de este problema. Nosotros vamos a asumir todas las unidades industriales en esta región que están operando y descargando contaminantes nocivos al aire. La tarea reside en determinar para cada unidad industrial una cantidad permisible de contaminantes para ser descargados al aire de tal manera, que su suma no excederá los valores permitidos estipulados por los reglamentos sanitarios. Al mismo tiempo, emisiones totales no pueden ser reducidas significativamente, ya que esto resultará en la amenaza de índices económicos de unidades industriales. De tal manera, nosotros vamos a hablar sobre tales limitaciones en emisiones, las cuales, sin embargo, aseguran efecto económico máximo sobre limitaciones dadas (Marchuk, 1986).

a) Caso con la estimación del efecto económico

Supongamos N es el número de unidades industriales en una región dada D , con frontera S , las cuales están descargando un contaminante con la tasa de emisión Q , cada período τ . Para

simplificar el problema nosotros debemos asumir la composición de estos aerosoles como uniforme. En la región D vamos a aislar K zonas ecológicas Ω_k ($k = 1, 2, \dots, K$) la concentración máxima permisible de aerosoles emitidos en un intervalo de $[0; T]$ esta dada para cada tal zona. Como resultado, nosotros llegaremos a la siguiente formulación matemática del problema.

Sea una ecuación para difusión de sustancias de N unidades industriales como la siguiente:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi = \sum_{i=1}^I Q_i(t) \delta(r - r_i) \quad (5.14)$$

Asumiendo que el problema (5.14) sea periódico climáticamente (con un periodo igual a 1 año, caso de exposición crónica), nosotros obtenemos el dato inicial (Marchuk, 1986)

$$\phi(\vec{r}, T) = \phi(\vec{r}, 0) \quad (5.15)$$

Vamos a considerar el funcional (5.6) como

$$J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(r_i, t) Q_i(t) dt \leq C_{max} \quad (5.16)$$

El problema reside en la determinación de emisiones totales planeadas de aerosoles Q_i las cuales aseguran máximo permisible de la media anual de la cantidad de contaminante, C_{max} , con un mínimo gasto para la reconstrucción de plantas industriales; el cual garantizará un volumen específico de producción o rendimiento a causa de minimización del nivel de emisiones. En este problema es necesario considerar un funcional mínimo (Marchuk, 1986)

$$E = \sum_{i=1}^N \xi_i (\bar{Q}_i - Q_i) = \min \quad (5.17)$$

en el cual \bar{Q}_i y Q_i son tasas de emisión inicial y programada, respectivamente, el coeficiente ξ_i , determina el gasto de capital para tecnología que asegura el mismo volumen de rendimiento sobre nivel disminuido de emisiones (calculado para cada unidad de tasa de emisión).

Entonces el funcional E representa gastos totales necesarios para mejorar los procesos de producción en todas las unidades industriales cuando nosotros pasamos de \bar{Q}_i a Q_i . Como resultado, nosotros llegamos al problema de búsqueda de Q_i y el efecto de variación $\delta Q_i = \bar{Q}_i - Q_i$ en (5.14) - (5.15) tales que cumplan las condiciones (5.16) y (5.17). El problema (5.14)- (5.17) puede ser reducido a un problema de programación lineal (Marchuk, 1986).

b) Caso de estimación de variación arbitraria $\delta Q_i(t)$

Una vez más supongamos que ya están predeterminados Ω , U , $Q_i(t)$, T y τ , y nosotros queremos estudiar el efecto de variación $\delta Q_i(t)$ en la tasa de emisiones de la fuente de contaminación $Q_i(t)$ sobre la concentración promedio de contaminante aéreo $J(\phi)$ en la zona Ω . De acuerdo al estimador directo (5.1), el problema de transporte (4.1) – (4.5) debe ser resuelto repetidamente siempre y cuando uno de los $Q_i(t)$ cambie.

Si el número de variaciones $\delta Q_i(t)$ probado para cada i ($i = 1, \dots, N$) es grande, entonces la aproximación directa ha de consumir tiempo y la estimación adjunta es más económica. Por otra parte la solución del problema adjunto (4.27) – (4.30), (4.2) una vez resuelto se usa repetidamente en la formula (Skiba, 1997)

$$\delta J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(r_i, t) \delta Q_i(t) dt \tag{5.18}$$

para evaluar variaciones $\delta J(t)$ producido por variaciones arbitrarias de $\delta Q_i(t)$ en la tasa de emisiones. Notamos que si el intervalo de tiempo $(0, T)$ no es tan grande entonces en lugar de (5.18) debe ser utilizada la formula completa

$$\delta J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(r_i, t) \delta Q_i(t) dt + \int_D g(r, 0) \delta \phi^0(r) dr \tag{5.19}$$

tomando en cuenta la parte que describe variaciones $\delta \phi^0(r)$ en el campo inicial.

CAPITULO VI. Modelo numérico del transporte y difusión de contaminación en la ciudad de Guadalajara.

VI.1 Discretización del modelo en espacio

Para discretizar el problema de transporte (o su adjunto) en el espacio se usa el método de diferencias finitas y el método de balance (Marchuk, 1982).

Tenemos la ecuación de transporte (4.1)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (U\phi) + \sigma\phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi = F$$

donde

$$F = \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(r - r_i).$$

Desarrollando el término $\nabla \cdot (U\phi)$ y utilizando la ecuación de continuidad (4.2) obtenemos la ecuación

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \cdot \nabla \phi + \sigma\phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi = F$$

donde

$$A\phi = U \cdot \nabla \phi + \sigma\phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi$$

es un operador lineal. Utilizando la ecuación de continuidad, describimos A de la forma

$$A\phi = \frac{1}{2} \nabla (U\phi) + \frac{1}{2} \dot{U} \cdot \nabla \phi + \sigma\phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi$$

Sea $A = A_1 + A_2$ donde

$$A_1 \phi = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (u\phi) + \frac{1}{2} u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma\phi - \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \tag{6.1}$$

$$A_2\phi = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} (v\phi) + \frac{1}{2} v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{1}{2} \sigma \phi - \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (6.2)$$

Con ayuda de (4.4)-(4.5) puede ser mostrado que cada uno de los operadores separados A_i ($i = 1, 2$) es positivamente semidefinido (Skiba, 1993). Al discretizar el problema de transporte, se usa el método de separación de las variables basado en las representaciones $A = A_1 + A_2$ (Skiba 1997). Por ejemplo, las funciones ϕ , u , y v se presentan sobre distintas mallas (Fig. 6.1): $\phi_{ij} = \phi(x_i, y_j)$, $u_{ij} = u(x_{i-1/2}, y_j)$ y $v_{ij} = v(x_i, y_{j-1/2})$.

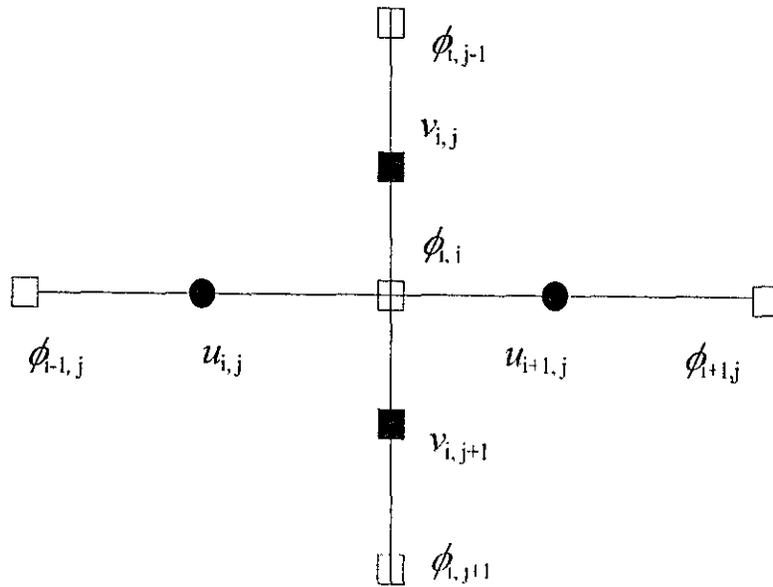


Fig. 6.1 Malla horizontal para interpolación de las funciones físicas.

Las matrices A_i^h que representan los operadores A_i en la malla tienen la forma siguiente:

$$(A_1^h \phi)_{ij} = \frac{u_{i+1,j} \phi_{i+1,j} - u_{ij} \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} + \sigma \phi_{ij} - \frac{\mu}{(\Delta x)^2} [\phi_{i+1,j} - 2\phi_{ij} + \phi_{i-1,j}] \quad (6.3)$$

$$(A_2^h \phi)_{ij} = \frac{v_{i,j+1} \phi_{i,j+1} - v_{ij} \phi_{i,j-1}}{2\Delta y} + \sigma \phi_{ij} - \frac{\mu}{(\Delta y)^2} [\phi_{i,j+1} - 2\phi_{ij} + \phi_{i,j-1}] \quad (6.4)$$

La ecuación de continuidad se aproxima como

$$\frac{u_{i+1,j} - u_{ij}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1} - v_{ij}}{\Delta y} = 0 \quad (6.5)$$

Las aproximaciones (6.3)-(6.5) son del segundo orden respecto a los tamaños de malla Δx y Δy (Marchuk, 1982; Marchuk y Skiba, 1976).

VI.2 Discretización del modelo en tiempo

Para discretizarlo en tiempo se aplica el método de separación “componente-por-componente” por Marchuk (1982) y el esquema de Crank-Nicholson (Crank y Nicholson 1947). El método permite reducir la solución del problema original bidimensional a la solución de dos problemas simples unidimensionales.

Aplicando el método “componente por componente” dentro de cada intervalo temporal elemental (t_{n-1}, t_{n+1}) , obtenemos el esquema siguiente de discretización del modelo en tiempo:

- 1) en la primera etapa, en el intervalo (t_{n-1}, t_n) se resuelve la ecuación $\frac{\partial \phi_1}{\partial t} + A_1 \phi_1 = 0$ con la condición inicial $\phi_1(t_{n-1}) = \phi(t_{n-1})$;
- 2) en la segunda etapa, en el intervalo (t_n, t_{n+1}) se resuelve la ecuación $\frac{\partial \phi_2}{\partial t} + A_2 \phi_2 = 0$ con la condición inicial $\phi_2(t_n) = \phi_1(t_n)$;
- 3) en la tercera etapa, en el intervalo doble (t_n, t_{n+1}) se resuelve la ecuación $\frac{\partial \phi_3}{\partial t} = F$ con la condición inicial $\phi_3(t_n) = \phi_2(t_n)$;

4) en la cuarta etapa, en el intervalo (t_n, t_{n+1}) se resuelve la ecuación $\frac{\partial \phi_4}{\partial t} + A_2 \phi_4 = 0$ con la condición inicial $\phi_4(t_n) = \phi_3(t_{n+1})$;

5) en la quinta etapa, en el intervalo (t_n, t_{n+1}) se resuelve la ecuación $\frac{\partial \phi_5}{\partial t} + A_1 \phi_5 = 0$ con la condición inicial $\phi_5(t_n) = \phi_4(t_{n+1})$.

Finalmente supongamos que $\phi(t_{n+1}) = \phi_5(t_{n+1})$.

Después, el mismo ciclo se repite en el siguiente intervalo doble (t_{n+1}, t_{n+3}) , etc. El esquema posee segundo orden de aproximación respecto al tamaño de la malla temporal. Cada problema separado 1)-5) se aproxima por el esquema de Crank-Nicolson (1947):

$$\frac{\bar{\phi}^{n+1} - \bar{\phi}^n}{\tau} + \Lambda \frac{\bar{\phi}^{n+1} + \bar{\phi}^n}{2} = \bar{F}^n \quad (6.6)$$

donde Λ es la matriz que representa a cada uno de los operadores del operador lineal.

Dentro de cada intervalo doble (t_{n-1}, t_{n+1}) de la malla temporal, el esquema numérico para el problema de transporte consiste de las tres ecuaciones que se resuelvan una por una en el orden mencionado:

$$\begin{aligned} \Phi\left[n - \frac{3-i}{3}\right] - \Phi\left[n - \frac{4-i}{3}\right] &= -\frac{\tau}{2} A_i^h \left(\Phi\left[n - \frac{3-i}{3}\right] + \Phi\left[n - \frac{4-i}{3}\right] \right) \quad (i=1,2) \\ \Phi\left[n + \frac{1}{3}\right] - \Phi\left[n - \frac{1}{3}\right] &= -\tau A_3^h \left(\Phi\left[n + \frac{1}{3}\right] + \Phi\left[n - \frac{1}{3}\right] \right) + 2\pi q[n] \\ \Phi\left[n + \frac{4-i}{3}\right] - \Phi\left[n + \frac{3-i}{3}\right] &= -\frac{\tau}{2} A_i^h \left(\Phi\left[n + \frac{4-i}{3}\right] + \Phi\left[n + \frac{3-i}{3}\right] \right) \quad (i=2,1) \end{aligned} \quad (6.7)$$

en donde Φ y q son los vectores que representan valores de malla de soluciones ϕ_g con pasos en el tiempo fraccionales, y valores de malla del forzamiento Q en el momento t_n respectivamente. En cada uno de tales pasos fraccionales el algoritmo es absolutamente estable. Cada ecuación unidimensional (6.7) fácilmente se resuelve sin iteraciones utilizando factorización LU . En el caso de que los operadores sean sesgadamente simétricos (ver la sección IV.2) y no exista forzamiento, cada uno de los esquemas tiene dos leyes de conservación (Skiba, 1993).

VI.3. Método de factorización para resolver los problemas separados unidimensionales.

Caso del modelo directo.

El método de separación permite reducir la solución del problema original bidimensional a la solución de dos problemas simples unidimensionales los cuales se resuelven sin iteraciones usando la factorización LU (Godunov y Riabeñkii, 1973; Marchuk y Skiba 1976).

Separando los términos en el momento del tiempo $(n + 1)$ y n obtenemos

$$\left(I + \frac{\tau}{2} \Lambda \right) \bar{\phi}^{n+1} = \tau \bar{f}^n + \left(I - \frac{\tau}{2} \Lambda \right) \bar{\phi}^n \quad (6.8)$$

Aquí I es la matriz de identidad, Λ es la matriz que representa al operador lineal de cada uno de los problemas 1)-5) en cada intervalo elemental. Desarrollamos la ecuación (6.8) en diferencias finitas en la dirección x considerando (6.3):

$$\begin{aligned} & \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\tau} + \frac{u_{i+1,j} \phi_{i+1,j}^{n+1} - u_{ij} \phi_{i-1,j}^{n+1}}{4h} - \mu \frac{\phi_{i+1,j}^{n+1} - 2\phi_{ij}^{n+1} + \phi_{i-1,j}^{n+1}}{2h^2} - \frac{\sigma}{4} \phi_j^{n+1} = \\ & = F_{ij}^n - \frac{u_{i+1,j} \phi_{i+1,j}^n - u_{ij} \phi_{i-1,j}^n}{4h} + \mu \frac{\phi_{i+1,j}^n - 2\phi_{ij}^n + \phi_{i-1,j}^n}{2h^2} + \frac{\sigma}{4} \phi_{ij}^n \end{aligned}$$

Separando los términos en los momentos de tiempo $(n + 1)$ y n obtenemos el análogo de la (6.8) en diferencias finitas

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\tau}{2h} \left(-\frac{u_{ij}}{2} - \frac{\mu}{h} \right) \right) \phi_{i-1,j}^{n+1} + \left(1 + \frac{\tau}{2} \frac{2\mu}{h^2} + \frac{\tau}{2} \frac{\sigma}{2} \right) \phi_{ij}^{n+1} + \left(\frac{\tau}{2h} \left(\frac{u_{i+1,j}}{2} - \frac{\mu}{h} \right) \right) \phi_{i+1,j}^{n+1} = \\ & \tau F_{ij}^n + \left(\frac{\tau}{2h} \left(\frac{u_{ij}}{2} + \frac{\mu}{h} \right) \right) \phi_{i-1,j}^n + \left(1 - \frac{\tau}{2} \frac{2\mu}{h^2} - \frac{\tau}{2} \frac{\sigma}{2} \right) \phi_{ij}^n + \left(\frac{\tau}{2h} \left(-\frac{u_{i+1,j}}{2} + \frac{\mu}{h} \right) \right) \phi_{i+1,j}^n \end{aligned} \quad (6.9)$$

De (6.9) tenemos

$$a_i \phi_{i-1,j}^{n+1} - b_i \phi_{ij}^{n+1} + c_i \phi_{i+1,j}^{n+1} = -f_i^n \quad (6.10)$$

donde el índice $i = i_0, \dots, i_k$ se cambia sobre los puntos internos de la malla que se ubican en la línea con índice fijo j . Aquí, f_i^n es la parte derecha de la igualdad y los coeficientes

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{\tau}{2h} \left(\frac{\mu}{h} + \frac{u_{ij}}{2} \right) \\ b_i &= 1 + \frac{\tau}{2} \left(\frac{2\mu}{h^2} + \frac{\sigma}{2} \right) \\ c_i &= \frac{\tau}{2h} \left(\frac{\mu}{h} - \frac{u_{i+1,j}}{2} \right) \end{aligned} \quad (6.11)$$

son coeficientes dados. Ahora mostremos la aproximación de las condiciones de frontera.

Supongamos, por ejemplo, que $M = (x_{1/2,j}, y_j)$ es el punto de frontera del dominio de malla, y

sea u_{1j} un valor positivo de la u -componente de la velocidad de viento en el punto M . Entonces

$U_n = -u_{1j} < 0$, y por tanto, el punto M pertenece a S^- , y la condición (4.4) se aproxima como

$$\mu \frac{\phi_{0j} - \phi_{1j}}{\Delta x} + u_{1j} \frac{\phi_{0j} + \phi_{1j}}{2} = 0 \quad (6.12)$$

Análogamente, se aproximan las condiciones (4.4) y (4.5) en todos los puntos de la frontera.

Aquí, para cada i , las matrices A_i^h son positivamente semidefinidas, además son asimétricas en el caso especial cuando $\mu=0$, $\sigma=0$, y $U_n=0$ en toda la frontera S .

Ahora, utilizando las condiciones de frontera y el método de factorización hallamos la solución de (6.10). La solución se busca de la forma

$$\phi_{i-1} = \alpha_i \phi_i + \beta_i \quad (6.13)$$

de aquí la ecuación (6.10) se describe como

$$a_i(\alpha_i \phi_i + \beta_i) - b_i \phi_i + c_i \phi_{i+1} = -f_i$$

Despejando ϕ_i tenemos

$$\phi_i = \frac{c_i}{b_i - a_i \alpha_i} \phi_{i+1} + \frac{f_i + a_i \beta_i}{b_i - a_i \alpha_i} \quad (6.14)$$

Comparando con (6.13) obtenemos

$$\alpha_{i+1} = \frac{c_i}{b_i - a_i \alpha_i} \quad \text{y} \quad \beta_{i+1} = \frac{f_i + a_i \beta_i}{b_i - a_i \alpha_i} \quad (6.15)$$

entonces

$$\phi_i = \alpha_{i+1} \phi_{i+1} + \beta_{i+1} \quad (6.16)$$

Considerando las condiciones (6.12) de contorno encontramos α_1 y β_1 . Luego se usan fórmulas para hallar todos los coeficientes α_i y β_i . Para aplicar la fórmula (6.16) es necesario calcular ϕ_{i_k} en el último punto i_k de la línea. Este valor se busca de (6.16) para $i = i_k$ y de la condición de contorno correspondiente a dicho punto fronterizo.

VI.4. Discretización del problema adjunto

El operador del problema (4.27)-(4.30) es adjunto al operador A , y puede ser representado como $A^* = A_1^* + A_2^*$ donde

$$A_1^* g = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (ug) - \frac{1}{2} u \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma g - \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial g}{\partial x} \quad (6.17)$$

$$A_2^* g = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} (vg) - \frac{1}{2} v \frac{\partial g}{\partial y} + \frac{1}{2} \sigma g - \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial g}{\partial y} \quad (6.18)$$

Las matrices adjuntas $(A_i^h)^*$ se obtienen de (6.3) y (6.4) con la sustitución de u, v y ϕ por $-u, -v$ y g , respectivamente. También, una de las propiedades importantes que posee nuestra discretización es que $(A_i^h)^* = (A_i^*)^h$ para cada i ($i = 1, 2$), donde por los índices h y $*$ se designan la proyección en la malla y la operación adjunta, respectivamente.

$$(A_1^h g)_{ij}^* = \frac{-u_{i+1,j} g_{i+1,j} + u_{ij} g_{i-1,j}}{2\Delta x} + \sigma g_{ij} - \frac{\mu}{(\Delta x)^2} [g_{i+1,j} - 2g_{ij} + g_{i-1,j}] \quad (6.19)$$

$$(A_2^h g)_{ij}^* = \frac{-v_{i,j+1} g_{i,j+1} + v_{ij} g_{i,j-1}}{2\Delta y} + \sigma g_{ij} - \frac{\mu}{(\Delta y)^2} [g_{i,j+1} - 2g_{ij} + g_{i,j-1}] \quad (6.20)$$

Las propiedades mencionadas de las matrices separadas nos permiten construir para ambos modelos los esquemas balanceados, compatibles y absolutamente estables.

Para discretizar el problema adjunto en tiempo se aplica el método de separación "componente-por-componente" como en el caso del modelo directo. Pero ya que la solución del modelo adjunto su busca en el intervalo $[T, 0]$, es decir en la dirección contraria, el esquema de separación 1) - 5) dentro de cada intervalo temporal elemental (t_{n+1}, t_n) , se realiza en el orden inverso, es decir:

- 1) en la primera etapa del modelo adjunto, que corresponde a la etapa 5) del modelo directo, en el intervalo (t_n, t_{n+1}) se resuelve la ecuación $\frac{\partial g_5}{\partial t} + A_1^* g_5 = 0$ con la condición inicial $g_5(t_{n+1}) = g(t_{n+1})$.
- 2) en la segunda etapa del modelo adjunto, que corresponde a la etapa 4) del modelo directo, en el intervalo (t_n, t_{n+1}) se resuelve la ecuación $\frac{\partial g_4}{\partial t} + A_2^* g_4 = 0$ con la condición inicial $g_4(t_{n+1}) = g_5(t_n)$;
- 3) en la tercera etapa del modelo adjunto, que corresponde a la etapa 3) del modelo directo, en el intervalo doble (t_{n-1}, t_{n+1}) se resuelve la ecuación $\frac{\partial g_3}{\partial t} = P$ con la condición inicial $g_3(t_{n+1}) = g_4(t_n)$;
- 4) en la cuarta etapa del modelo adjunto, que corresponde a la etapa 2) del modelo directo, en el intervalo (t_{n-1}, t_n) se resuelve la ecuación $\frac{\partial g_2}{\partial t} + A_2^* g_2 = 0$ con la condición inicial $g_2(t_n) = g_3(t_{n-1})$;
- 5) en la última etapa del modelo adjunto, que corresponde a la etapa 1) del modelo directo, en intervalo (t_{n-1}, t_n) se resuelve la ecuación $\frac{\partial g_1}{\partial t} + A_1^* g_1 = 0$ con la condición inicial $g_1(t_n) = g_4(t_{n-1})$. Finalmente supongamos que $g(t_{n-1}) = g_1(t_{n-1})$.

Después, el mismo ciclo se repite en el siguiente doble intervalo de tiempo (t_{n-3}, t_{n-1}) , etc. Cada problema adjunto separado se aproxima por el esquema de Crank – Nicholson (1947):

$$\frac{\bar{g}^n - \bar{g}^{n+1}}{\tau} + \Lambda \frac{\bar{g}^n + \bar{g}^{n+1}}{2} = \bar{P}^n \quad (6.21)$$

donde \mathcal{A}^* es la matriz que representa a cada uno de los operadores del operador lineal adjunto.

Ahora construiremos esquemas numéricos dentro de cada intervalo de tiempo de doble paso

(t_{n-1}, t_{n+1}) :

$$\begin{aligned}
 G\left[n + \frac{3-i}{3}\right] - G\left[n + \frac{4-i}{3}\right] &= -\frac{\tau}{2}(A_i^h)^* \left(G\left[n + \frac{3-i}{3}\right] + G\left[n + \frac{4-i}{3}\right] \right) \quad (i=1,2) \\
 G\left[n - \frac{1}{3}\right] - G\left[n + \frac{1}{3}\right] &= -\tau(A_3^h)^* \left(G\left[n - \frac{1}{3}\right] + G\left[n + \frac{1}{3}\right] \right) + 2p[n] \\
 G\left[n - \frac{4-i}{3}\right] - G\left[n - \frac{3-i}{3}\right] &= -\frac{\tau}{2}(A_i^h)^* \left(G\left[n - \frac{4-i}{3}\right] + G\left[n - \frac{3-i}{3}\right] \right) \quad (i=2,1)
 \end{aligned} \tag{6.22}$$

en donde G y p son los vectores que representan valores de malla de soluciones g con pasos en el tiempo fraccionales, y valores de malla del forzamiento P en el momento t_n respectivamente. En cada uno tales pasos fraccionales el algoritmo es absolutamente estable.

VI.5 Método de factorización para el modelo adjunto.

Igual que en el caso del modelo directo la solución del modelo adjunto se basa sobre el método de separación, en donde cada problema unidimensional simple se resuelve usando la factorización LU (Godunov y Riabekñkii, 1973; Marchuk y Skiba, 1976). Separamos los términos de la ecuación (6.21) en el momento del tiempo n y $(n+1)$ y obtenemos

$$\left(I + \frac{\tau}{2} \mathcal{A}^* \right) \bar{g}^n = \tau \bar{p}^{n+1} + \left(I - \frac{\tau}{2} \mathcal{A}^* \right) \bar{g}^{n+1} \tag{6.23}$$

Aquí I es la matriz de identidad, A^* es la matriz que representa al operador lineal de cada uno de los problemas 1)-5) en cada intervalo elemental. Desarrollando la ecuación (6.17) en diferencias finitas en la dirección x igual que la ecuación (6.8) y separando los términos en los momentos de tiempo $(n+1)$ y n obtenemos el análogo de la (6.23) en diferencias finitas

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\tau}{2h} \left(\frac{u_{i-1,j}}{2} - \frac{\mu}{h} \right) \right) g_{i-1,j}^n + \left(1 + \frac{\tau}{2} \frac{2\mu}{h^2} + \frac{\tau \sigma}{2} \right) g_{ij}^n - \left(\frac{\tau}{2h} \left(\frac{u_{i+1,j}}{2} + \frac{\mu}{h} \right) \right) g_{i+1,j}^n = \\ & d_{ij}^{n+1} + \left(\frac{\tau}{2h} \left(-\frac{u_{i-1,j}}{2} + \frac{\mu}{h} \right) \right) g_{i-1,j}^{n+1} + \left(1 - \frac{\tau}{2} \frac{2\mu}{h^2} - \frac{\tau \sigma}{2} \right) g_{ij}^{n+1} + \left(\frac{\tau}{2h} \left(\frac{u_{i+1,j}}{2} + \frac{\mu}{h} \right) \right) g_{i+1,j}^{n+1} \end{aligned} \quad (6.24)$$

De (6.24) tenemos

$$a_i g_{i-1,j}^n - b_i g_{ij}^n + c_i g_{i+1,j}^n = -f_{ij}^{n+1} \quad (6.25)$$

Aquí, f_{ij}^{n+1} es la parte derecha de la igualdad y los coeficientes a , b y c

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{\tau}{2h} \left(\frac{\mu}{h} - \frac{u_{ij}}{2} \right) \\ b_i &= 1 + \frac{\tau}{2} \left(\frac{2\mu}{h^2} + \frac{\sigma}{2} \right) \\ c_i &= \frac{\tau}{2h} \left(\frac{\mu}{h} + \frac{u_{i+1,j}}{2} \right) \end{aligned} \quad (6.26)$$

son coeficientes dados. Ahora mostremos la aproximación de las condiciones de frontera. Supongamos, por ejemplo, que $M = (x_{1/2,j}, y_j)$ es el punto de frontera del dominio de malla, y sea u_{1j} un valor positivo de la u -componente de la velocidad de viento en el punto M . Entonces $U_n = -u_{1j} < 0$, y por tanto, el punto M pertenece a S^+ , y la condición (4.29) se aproxima como

$$\mu \frac{g_{0j} - g_{1j}}{\Delta x} - u_{1j} \frac{g_{0j} + g_{1j}}{2} = 0 \quad (6.27)$$

Análogamente, se aproximan las condiciones (4.28) y (4.29) en todos los puntos de la frontera.

Aquí, para cada i , las matrices $(A_i^h)^*$ son también positivamente semidefinidas. Ahora, utilizando las condiciones de frontera, iniciales y el método de factorización se desarrolla el esquema de solución de (6.26) en forma análoga que en el caso (6.8).

VI. 6 Estimaciones discretas del modelo directo y adjunto

Ahora nosotros obtendremos un análogo discreto de la formula (5.2) adecuado para el uso en experimentos numéricos. Con este fin, vamos a dividir el intervalo entero $(0, T)$ en N uniformes subintervalos (t_{n-1}, t_n) de longitud suficientemente pequeña Δt en donde $n = 1, \dots, N$, $t_0 = 0$ y $t_N = T$. Luego (5.2) puede ser aproximada como

$$J_w(\phi) \cong \Delta t \Delta r \frac{1}{2\Omega} \sum_{i=1}^I \sum_{n=1}^N \phi_i(r_i, t_n) \quad (6.28)$$

en donde $\phi(r_i, t_n)$ son promedios de las funciones $\phi(r, t)$ dentro del intervalo (t_{n-1}, t_n) .

Ahora nosotros obtendremos un análogo discreto del estimador adjunto (5.6) adecuado para el uso en experimentos numéricos. Con este fin, vamos a dividir el intervalo entero $(0, T)$ en N uniformes subintervalos (t_{n-1}, t_n) de longitud suficientemente pequeña Δt en donde $n = 1, \dots, N$, $t_0 = 0$ y $t_N = T$. Luego (5.6) puede ser aproximada como

$$J_w(\phi) \cong \Delta t \sum_{i=1}^I \sum_{n=1}^N g(r_i, t_n) Q_i(t_n) \quad (6.29)$$

en donde $g(r_i, t_n)$ y $Q_i(t_n)$ son promedios de las funciones $g(r, t)$ y $Q_i(\bar{t})$ dentro del intervalo (t_{n-1}, t_n) . De esta manera si para algunas i y n , el más pequeño de los valores $g(r_i, t_n)$ y $Q_i(t_n)$ es igual a cero (o menor) entonces su producto también es igual a cero (o menor), y por lo tanto, no existe

la contribución de una i -ésima fuente $Q_i(t_n)$ (o su contribución es muy insignificante) dentro del intervalo (t_{n-1}, t_n) de la ecuación (6.29). Obviamente, $Q_i(t_n)$ es igual a cero solamente si no hay descargas de contaminantes a la atmósfera en esta i -ésima fuente. En cuanto a $g(r_i, t_n)$, esta función puede ser igual a cero o ser muy pequeña si n se cierra en N , es decir si el intervalo (t_{n-1}, t_n) no se aleja mucho del momento $t = T$. Sin embargo, la estructura temporal y espacial del forzamiento (5.3) muestra que dentro del intervalo $(T-\tau, T)$ magnitudes no nulas de la solución del problema adjunto se encuentran cercanas a la zona Ω , por lo tanto, toma tiempo para que ellas alcancen la fuente del sitio r_i (nosotros recordaremos que el problema adjunto se resuelve en el tiempo hacia atrás). Según este hecho, la contribución del intervalo $(T-\tau, T)$ es pequeña y puede ser omitida. Esta simplificación transforma (5.6) en una fórmula de predicción (Skiba, 1996 a).

CAPITULO VII. Experimentos numéricos

VII.1 Selección de las zonas ecológicamente sensitivas y parámetros para experimentos numéricos.

Para realizar los experimentos numéricos como primera etapa se seleccionaron cuatro zonas ecológicamente sensibles mostradas previamente en la figura 1.1: el “Parque Colomos” (zona *PC*), el “Centro Histórico” (zona *CH*), “Zoológico” de Guadalajara (zona *ZOO*) y “Tlaquepaque” (zona *TLA*). El “Parque Colomos” es la principal área verde de la zona urbana en donde la ciudadanía desarrolla actividades deportivas y de turismo, mientras que el “Centro Histórico” y Tlaquepaque son las zonas turísticas, comerciales y de mayor densidad de población que cuenta con monumentos, edificios y otros atractivos turísticos. Debido a graves problemas de contaminación atmosférica, estos monumentos históricos sufren serios procesos de corrosión y como consecuencia, requieren gran apoyo económico para su mantenimiento y restauración. El “Zoológico” de la ZMG es una gran área verde en donde se encuentra la exposición de todo tipo de animales y aves al aire libre, que requieren de un cuidado especial y sobre todo un ambiente limpio. Además, por sus fines educativos es el área de visitas y actividades de diversión para la población más joven de la ciudad, los niños. De tal manera, es muy importante desde el punto de vista económico, social y de salud la preservación del medio en estas zonas. Con tales fines, es muy importante definir las fuentes básicas de contaminantes que afectan las zonas en mención y controlar las emisiones para evitar situaciones ambientales severas.

Uno de los objetivos de este trabajo fue desarrollar un modelo numérico para resolver el problema (4.1)-(4.5) de transporte de bióxido de azufre, SO_2 . Con tales fines, se usaron dos tipos

del viento climático en los experimentos numéricos para la ZMG: el viento tipo I característico para la temporada húmeda (junio – septiembre) con dirección de sureste hacia oeste y el viento tipo II característico para la temporada seca (octubre – mayo) con dirección de suroeste hacia este. Los campos de ambos tipos de viento fueron obtenidos basándose en los datos del archivo climatológico de la Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG) creado en un período de 1960 a 1999 (Davydova y Skiba 1999, Davydova *et al.* 1999). El coeficiente $\sigma = \bar{V}_d + \Lambda + k[OH \cdot]$ del modelo de transporte y difusión de SO_2 toma en cuenta las tres velocidades: $\sigma_s = \bar{V}_d$ (deposición seca), $\sigma_h = \Lambda$ (deposición por precipitación o húmeda) y de oxidación, $\sigma_o = k[OH \cdot]$, considerando que $\sigma_s \gg \sigma_h$ para la temporada seca, y $\sigma_s \ll \sigma_h$ para la temporada húmeda (Stockwell y Calvert, 1983; Manahan, 1991; Seinfeld and Pandis, 1998). Para los experimentos que fueron realizados en este trabajo se asumió el valor de la velocidad media de deposición seca y oxidación de bióxido de azufre igual a 8 - 9 % por hora para la temporada seca y de 13 -14 % por hora para la temporada húmeda. Para estimar el coeficiente de difusión que se considera constante para cada período (húmedo y seco) y con el fin de resaltar el término de transporte advectivo se usó la igualdad (Reynolds, 1883 y 1894; Mikkelsen, 1995)

$$3.5\mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \cong \bar{u} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} \quad (7.1)$$

De aquí se estiman los coeficientes μ_I (temporada húmeda) y μ_{II} (temporada seca)

$$\mu_I = \frac{1}{3.5} \bar{u}_I \Delta x \text{ y } \mu_{II} = \frac{1}{3.5} \bar{u}_{II} \Delta x \quad (7.2)$$

en donde la velocidad del viento climático para la temporada húmeda y seca son $\bar{u}_I = 3.5$ m/s y $\bar{u}_{II} = 2.0$ m/s, $\Delta x = 600$ m, de tal manera que $\mu_I \cong 600$ m²/s y $\mu_{II} \cong 350$ m²/s.

Para cada experimento como fuentes de SO_2 de las 52 productoras de bióxido de azufre (Fig. 7.1), consideradas de alto riesgo para la salud humana (según el Atlas de Riesgos Ambientales en la ZMG, 1994) fueron elegidas aleatoriamente once fábricas. Las ubicaciones de estas fábricas se indican en las figuras que muestran resultados de experimentos desarrollados con los puntos *A, B, C, D, E, F, H, J, K, L* y *M*.

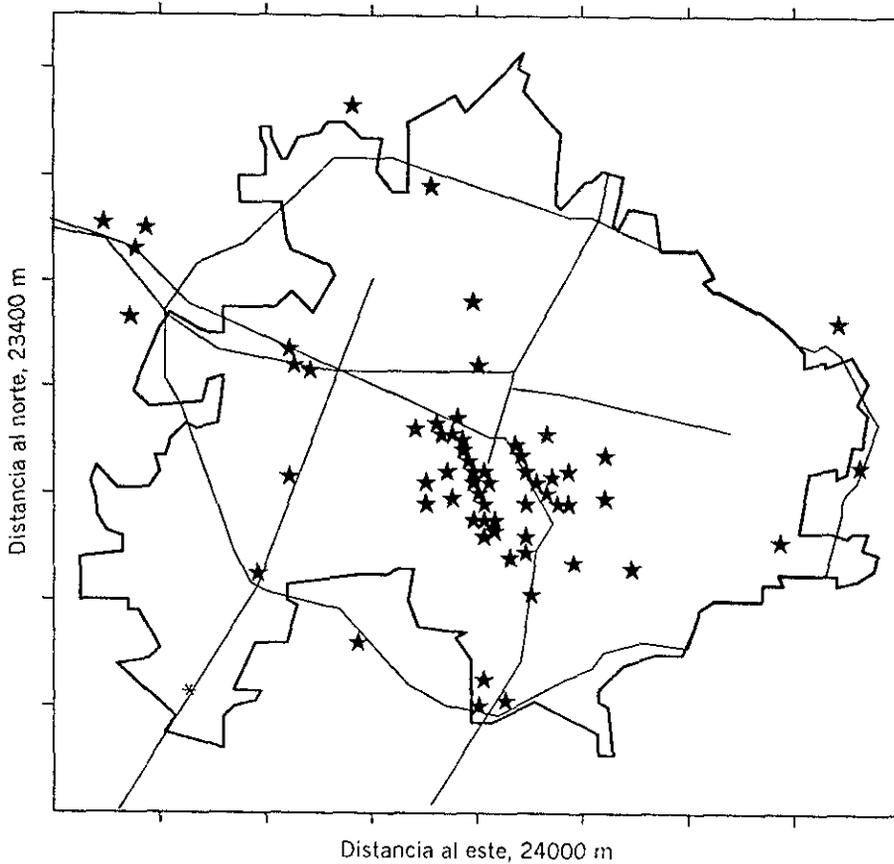


Fig. 7.1. Ubicación de 52 plantas industriales (★) consideradas de alto riesgo para la salud humana (Atlas de Riesgos Ambientales en la ZMG, 1994). Aquí la línea gruesa () marca el área urbano de la Zona Metropolitana de Guadalajara y líneas delgadas () son algunas de las avenidas principales de la ciudad.

VII. 2 Soluciones del problema adjunto para 4 zonas, viento climático tipo I.

Es de gran interés e importancia tener información sobre la contribución de cada fuente (fábrica) en el nivel promedio de contaminación $J(\phi)$ en las zonas PC , CH , ZOO ó TLA , lo cual es difícil hacer mediante el modelo directo (4.1)-(4.5). Sin embargo, es bastante fácil calcular dicha contribución mediante soluciones del modelo adjunto (4.27)-(4.30) usando las fórmulas (5.4) ó (5.6). Con este fin, se hallan soluciones del modelo adjunto para cada zona. Es necesario recordar que el modelo adjunto se corre en la dirección de tiempo opuesta (es decir, del momento “final” $t = T$ al momento “inicial” $t = 0$). En las Fig. 7.2, 7.3, 7.4 y 7.5 se presentan isolíneas de la solución $g(r, t)$ del problema adjunto (4.27)-(4.30) calculadas con el viento tipo I para las zonas PC , CH , ZOO y TLA respectivamente, en donde las líneas punteadas corresponden a los momentos $t = T - 60min$ y líneas continuas para $t = T - 90min$. Uno puede observar que el número de plantas industriales que aparecen en la región de más grandes valores de $g(r, t)$ depende de la ubicación de la zona ecológica Ω en dominio D . Por ejemplo, las funciones de influencia $g(r, t)$ para las fábricas denominadas A , B , H y M en la Fig. 7.2 son próximas a cero, mientras que las fábricas C , D , E , F y K son las de mayor peso para la zona “Parque Colomos” durante la temporada húmeda. Sin embargo, la Fig. 7.3 para la zona “Centro Histórico” muestra que las funciones de influencia $g(r, t)$ de tres fábricas C , D y E que son de mayor influencia para PC son insignificativas para CH en la presencia del viento tipo I, igual que las fábricas H y M . Aquí, las plantas industriales de importancia son F , J , K y L . Para la zona ZOO (Fig. 7.4) de las 11 fuentes emisoras solamente la fábrica M es de influencia importante, misma que fue

despreciable para las zonas *PC* y *CH*. En el caso de *TLA* (Fig. 7.5) los valores más altos de $g(r, t)$ pertenecen a las fuentes denominadas *J, K* y *L*.

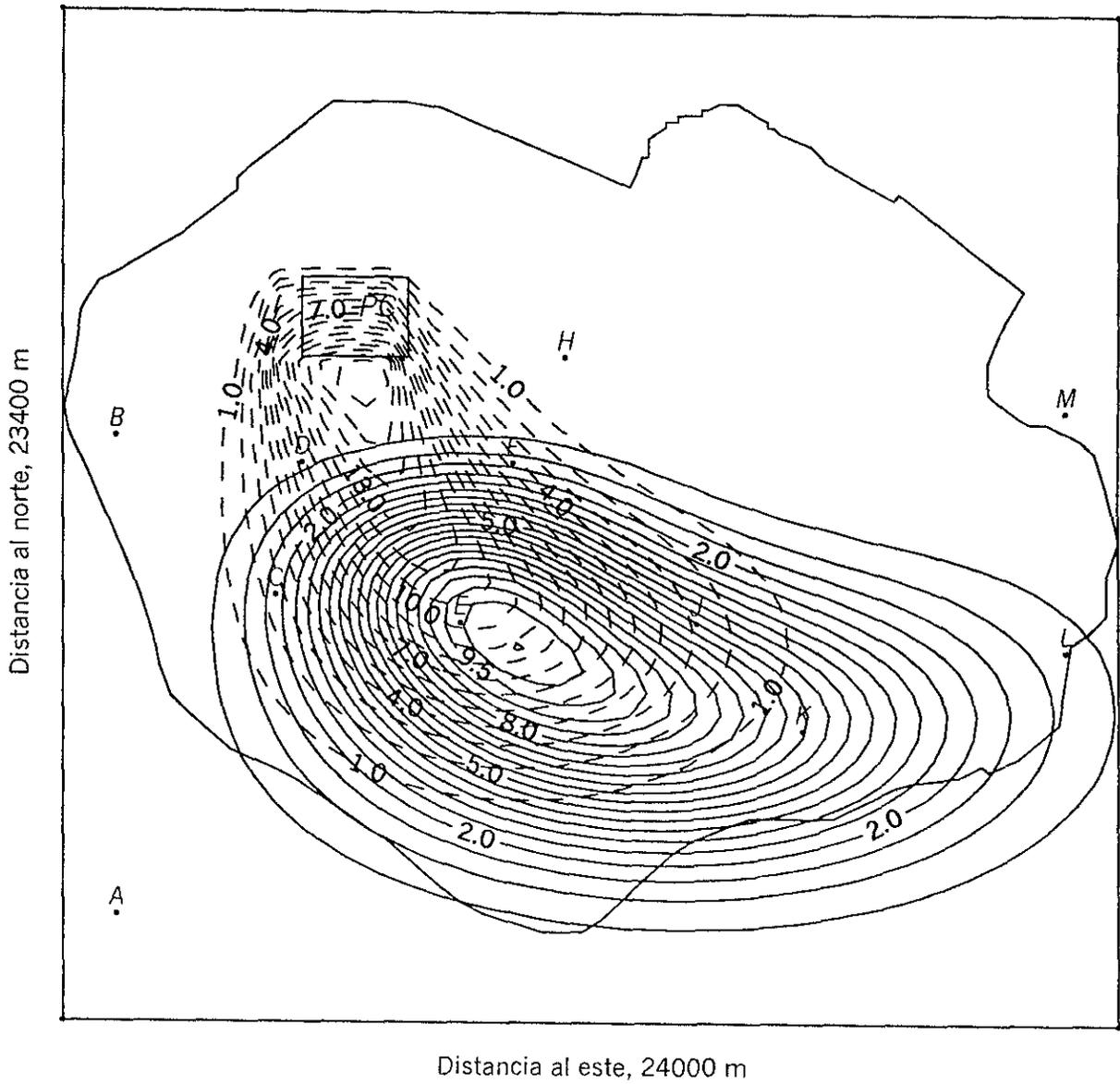


Fig. 7.2. Solución del problema adjunto $g(I, J) \cdot 10^4$, calculada para la zona *PC*; viento tipo I (temporada húmeda) para dos momentos de tiempo: $t = T - 60 \text{ min}$ (---) y $t = T - 90 \text{ min}$ (—); $T = 270 \text{ min}$; $\mu = 600 \text{ m}^2/\text{s}$.

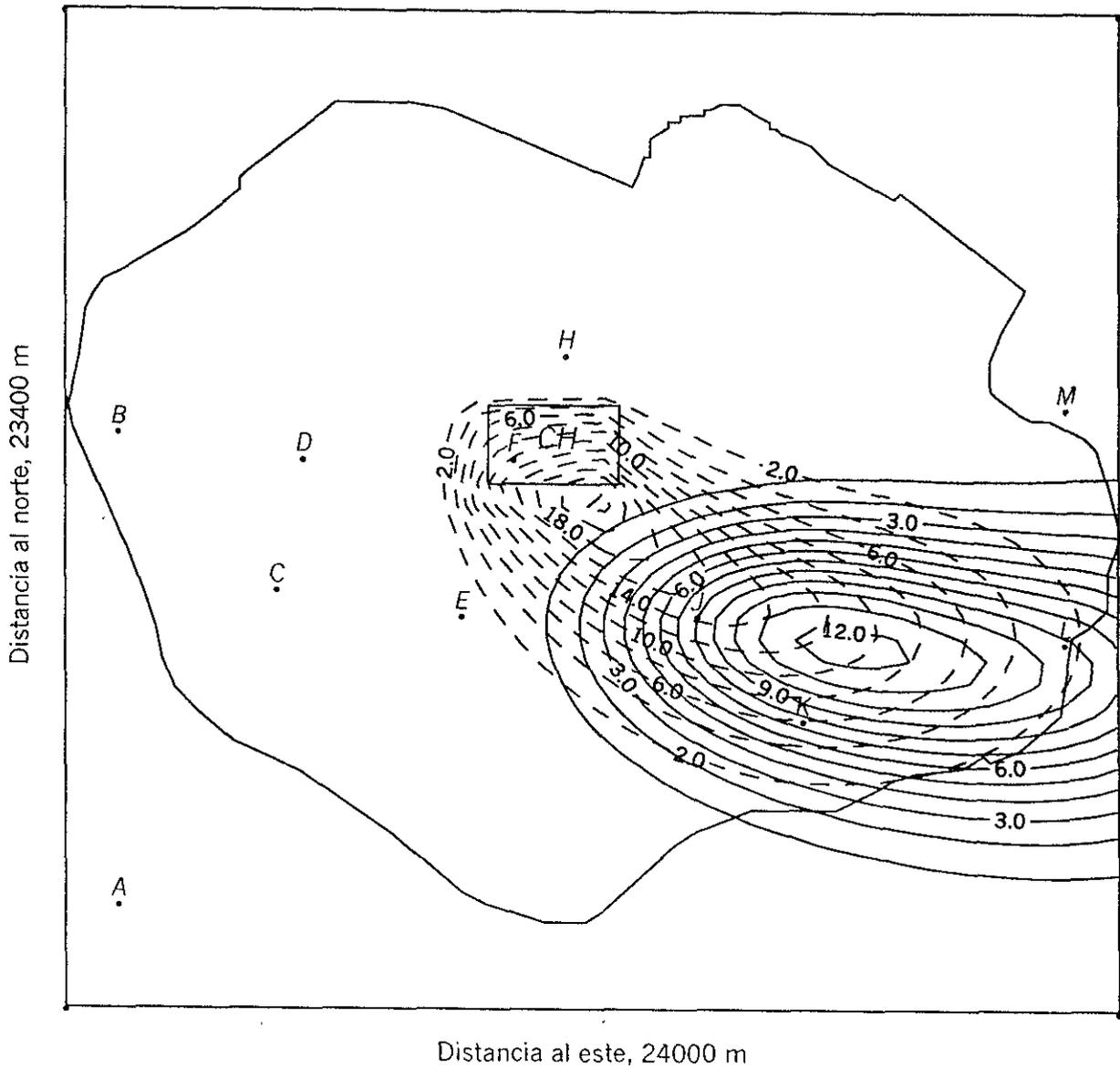


Fig. 7.3. Solución del problema adjunto $g(I, J) \cdot 10^4$, calculada para la zona CH; viento tipo I (temporada húmeda) para dos momentos de tiempo: $t = T - 60 \text{ min}$ (---) y $t = T - 90 \text{ min}$ (—); $T = 270 \text{ min}$; $\mu = 600 \text{ m}^2/\text{s}$.

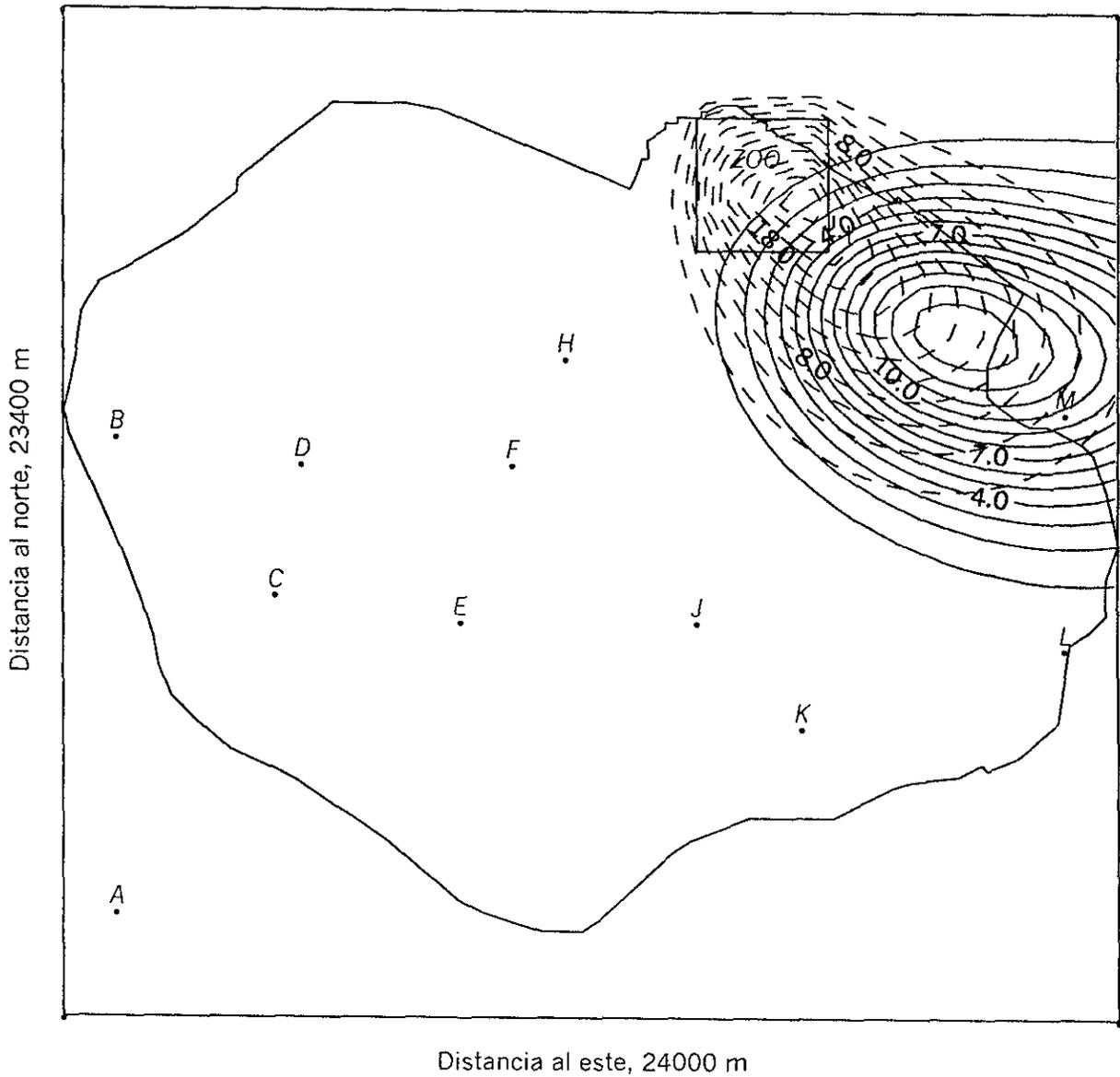


Fig. 7.4. Solución del problema adjunto $g(I, J) \cdot 10^4$, calculada para la zona ZOO; viento tipo I (temporada húmeda) para dos momentos de tiempo: $t = T - 60 \text{ min}$ (---) y $t = T - 90 \text{ min}$ (—); $T = 270 \text{ min}$; $\mu = 600 \text{ m}^2/\text{s}$.

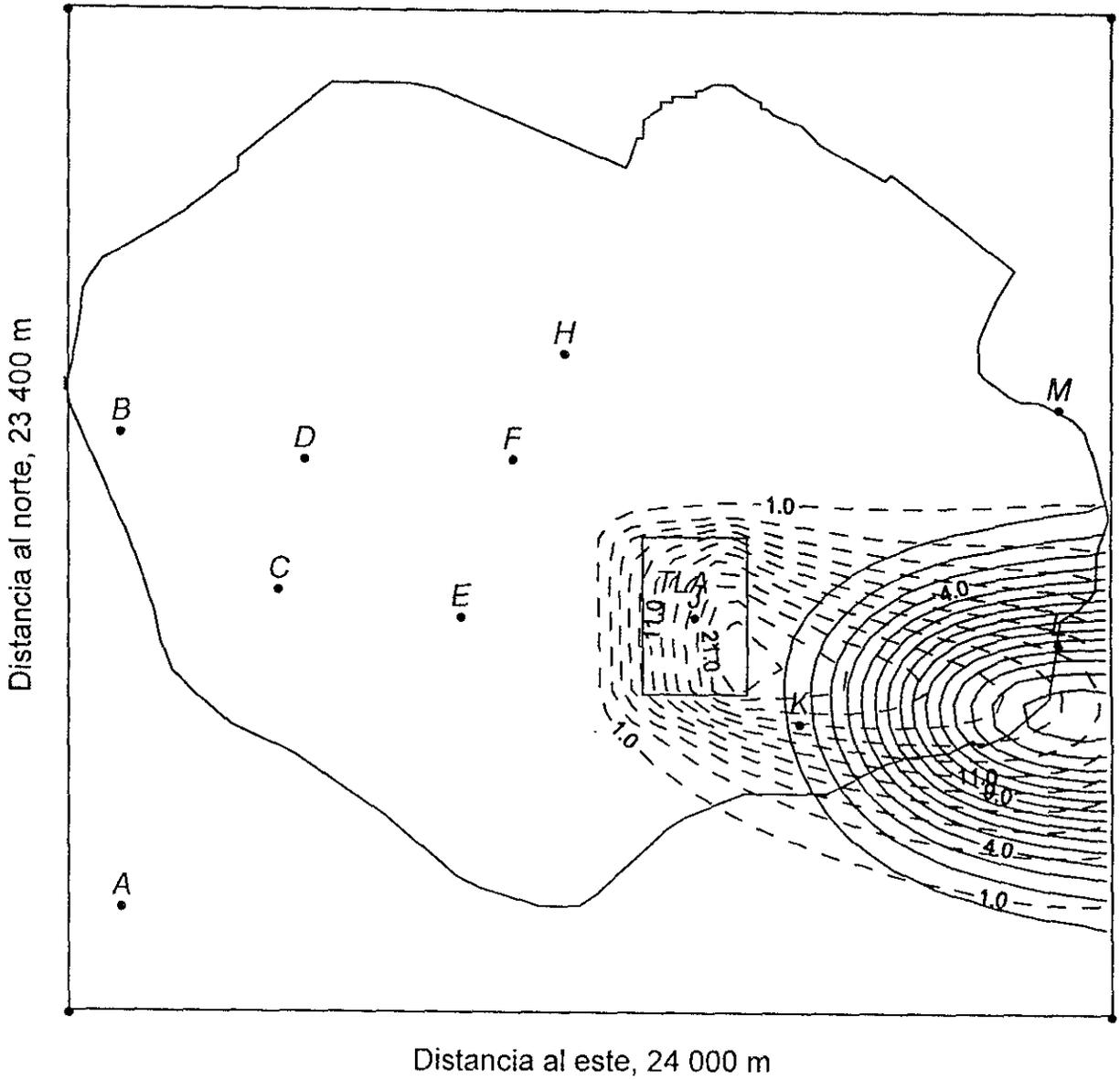


Fig. 7.5. Solución del problema adjunto $g(I, J) \cdot 10^4$, calculada para la zona TLA; viento tipo I (temporada húmeda) para dos momentos de tiempo: $t = T - 60 \text{ min}$ (---) y $t = T - 90 \text{ min}$ (—); $T = 270 \text{ min}$; $\mu = 600 \text{ m}^2/\text{s}$.

VII.3 Soluciones del problema adjunto para 4 zonas, viento climático tipo II.

Para el viento tipo II (temporada seca), las isolíneas de la solución correspondiente $g(r, t)$ en los mismos dos momentos de t se presentan en Fig. 7.6, 7.7, 7.8 y 7.9 para las zonas *PC*, *CH*, *ZOO* y *TLA* respectivamente. Revisando el número de plantas industriales que aparecen en la región de más grandes valores de $g(r, t)$ se puede observar que para la zona ecológica *PC* las funciones de influencia $g(r, t)$ para las fábricas denominadas *E*, *F*, *H*, *J*, *K*, *L* y *M* en la figura 7.6 son próximas a cero, mientras que las fábricas *A*, *B*, *C* y *D* son las de mayor peso durante la temporada seca. Sin embargo, la figura 7.7 para la zona “Centro Histórico” muestra que las funciones de influencia $g(r, t)$ de tres fábricas *A*, *B* y *D* que son de mayor influencia para *PC* son insignificativas para *CH* en la presencia del viento tipo II, igual que las fábricas *H*, *J*, *K*, *M* y *L*. Aquí las plantas industriales de importancia son *C*, *E* y *F*. Para la zona *ZOO* (Fig. 7.8) en cambio con la temporada húmeda cinco fuentes emisoras *C*, *D*, *E*, *F* y *H* son de influencia importante. En el caso de *TLA* (Fig. 7.9) durante la temporada seca de las once plantas industriales solamente la fuente *J* se observa con valores altos de $g(r, t)$.

Comparando los campos de solución adjunta del modelo (4.27)- (4.30) viento tipo I y viento tipo II, para cada una de las zonas ecológicamente significativas fácilmente se observa la importancia tanto en la ubicación de la zona ecológicamente significativa como en la dirección de los vientos dominantes de la región de estudio, *D*. Sin embargo, algunas de las fuentes de emisión de contaminantes aéreos (por ejemplo, fábrica *D* para la zona *PC*, planta *F* para la zona *CH*) muestran altos valores de influencia durante todo el año, por lo tanto, con el fin de evitar las

situaciones críticas tales fuentes requieren una normatividad de emisiones permisibles más estricta en comparación con los demás fuentes de contaminación aérea.

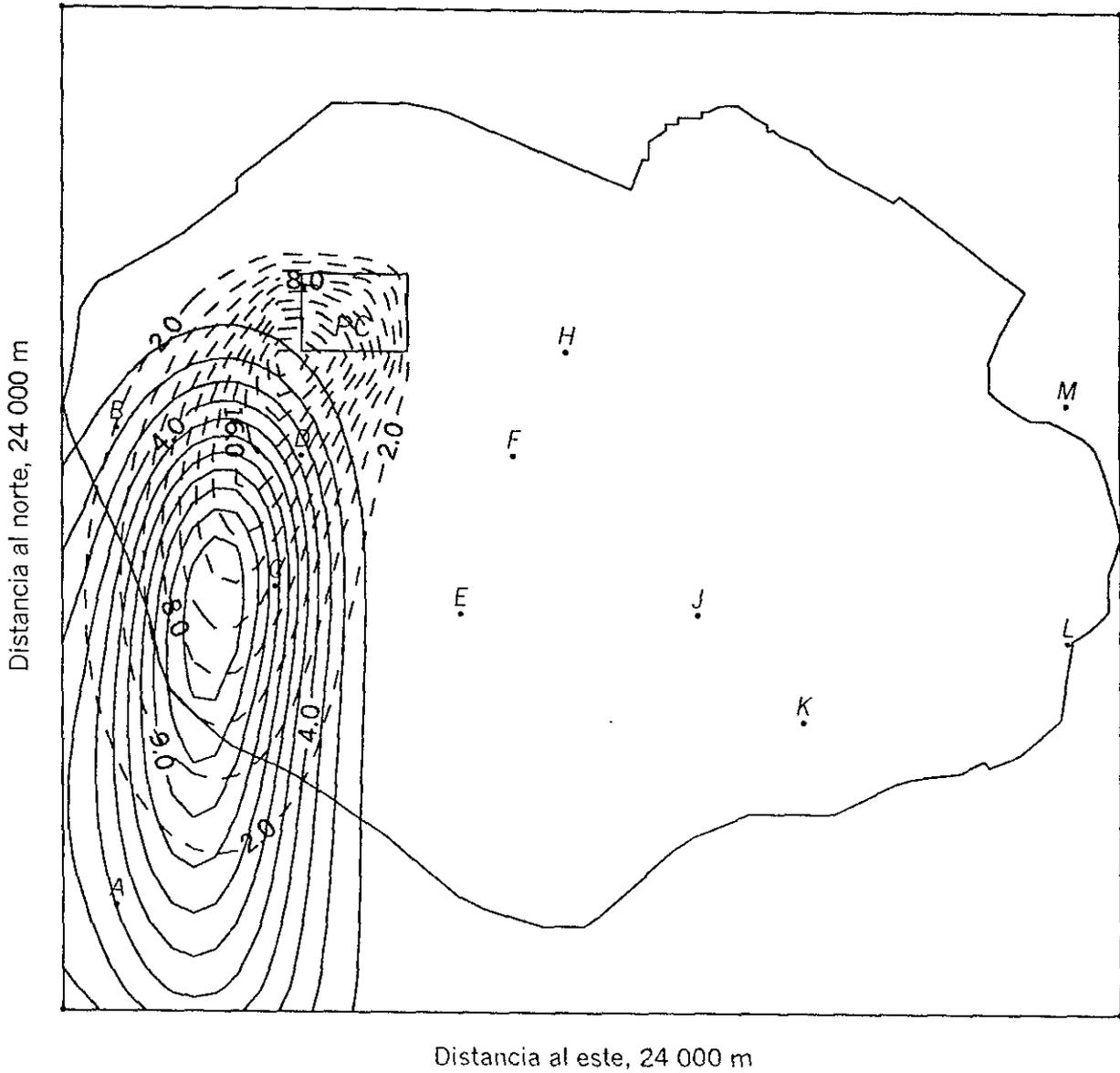


Fig. 7.6. Solución del problema adjunto $g(I, J) \cdot 10^4$, calculada para la zona PC; viento tipo II (temporada seca) para dos momentos de tiempo: $t = T - 60 \text{ min}$ (---) y $t = T - 90 \text{ min}$ (—); $T = 270 \text{ min}$; $\mu = 350 \text{ m}^2/\text{s}$.

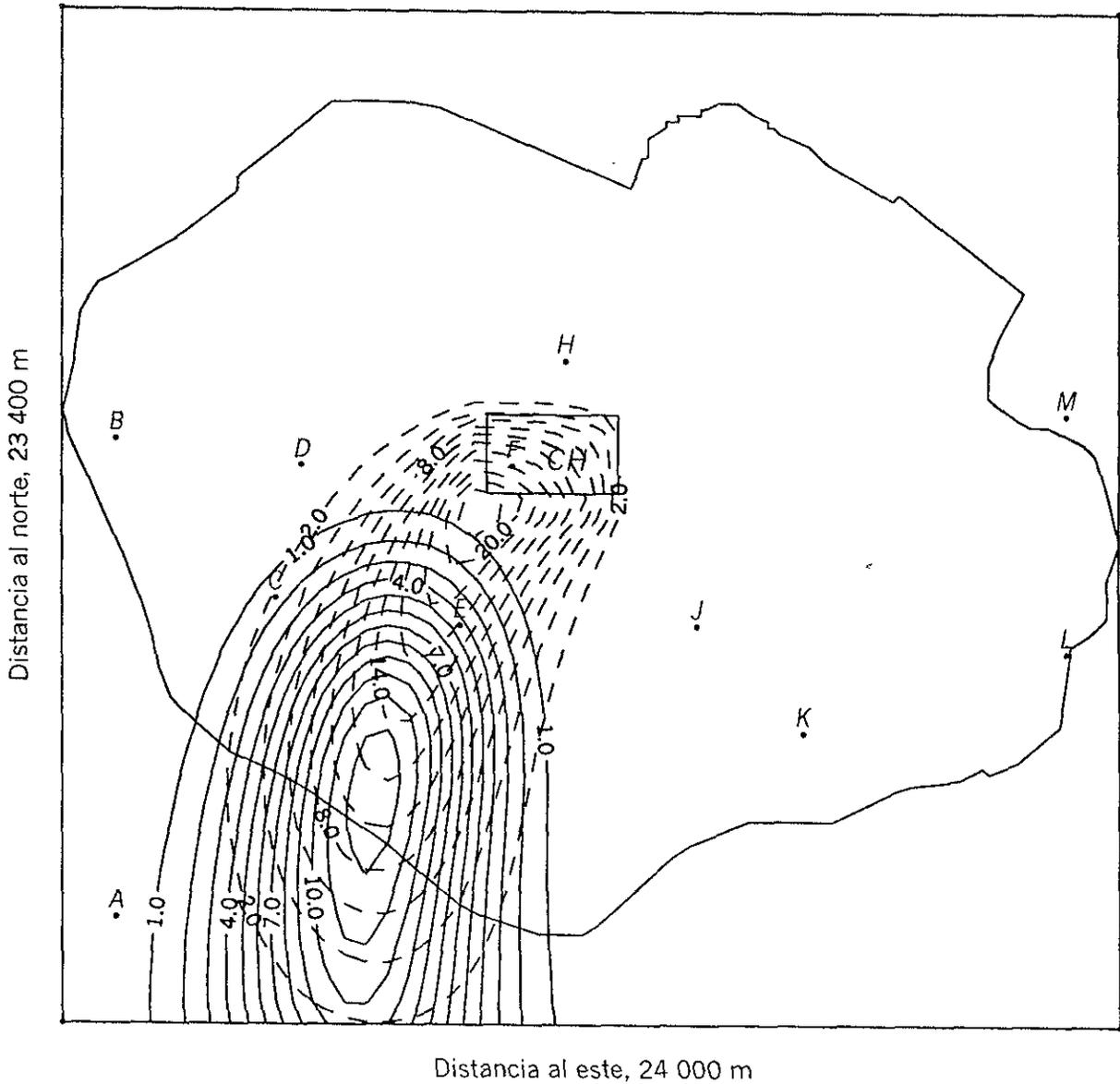


Fig. 7.7. Solución del problema adjunto $g(I, J) \cdot 10^4$, calculada para la zona CH; viento tipo II (temporada seca) para dos momentos de tiempo: $t = T - 60 \text{ min}$ (---) y $t = T - 90 \text{ min}$ (—); $T = 270 \text{ min}$; $\mu = 350 \text{ m}^2/\text{s}$.

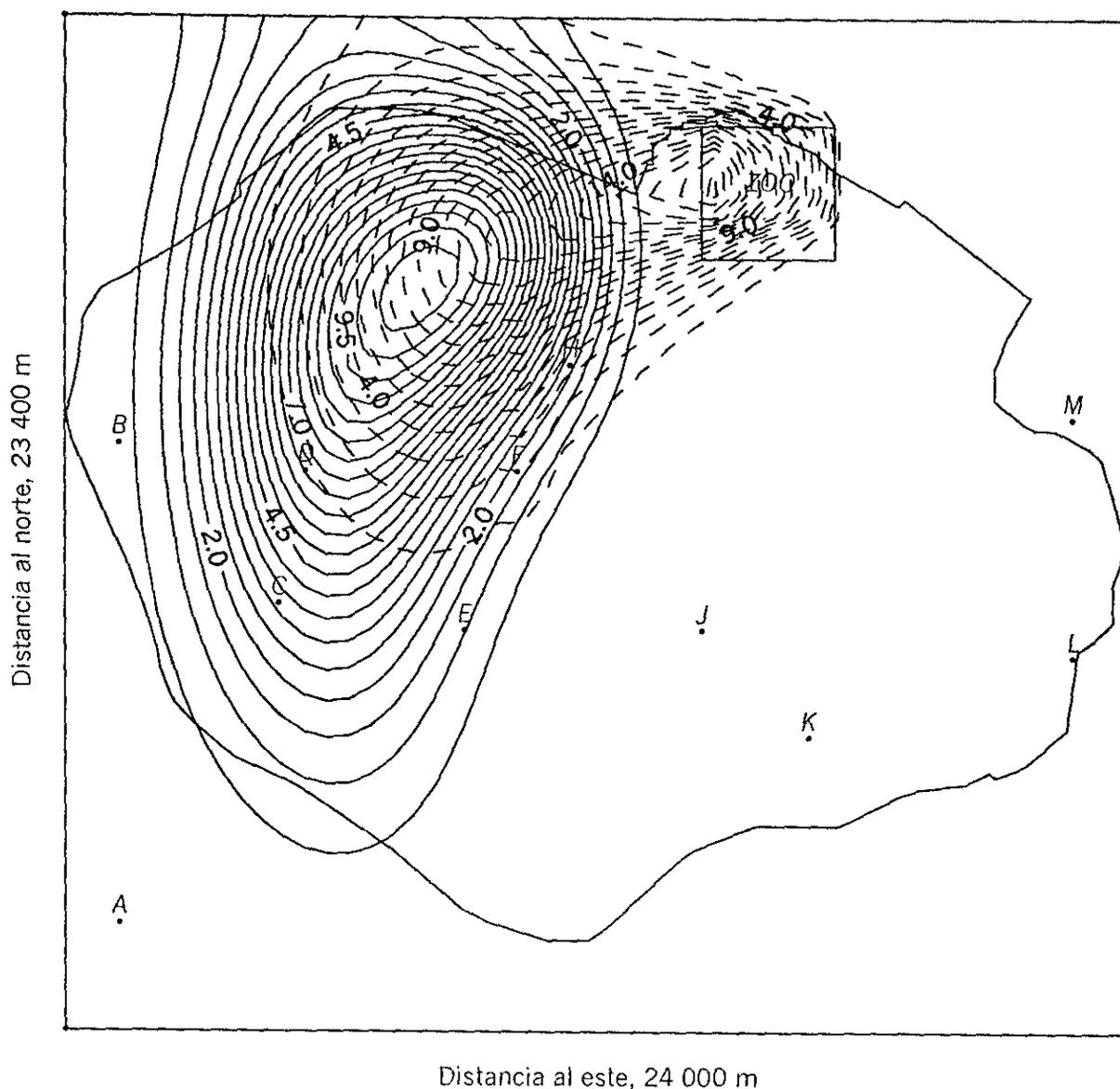


Fig. 7.8. Solución del problema adjunto $g(l, J) \cdot 10^4$, calculada para la zona ZOO; viento tipo II (temporada seca) para dos momentos de tiempo: $t = T - 60 \text{ min}$ (---) y $t = T - 90 \text{ min}$ (—); $T = 270 \text{ min}$; $\mu = 350 \text{ m}^2/\text{s}$.

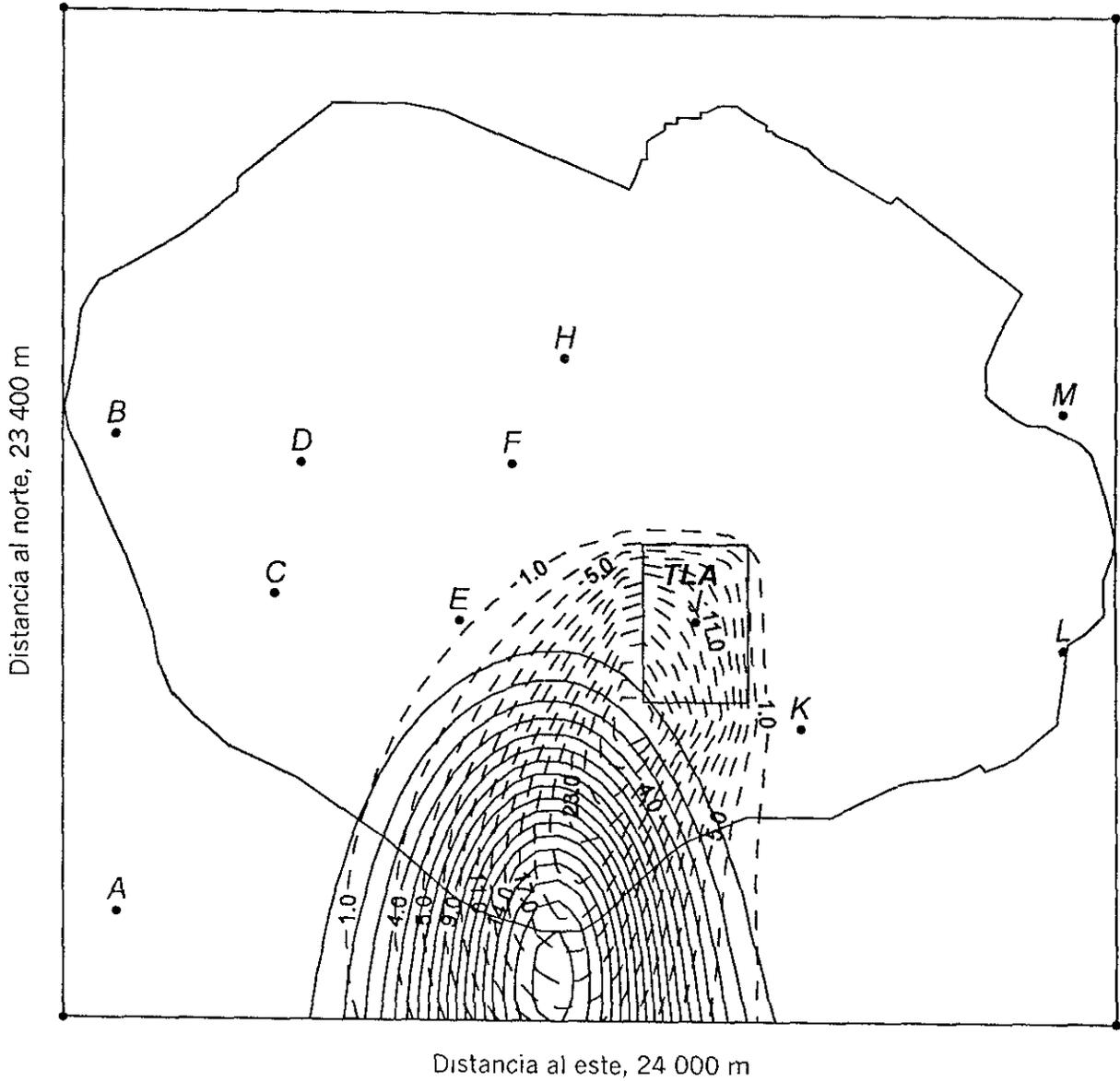


Fig. 7.9. Solución del problema adjunto $g(I, J) \cdot 10^4$, calculada para la zona TLA; viento tipo II (temporada seca) para dos momentos de tiempo: $t = T - 60 \text{ min}$ (---) y $t = T - 90 \text{ min}$ (—); $T = 270 \text{ min}$; $\mu = 350 \text{ m}^2/\text{s}$.

VII.4 Comportamiento temporal de las funciones de peso, $g(r_i, t)$

Según las fórmulas (5.4) y (5.6), el nivel de contaminación en la zona *PC* (ó en cualquier otra zona *CH*, *ZOO* o *TLA*) depende de la tasa de emisión $Q_i(t)$ de la *i*-ésima fábrica a través de los valores $g(r_i, t)$ de la solución del modelo adjunto en el punto de ubicación r_i de la fábrica. Así, para cada i ($i=1,2,\dots,N$), la función no negativa $g(r_i, t)$ sirve en la fórmula (5.4) como una función de peso para la tasa de emisión $Q_i(t)$ y su comportamiento temporal es de gran importancia para determinar las fábricas que contaminan más la zona elegida. Las curvas en las figuras 7.10, 7.11, 7.12 y 7.13 muestran el comportamiento temporal de dichas funciones de peso $g(r_i, t)$ para cada fábrica; aquí las líneas punteadas corresponden a la temporada húmeda (viento tipo I) y las líneas sólidas a la temporada seca (viento tipo II). Se puede ver que para cada r_i , la función $g(r_i, t)$ varía con el tiempo y es distinta del cero sólo en cierto intervalo de tiempo. Se puede observar que la contribución de una u otra fábrica en la contaminación de la zona *PC* depende del viento. Por ejemplo, se deduce de la Fig.7.10 (líneas ---) que dentro de la temporada húmeda, la fábrica *E* ubicada en la Zona Industrial contamina la zona *PC* más que otras, mientras que la fábrica *A* ubicada en Zapopan Sur contamina menos que otras. La misma figura (línea —) muestra que dentro de la temporada seca, la fábrica que contamina más de toda la zona *PC* es la *D* ubicada cerca de la Plaza "México" y la fábrica *B* ubicada en la "Ciudad Granja" contamina menos que todas. Así, las emisiones de la fábrica *A* (ó *II*) prácticamente no contribuyen en el funcional (5.4) para la zona *PC* dentro de la temporada húmeda (temporada seca). También, la figura 7.10 muestra que todas las funciones de peso tienen valores nulos dentro del intervalo (0,

90), es decir, un contaminante transportado por los vientos alcanza la zona *PC* después de un periodo de casi 1 hora y media a partir del momento de su emisión. Este periodo cambia de una fábrica a otra y depende de la dirección de los vientos y de la ubicación de la fábrica.

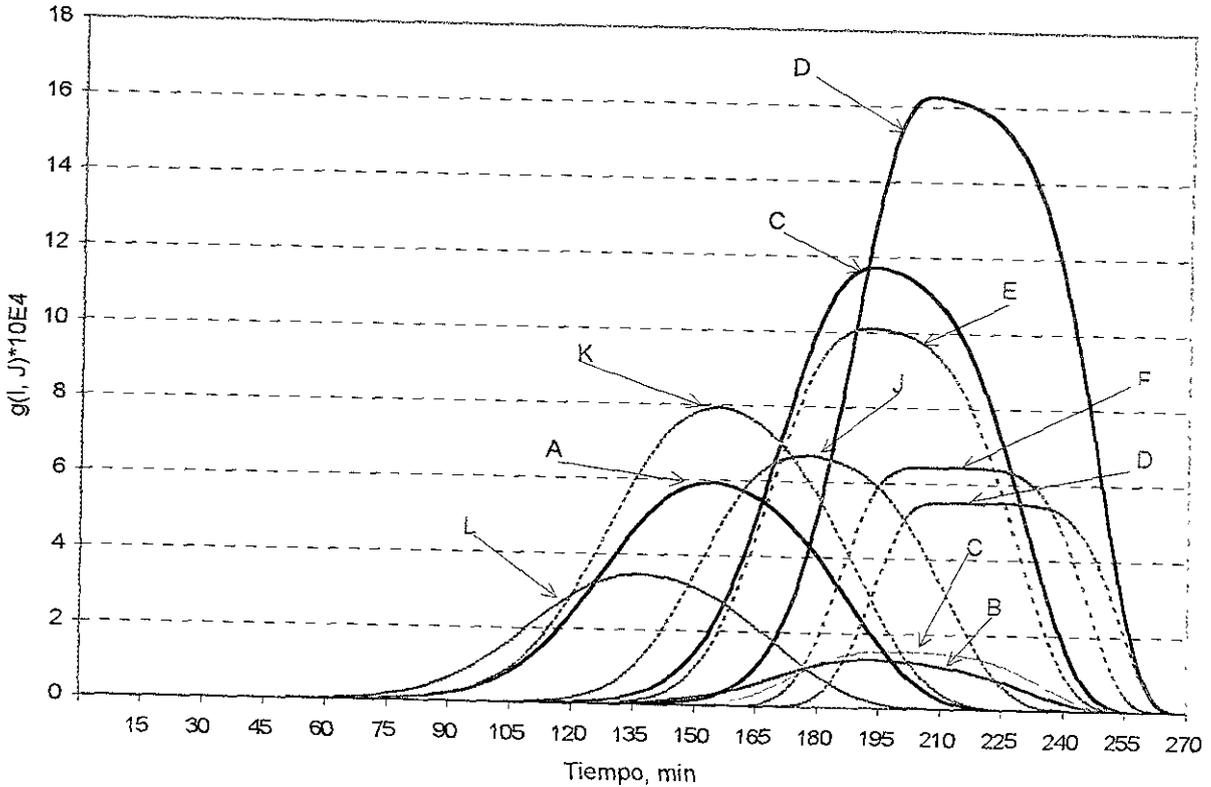


Fig. 7.10. Comportamiento temporal de funciones $g(r, t)$ para la zona *PC* con respecto a la posición de plantas industriales (marcadas con una letra correspondiente). Líneas ---- corresponden al viento tipo I, líneas — corresponden al viento tipo II

Para la zona *CH* ("Centro Histórico"), la figura 7.11 muestra el comportamiento de las funciones de peso para las fábricas marcadas en las figuras 7.3 y 7.7. Se puede observar que para la temporada húmeda, las fábricas *A* y *C* no contaminan la zona *CH*, ya que su función de peso es

prácticamente nula durante todo el periodo, mientras que las fábricas *J*, *F*, *L* y *K* son responsables por la contaminación de la zona *A* a su vez, para la temporada seca, de las once fábricas sólo las *F* y *E* contaminan la zona *CH*, ya que las funciones de peso para las otras tres fábricas tienen valores prácticamente nulos dentro de todo el período $(0, T)$. Además, la figura 7.11 muestra que la fábrica *F* juega el papel principal, porque su función de peso tiene valores dominantes para ambos períodos.

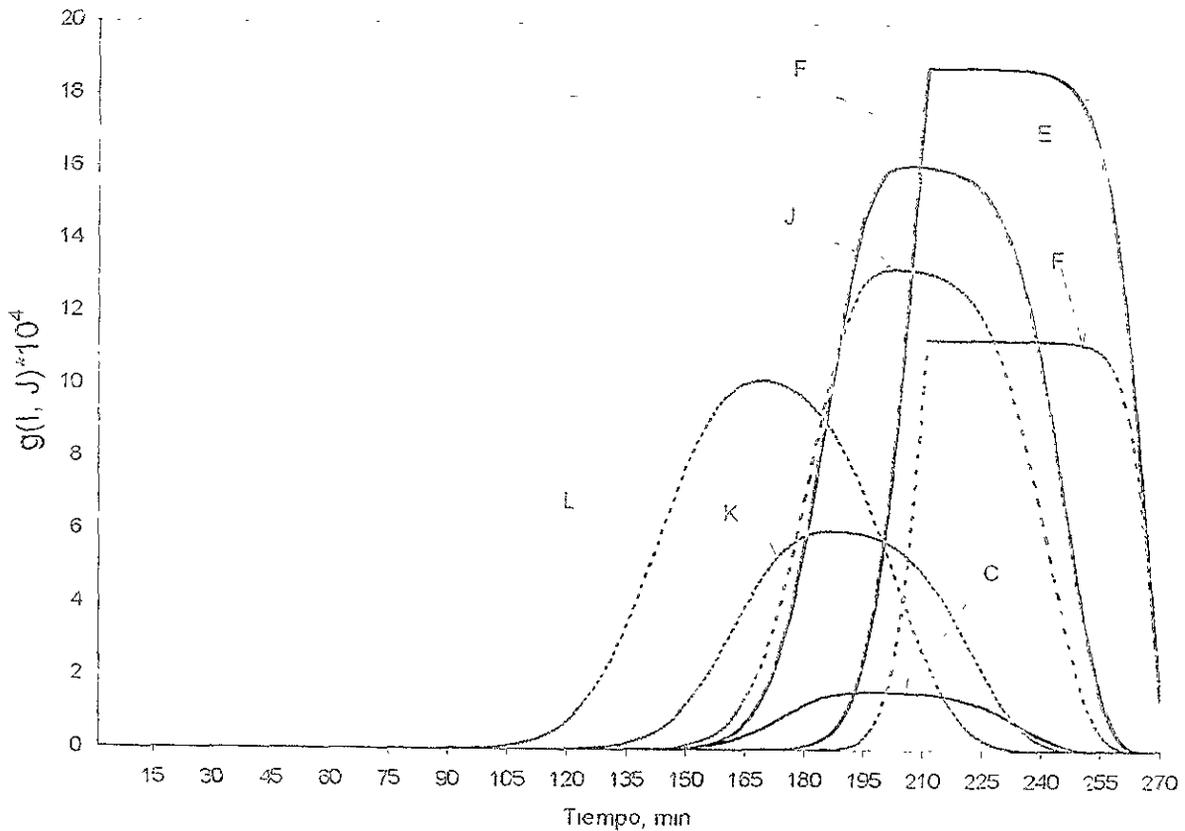


Fig. 7.11. Comportamiento temporal de funciones $g(r, t)$ para la zona *CH* con respecto a la posición de plantas industriales (marcadas con una letra correspondiente) Líneas ---- corresponden al viento tipo I, líneas ---- corresponden al viento tipo II

En su caso, la zona *ZOO* es contaminada solamente por la planta *M* durante el período húmedo, pero durante la temporada seca por las fabricas ubicadas en los puntos *A, B, C, D, E, F, H, M* y *L* (Fig. 7.12).

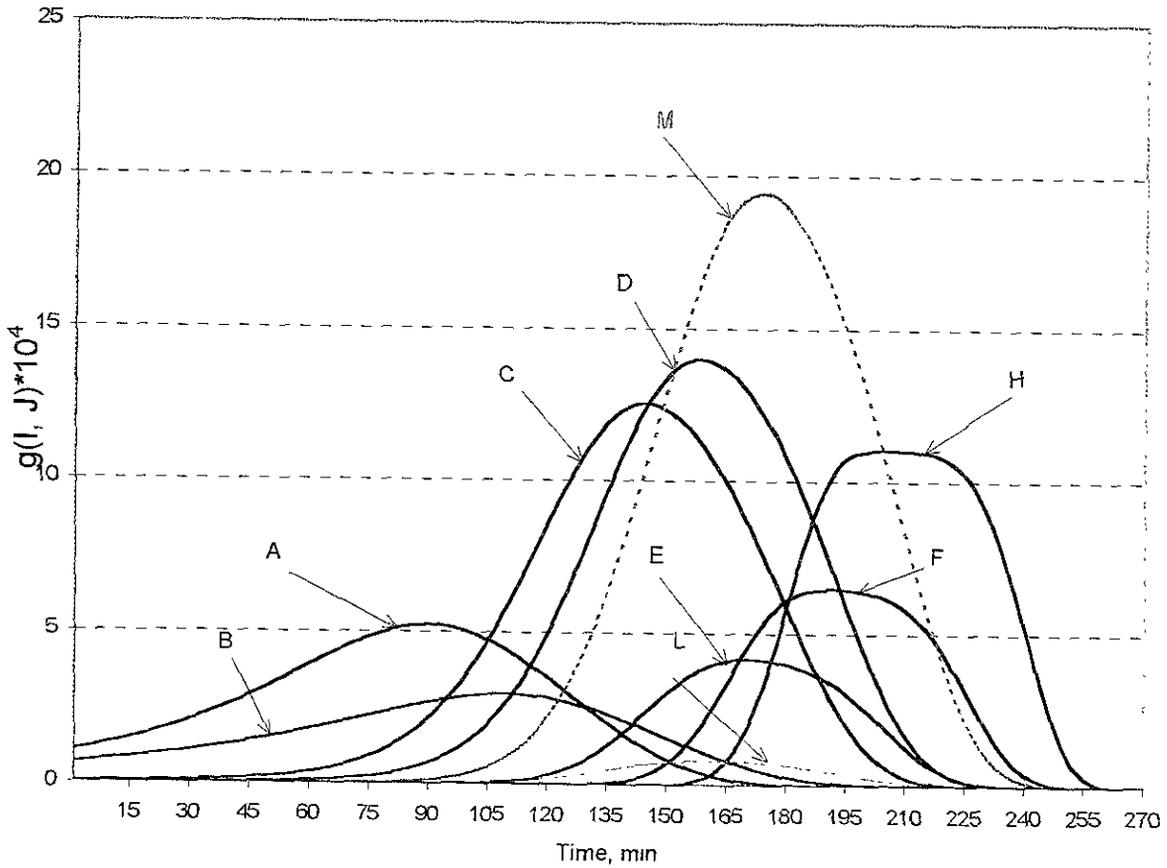


Fig. 7.12. Comportamiento temporal de funciones $g(r, t)$ para la zona *ZOO* con respecto a la posición de plantas industriales (marcadas con una letra correspondiente). Líneas --- corresponden al viento tipo I, líneas — corresponden al viento tipo II.

La zona *TIA* está contaminada por las plantas *J, K* y *L* durante la temporada húmeda, y durante la temporada seca por las fabricas ubicadas en los puntos *J* y *E* (Fig. 7.13). Además, la figura 7.13

muestra que la fábrica *J* juega el papel principal, porque su función de peso tiene valores dominantes para ambos periodos.

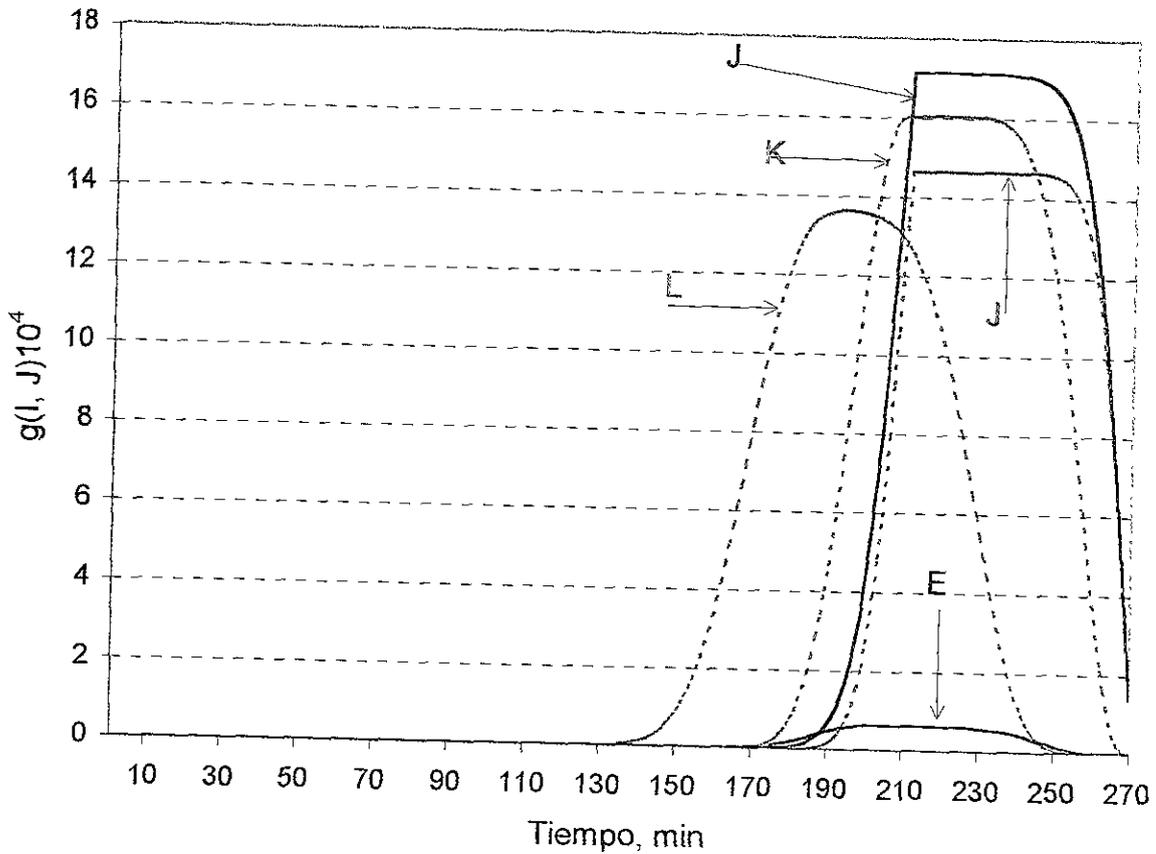


Fig. 7.13. Comportamiento temporal de funciones $g(r, t)$ para la zona TLA con respecto a la posición de plantas industriales (marcadas con una letra correspondiente). Líneas ---- corresponden al viento tipo I, líneas — corresponden al viento tipo II.

Así, las soluciones del modelo adjunto proporcionan información tanto cualitativa como cuantitativa sobre la contribución de cada fábrica en el nivel de contaminación de la zona. Dicha información es muy útil para estimar la situación ecológica en la ZMG y para aplicar las estrategias apropiadas de control de las emisiones industriales (Parra-Guevara y Skiba 2000)

VII.5 Aplicación de las soluciones adjuntas en estimaciones de niveles de contaminación para 4 zonas.

Utilizando las formulas (5.4) y (5.6) se realizó la estimación de los niveles de contaminación en cada zona seleccionada: "PC", "CIF", "ZOO" y "TLA". Según éstas formulas el nivel de contaminación depende de:

- la tasa de emisión $Q_i(t)$ de la i – ésima fuente (fábrica)
- los valores de $g(r_i, t)$ de la solución del modelo adjunto en el punto de ubicación r_i de la fábrica
- la concentración del contaminante $\phi(r, 0)$ al momento inicial de tiempo, $t = 0$, cuando el intervalo de tiempo $(0, T - \tau)$ no es muy largo.

En el trabajo presente se dan resultados del caso de estimación para el período de 0 a 1440 minutos o de 24 horas.

Supongamos que estamos trabajando con los vientos dominantes tipo I y II (temporada húmeda y seca respectivamente), además todas las $N = 11$ fábricas trabajan en un régimen con la tasa de emisión constante, Q_i , $i = 1, 2, \dots, N$. Aquí el intervalo $(0, T - \tau)$ se puede considerar suficientemente largo y aplicar la ecuación de la estimación adjunta (5.6) desarrollándola como

$$J_k(\phi) = Q_1 \int_0^{1440} g(r_1, t) dt + Q_2 \int_0^{1440} g(r_2, t) dt + \dots + Q_{11} \int_0^{1440} g(r_{11}, t) dt \quad (7.3)$$

Esta solución adjunta (7.3) sirve como la función de peso que permite valorar la participación de cada fábrica sobre la concentración de contaminación del aire en la k – ésima zona y calcular su nivel promedio de concentración de contaminación $J(\phi)$ durante éste período de tiempo.

En la tabla 7.1 se dan resultados de cálculo de funciones de peso $\int g(r_i, t) dt$ y las tasa de emisión de cada i - ésima fábrica.

Tabla 7.1. Funciones de influencia, $\int g(r_i, t) dt, m^3$.

Fuente de emisión	Q _i , g/s	$\int g(r_i, t) dt$ CH		$\int g(r_i, t) dt$ PC		$\int g(r_i, t) dt$ TLA		$\int g(r_i, t) dt$ ZOO	
		V _I	V _{II}	V _I	V _{II}	V _I	V _{II}	V _I	V _{II}
		A	100	0	0.3	0.06	1.83	0	0.003
B	100	0	0.141	0.061	1.94	0	0	0	0.5
C	60	0.004	1.57	1.62	5.4	0	0	0	1.2
D	60	0.002	0.83	5.3	10.38	0	0	0	1.78
E	100	0.67	8.01	4.01	0.3	0	0.18	0	0.77
F	60	10.39	16.11	4.85	0.07	0	0.003	0.007	1.56
H	100	0.25	0.59	0.72	0.002	0	0	0.06	3.06
J	100	0.058	0.06	2.0	0	9.38	11.41	0.03	0.016
K	120	2.2	0.0017	1.28	0	12.02	1.29	0.013	0
L	120	1.74	0	0.49	0	3.28	0	0.22	0
M	140	0.23	0	0.04	0	0.04	0	2.56	0

Analizando la información de la tabla se puede ver que para el “Centro Histórico” durante la temporada húmeda las fábricas *F*, *K* y *L* son de mayor aportación sobre la concentración de la contaminación aérea de la zona; las plantas denominadas *C*, *D*, *E*, *H*, *J*, *M* son de una aportación pobre, mientras *A* y *B* no influyen sobre el valor de $J(\phi)$. Durante la temporada seca las fuentes *F* y *E* son responsables de niveles de contaminación de la zona, las demás fábricas son de influencia mínima o nula. En el caso de *PC*, las de mayor aportación durante la temporada seca son las plantas industriales ubicadas en los puntos *D*, *F*, *E*, *J*, *C* y *K*, las demás fábricas son de aportación pobre, pero ninguna de éstas es de influencia nula. Sin embargo durante la temporada seca, cuatro de las fábricas ya no influyen sobre niveles de $J(\phi)$, y la mayor responsabilidad en la concentración de contaminación de “Parque Colomos” la tienen las plantas anotadas como *D*, *C*,

B y *A*. Para “Tlaquepaque” las fuentes de emisión de bióxido de azufre *B*, *C*, *D* y *H* son nulas para todo el año, el mismo efecto tienen las plantas *A*, *E*, *F*, *H* y *L*, *M* durante la temporada húmeda y seca respectivamente. De mayor potencia para *TLA* son las fábricas *K*, *J* y *L* en la presencia del viento dominante tipo I y las plantas *J*, *K* cuando domina el viento tipo II. Para la zona “Zoológico” la fábrica *M* juega el principal papel sobre los niveles de contaminación de bióxido de azufre durante la temporada húmeda, mientras en la presencia del viento tipo II de mayor aportación ya son cuatro plantas industriales *H*, *D*, *F* y *C*.

Sumando los productos de emisión de cada fábrica sobre su función de peso correspondiente se estimaron los niveles de contaminación para cada zona seleccionada (Tabla 7.2).

Tabla 7.2. La concentración media de contaminación $J(\phi)$, $\mu\text{g}/\text{m}^3$ de SO_2 estimada con el método adjunto para las zonas ecológicamente significativas.

Zona	$J(\phi)$, $\mu\text{g}/\text{m}^3$	
	V_I	V_{II}
<i>CH</i>	122.7	202.1
<i>PC</i>	160.1	135.8
<i>TLA</i>	278.0	131.4
<i>ZOO</i>	39.6	74.4

VII.6 Otras aplicaciones del método adjunto en la Zona Metropolitana de Guadalajara

Entre múltiples aplicaciones del método adjunto vistos anteriormente en este trabajo además se realizó el método de localización óptima de una nueva planta industrial desarrollado en el capítulo V, párrafo V. 4.1.

Para aplicar el método de localización óptima se seleccionaron tres zonas ecológicamente significativas “Parque Colomos”, “Centro Histórico” y “Zoológico” de Guadalajara y se aplicaron los siguientes parámetros:

- $Q(t) = 60 \text{ g/s}$ - la tasa de emisión para las once plantas industriales, que se consideró constante con respecto a tiempo
- $J_0 = 0.13 \text{ ppm}$ o $340 \mu\text{g/m}^3$ la norma sanitaria establecida por la Comisión Federal de Ecología, que comprende la calidad del aire buena o satisfactoria
- $Q_0 = 150 \text{ g/s}$ es la tasa de emisión máxima de una nueva planta que se programe construir en el territorio de la Zona Metropolitana de Guadalajara

Utilizando la solución del método adjunto se calcularon los valores de la concentración media de contaminante SO_2 para las tres zonas ecológicamente significativas: *PC*, *CH* y *ZOO* (Tabla 7.3):

Tabla 7.3. Valores de la función de influencia, $[\sum_{i=1}^N \int_0^T g_k(r_i, t) dt] * 10^{-4}$ calculados para *CH*,

PC y *ZOO*. Problema de localización óptima de nueva planta industrial.

	$\sum_{i=1}^N \int_0^T g_k(r_i, t) dt$ Centro Histórico	$\sum_{i=1}^N \int_0^T g_k(r_i, t) dt$ Parque Colomos	$\sum_{i=1}^N \int_0^T g_k(r_i, t) dt$ Zoológico
Viento tipo I	0.02275	0.02045	0.00329
Viento tipo II	0.02927	0.02200	0.00865

Multiplicando cada suma de funciones de influencia por $Q = 60 \text{ [g/s]}$ tenemos los siguientes resultados (Tabla 7.4):

Tabla 7.4. Estimación de la concentración media de bióxido de azufre en zonas CH, PC y ZOO. Problema de localización óptima de nueva planta industrial.

	$\bar{J}_k, \text{g/m}^3$ Centro Histórico	$\bar{J}_k, \text{g/m}^3$ Parque Colomos	$\bar{J}_k, \text{g/m}^3$ Zoológico
Viento tipo I	0.000137	0.000123	0.0000197
Viento tipo II	0.000178	0.000132	0.0000519

Cada uno de estos productos es la concentración media del contaminante \bar{J}_k por lo tanto, si la norma establecida (calidad del aire buena o satisfactoria) es de $J_0 = 340 \mu\text{g/m}^3$, es decir 0.000340g/m^3 entonces cada diferencia entre J_0 y \bar{J}_k es la siguiente (Tabla 7.5):

Tabla 7.5. Estimación de la diferencia entre la norma sanitaria de SO_2 y la concentración media de k -ésima zona, \bar{J}_k .

	$\hat{J}_k, \text{g/m}^3$ Centro Histórico	$\hat{J}_k, \text{g/m}^3$ Parque Colomos	$\hat{J}_k, \text{g/m}^3$ Zoológico
Viento tipo I	0.000203	0.000217	0.000320
Viento tipo II	0.000162	0.000201	0.000288

Entonces, considerando $Q_0 = 150 \text{g/s}$, F_k para cada zona y cada tipo de viento es la siguiente (Tabla 7.6):

Tabla 7.6. Valores de isolíneas "críticas", F_k que separan el dominio D_k .

	$F_k * 10^{-4}$ Centro Histórico	$F_k * 10^{-4}$ Parque Colomos	$F_k * 10^{-4}$ Zoológico
Viento tipo I	0.013	0.014	0.020
Viento tipo II	0.011	0.012	0.018

Estas isolíneas $F(x, y)$ separan el dominio D en el subdominio D_k en el cual se permite construir la nueva planta y su componente, \tilde{D} , en donde $F(x, y) > \hat{J}/Q_0$. Aquí el dominio complemento obtenido se muestra en la figura 7. 14 como las áreas sombreadas.

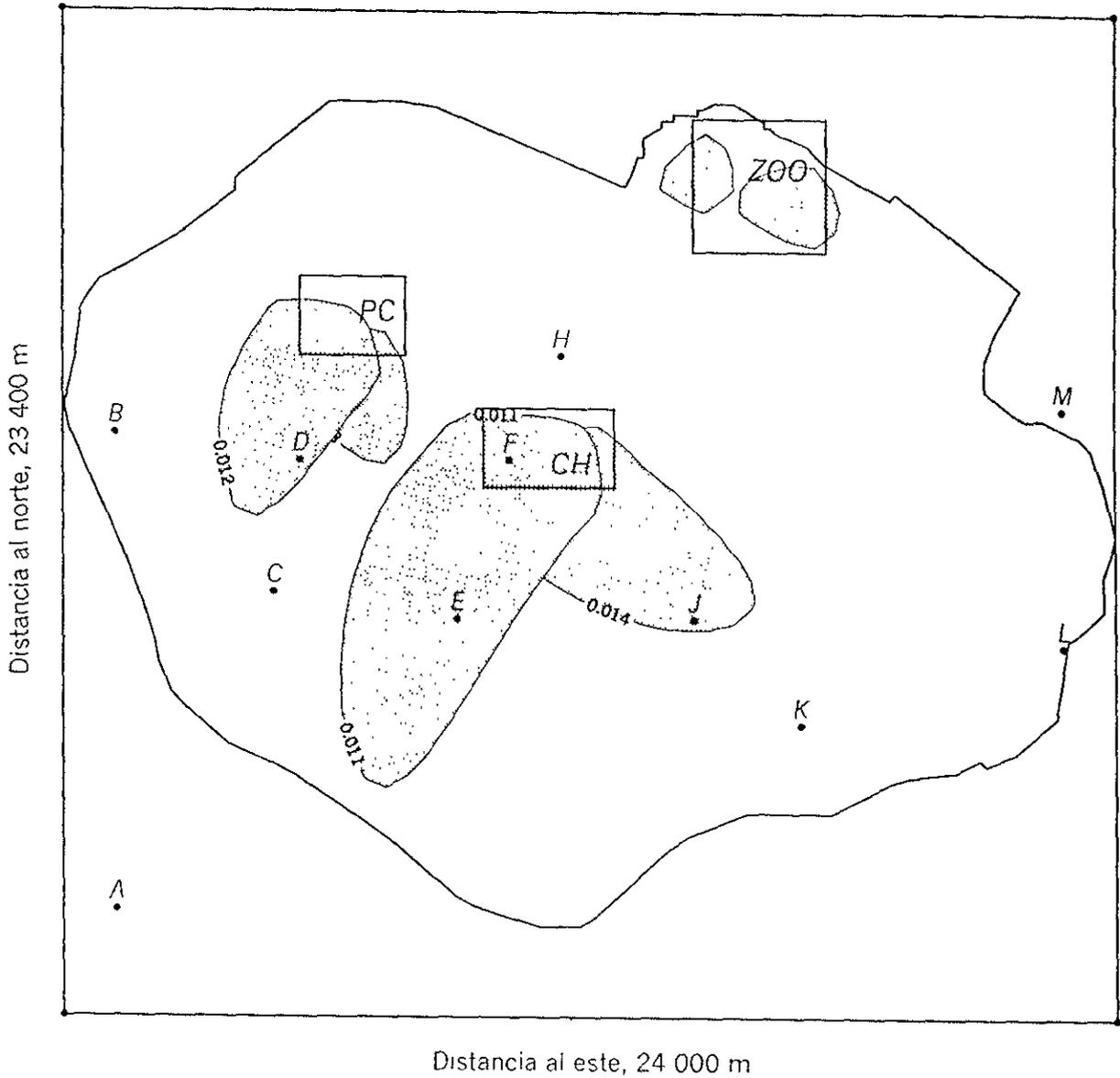


Fig. 7.14. La intersección de los subdominios \tilde{D} (zonas sombreadas), definidos por la (5.8), para viento tipo I y viento tipo II.

Es obvio, que al incrementar el número de zonas protegidas y tipos de vientos dominantes el área sombreada \tilde{D} llegará ocupar mayor espacio en el dominio D , mientras la intersección de los subdominios D_k y por lo tanto espacios para construcción de nuevas plantas industriales se reducirán.

VII.7 Soluciones del problema directo.

Con el fin de estimar los niveles de contaminación tanto en las zonas ecológicamente importantes como en toda la región de estudio se aplicó el modelo directo de transporte y difusión (4.1)-(4.5). Las isóneas de la solución $\phi(r,t)$ del problema para bióxido de azufre con once fuentes puntuales de emisión en el momento $t = 120 \text{ min}$ se presentan en las figuras 7.15 y 7.16 para el viento tipo I (temporada húmeda) y el viento tipo II (temporada seca) respectivamente. Se puede observar que durante cada temporada, las emisiones afectan de manera importante a las zonas PC , ZOO , CH y TLA , y es posible notar que en presencia de las fuentes elegidas, la zona PC , CH y TLA resultan más contaminadas que la ZOO . Además, la presencia de las fuentes estacionarias F y J emisoras de bióxido de azufre directamente en CH y TLA puede condicionar los niveles de contaminación en éstas zonas arriba de las normas de calidad del aire establecidas. La estimación de la concentración media realizada con el modelo adjunto en cada zona (ver párrafo VII.5) comprueba esta hipótesis, mostrando los niveles de contaminación de “Centro Histórico” y sobre todo de “Tlaquepaque” muy superiores a los de PC y ZOO .

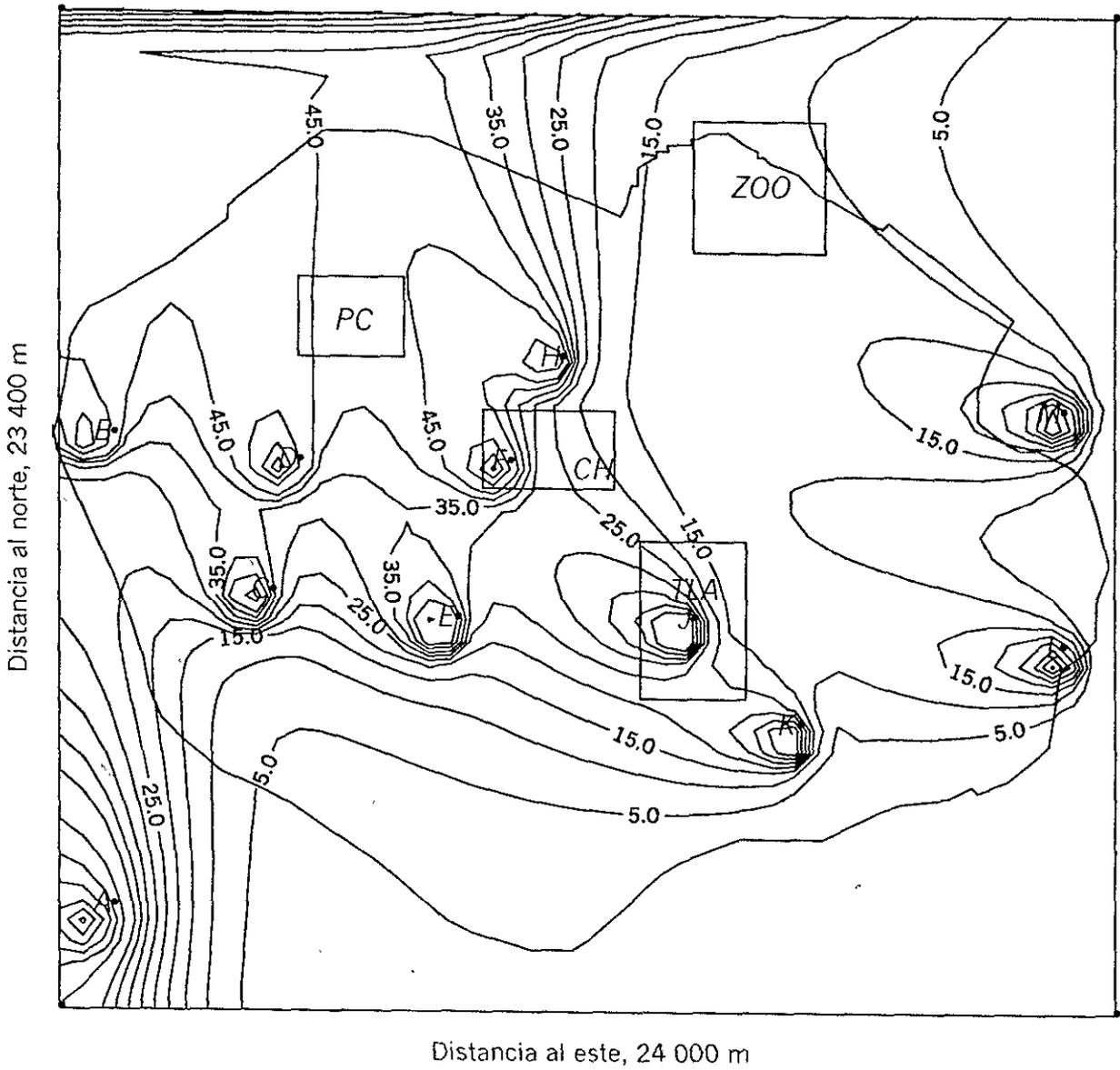


Fig.7.15. Isolíneas de la solución del problema directo de transporte y difusión para fuentes estacionarias, viento tipo I, $T = 120 \text{ min}$.

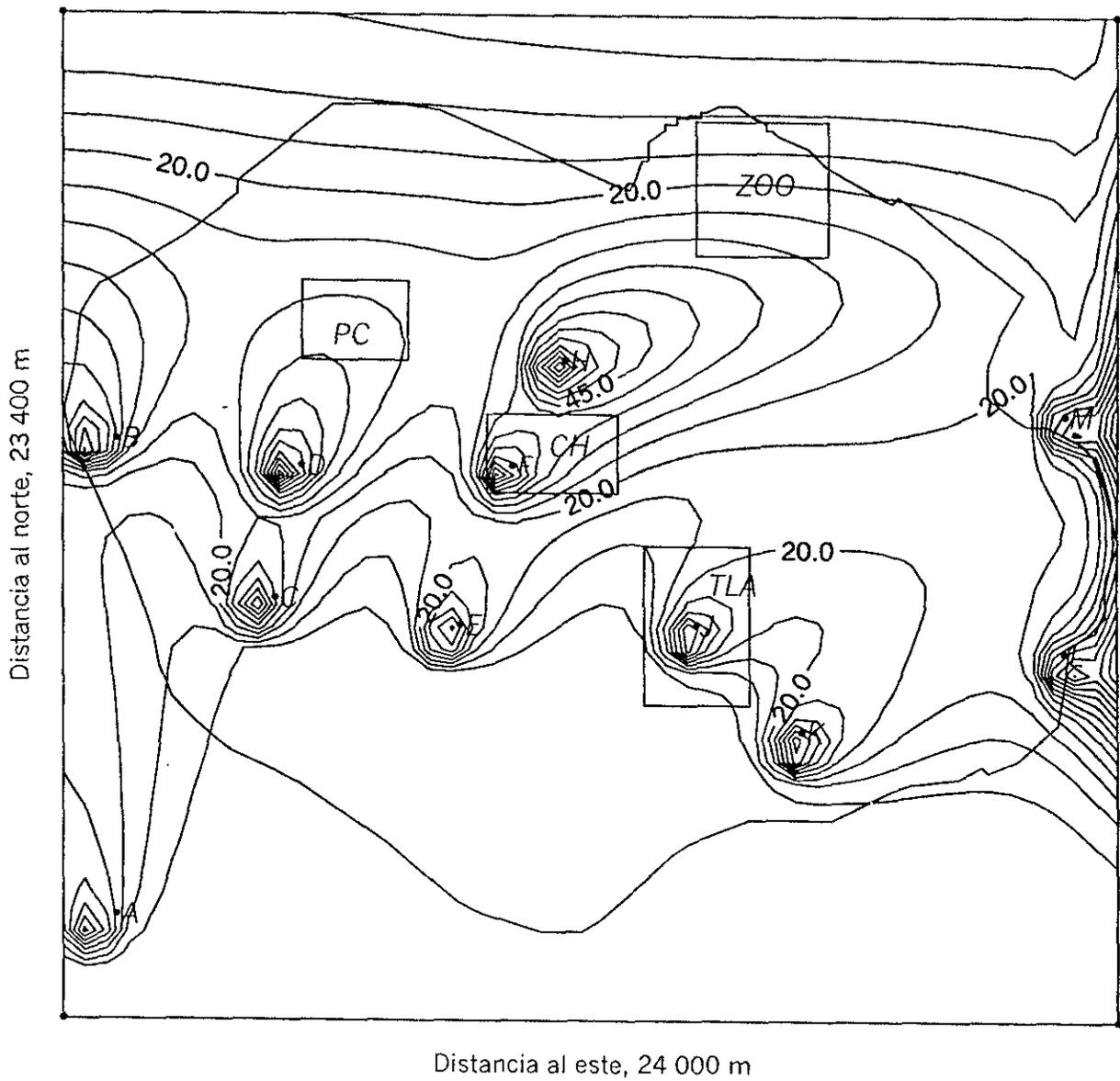


Fig. 7.16. Isolíneas de la solución del problema directo de transporte y difusión para fuentes estacionarias, viento tipo II, $T = 120 \text{ min}$.

Entre algunas de las perspectivas del modelo desarrollado se propone la estimación de los niveles de contaminación proveniente de las fuentes móviles o las emisiones vehiculares, vistos en el modelo como fuentes lineales. En la primera etapa de ésta dirección de trabajo entre todas las avenidas de la gran urbe se seleccionaron tres rutas que se consideran de mayor afectación al medio ambiente urbano dado su alta densidad vehicular y ubicación sobre el plano de la ciudad: Avenida Vallarta (*VI – VI5*), Avenida Lázaro Cárdenas (*LC1 – LC14*) y Calzada Independencia (*CII – CII5*). A continuación se muestra un ejemplo de estimación de los niveles de contaminación con el modelo de problema directo de transporte y difusión (4.1) – (4.5) para las fuentes lineales (transporte vehicular distribuido a lo largo de las avenidas seleccionadas) para viento tipo I y tipo II respectivamente ($\bar{u}_I = 3.5 \text{ m/s}$ y $\bar{u}_{II} = 2.0 \text{ m/s}$), $\mu_I \cong 600 \text{ m}^2/\text{s}$ y $\mu_{II} \cong 350 \text{ m}^2/\text{s}$, $\Delta x = \Delta y = 600 \text{ m}$ (Fig. 7.17 y 7.18). Los experimentos se realizaron para el contaminante monóxido de carbono, producto de combustión de gasolina o diesel, considerando la depuración del contaminante σ para temporada seca aproximadamente 3 % y 10 % para la temporada húmeda (Seinfeld and Pandis, 1998). Analizando las figuras se puede observar que durante la temporada húmeda (Fig. 7.17) en la presencia de las fuentes elegidas las zonas *PC* y *CII* resultan más contaminadas en comparación con las *ZOO* y *TLA*. Sin embargo, en la presencia de viento tipo II (temporada seca) las emisiones vehiculares afectan de manera significativa todas las zonas seleccionadas y, particularmente, la zona del “Centro Histórico” (Fig. 7.18). Por lo tanto, como una primera inferencia de los resultados obtenidos y tomando en cuenta las condiciones de alta estabilidad atmosférica característica para la temporada seca y bajos niveles de σ , se puede esperar la acumulación de contaminación que a su vez puede provocar los niveles críticos de la concentración de contaminante *CO* en las zonas elegidas.

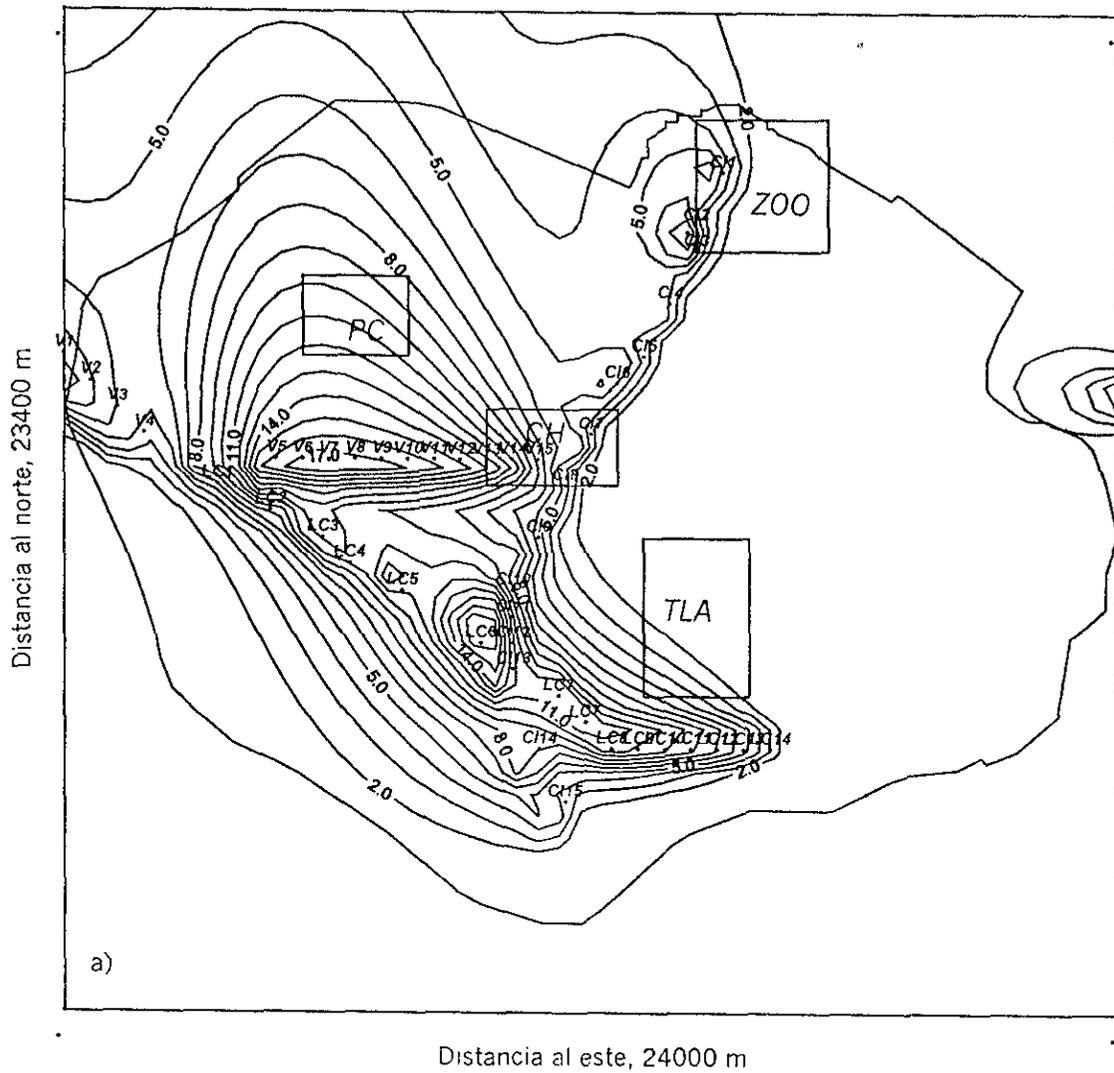


Fig. 7.17. Isolíneas de la solución del problema directo de transporte y difusión para fuentes lineales para CO: Avenida Vallarta (VI – V15), Lázaro Cárdenas (LC1 – LC14) y Calzada Independencia (CI1 – CI15), viento tipo I, $T = 120 \text{ min}$.

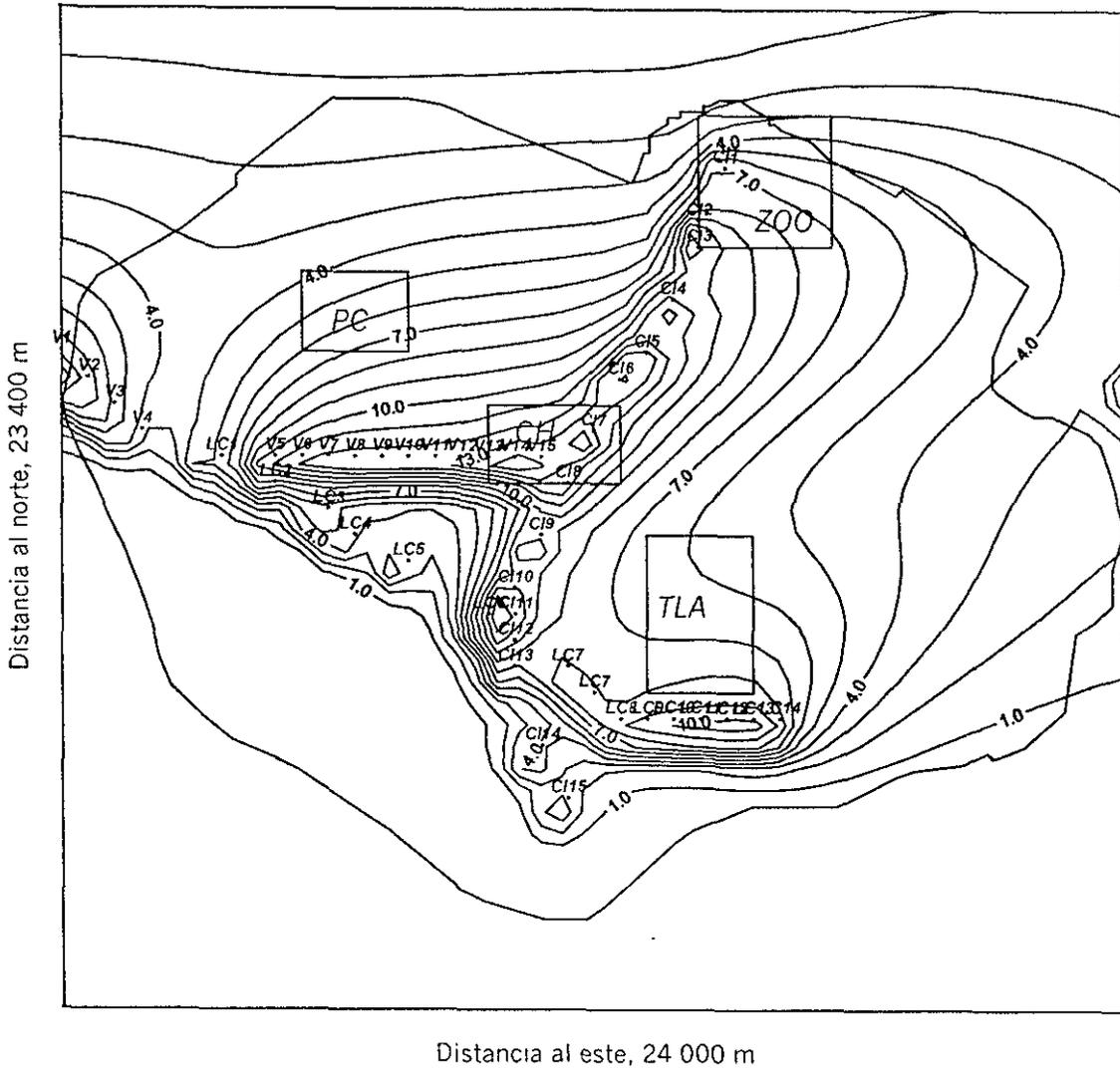


Fig. 7.18. Isolíneas de la solución del problema directo de transporte y difusión para fuentes lineales para CO : Avenida Vallarta ($V1 - V15$), Lázaro Cárdenas ($LC1 - LC14$) y Calzada Independencia ($CI1 - CI15$), viento tipo II, $T = 120 \text{ min}$.

CONCLUSIONES

El problema de transporte de contaminación y su adjunto se consideran en un área limitada de la atmósfera cuando existe flujo de contaminación a través de las fronteras horizontales abiertas. A diferencia de otros modelos, en mi modelo se usan las condiciones especiales en la frontera abierta y la ecuación adjunta. A causa de las condiciones especiales de frontera, ambos problemas principal y adjunto están bien formulados matemáticamente (según Hadamard), es decir que cada solución del problema directo o adjunto existe, es única y estable a errores en el forzamiento y condición inicial. Además, dichas condiciones están también bien formuladas desde el punto de vista de la física. En efecto, la condición en la frontera S^- (entrada) significa que no hay ningún flujo de contaminante del exterior del dominio, mientras que en la frontera S^+ (salida) la condición significa que el flujo turbulento es insignificativamente pequeño en comparación con el flujo advectivo y se ignora. Aun en el límite, cuando el coeficiente de la difusión turbulenta tiende al cero, ellas aproximan las condiciones correctas para una atmósfera ideal, es decir, se pone la condición en S^- , y no - en S^+ , pues en la salida el contaminante se determina en este caso por el método de líneas características. La formulación del modelo de este manera nos permite evitar problemas con los datos en la frontera, los cuales son normalmente desconocidos, debido a falta de estaciones meteorológicos y ecológicas en el área.

Otra ventaja del modelo es que contiene no solo el modelo directo, sino también el modelo adjunto. El uso de ambos enriquece el modelo, aumenta su capacidad de estudio y permite analizar la sensibilidad de las soluciones del modelo con respecto a variaciones en el número de fuentes de contaminación, en sus posiciones, en las tasas de emisión de cada fuente, en los parámetros externos del modelo (coeficientes σ , μ , viento, etc.) y en la distribución inicial del contaminante en toda el

área. El método adjunto aplicado en este trabajo permite resolver varios problemas importantes de la estimación, regulación y control sobre contaminantes en el área, por ejemplo, la búsqueda de una posición óptima para una fábrica nueva, la detección de las fábricas que violan normas preestablecidas de las tasas de emisión, el control (determinación) de las tasas de emisión de cada fábrica con el fin de bajar el nivel de contaminante en las zonas hasta una norma sanitaria.

Se derivan los estimadores directo y adjunto equivalentes a la concentración media de contaminante aéreo en una zona ecológicamente sensible. El estimador directo (5.2) se basa en la utilización de la solución del problema de transporte de contaminantes atmosféricos. El estimador adjunto (5.4) al contrario de (5.2) no requiere resolver el problema de transporte de contaminante, y explícitamente relaciona la concentración promedio del contaminante atmosférico en la zona con las tasas de emisión de las fuentes de contaminación localizadas en el dominio D (por ejemplo fábricas). Las soluciones del problema adjunto sirven como las funciones de influencia de cada fábrica, y permiten determinar la contribución de cada una de las fábricas en el nivel promedio de contaminante en una zona ecológicamente sensitiva, en donde se realiza el monitoreo. Esta doble estimación satisfactoriamente complementa el monitoreo de la calidad del aire. En general, la estimación directa (5.2) es preferible cuando se requiere la información detallada sobre todo el dominio D o una gran parte del mismo. El problema adjunto es conveniente y económico cuando se realiza el análisis de la concentración de contaminante (la calidad de aire) en una, o varias zonas ecológicamente sensibles. A menudo el análisis limitado es preferible, pues es más económico y bastante informativo para conocer la situación ecológica en toda el área. En la tesis se consideran algunos ejemplos para explicar como decidir entre éstas dos estimaciones en diferentes situaciones.

Se dan esquemas numéricos absolutamente estables y balanceados de segundo orden de aproximación en diferencias finitas basados en el método de separación para resolver el problema de transporte y su adjunto. Estas propiedades de los esquemas significan que en el caso específico, cuando no hay fuentes de contaminación ni sumidores ($\sigma = 0$, $\mu = 0$, la componente normal de velocidad en la frontera = 0), cada uno de los esquemas tiene dos leyes de conservación (se deducen estas leyes de (4.6) y (4.12)). La ecuación unidimensional discreta obtenida para cada paso del tiempo fraccional del algoritmo numérico se resuelve exactamente (sin iteraciones) por el método de factorización *LU*.

El método de estimación del impacto de emisiones industriales se planteó y se aplicó para la Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG). Este método se basa en soluciones del modelo de transporte y difusión de contaminantes y su adjunto, realizados para la ZMG. En los experimentos numéricos descritos en este trabajo se consideraron dos tipos de viento climatológico (temporada húmeda y seca). Para cada tipo de viento se calcularon y se aplicaron los coeficientes de difusión turbulenta, μ . Además fueron estimados los parámetros de degradación de la concentración de la contaminación por procesos de depositación seca y por precipitación que se usan en los experimentos numéricos. Las estimaciones directa y adjunta de la concentración media de la contaminación atmosférica se calcularon para cuatro de las zonas protegidas más importantes del territorio urbano de Guadalajara: Parque "Los Colomos", Centro Histórico, Tlaquepaque y Zoológico. En estas estimaciones se consideraron tanto fuentes puntuales (emisoras de bióxido de azufre) como fuentes lineales (emisoras de monóxido de carbono). Los experimentos fueron realizados con el fin de probar los esquemas numéricos y

programas computacionales; estudiar el papel de la solución adjunta en determinar la contribución de cada fuente sobre el nivel de contaminación en las zonas ecológicamente sensitivas elegidas; mostrar el papel del viento y la posición mutua de las emisoras de contaminación y de las zonas. Como una de las aplicaciones de la solución del problema adjunto, se considera el problema de localización óptima de una nueva planta industrial en el área de la ZMG.

Para la realización de los experimentos numéricos se desarrollaron dos programas computacionales en FORTRAN para el modelo numérico directo y su adjunto (Anexo).

Fue abordado de manera integral el problema de contaminación del aire en Guadalajara, su relación con el medio físico y con el desarrollo industrial. Entre los resultados más importantes de esta sección de trabajo se pueden mencionar los siguientes:

- Se creó un archivo climatológico de la Zona Metropolitana de Guadalajara, que incluye registros y mapas por temperatura y precipitación del período 1881 – 1999; presión atmosférica, humedad relativa, dirección y velocidad del viento del período de 1960 a 1999 .
- Se estimaron las frecuencias, probabilidades y espesores de los cinco tipos de inversiones térmicas en Guadalajara para el período de 1988 a 1993.
- Se organizó la base de datos de cinco contaminantes atmosféricos (ozono, monóxido de carbono, fracción respirable por partículas suspendidas, bióxido de azufre y bióxido de nitrógeno) de la ZMG en forma numérica y en mapas para el período de 1994 a 1999.

- Se estimó la eficiencia de la distribución espacial de la Red Automática de Monitoreo Ambiental (RAMA), perteneciente a la Comisión Estatal de Ecología de Jalisco.
- Se lograron avances muy importantes en el estudio de clima y monitoreo de la calidad del aire en Guadalajara. Entre ellos se puede resaltar la ubicación y dinámica de la “isla de calor” de Guadalajara; determinación de una tendencia creciente en la temperatura y precipitación la cual es un indicio muy importante de cambio del clima local de la región; determinación de los contaminantes que violan los estándares de exposición aguda y crónica etc.

La principal aportación del trabajo fue el desarrollo de un modelo bidimensional simple de transporte de contaminación y su adjunto con el cual se puede iniciar ciertas acciones para la gestión ambiental en la ciudad de Guadalajara, Jalisco. El modelo está en perspectiva de su desarrollo a un modelo tridimensional que incluirá la parte dinámica (estimación y uso del viento real) con el fin de obtener un instrumento de gestión ambiental en la ZMG que permitirá la toma de decisiones y sentará bases para la normatividad ambiental en la región de interés.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Alvarado Castellanos T., y Reyes Nodhal R. E.** (1986). *Costos de la contaminación atmosférica en la zona industrial de Guadalajara*. Cuadernos de difusión científica, Universidad de Guadalajara.
- Atlas de Riesgos Ambientales en la Zona Metropolitana de Guadalajara*, (1994). Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México, 88 p.
- Berlyand M.E.** (1975). *Modern problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere*. Gidrometeoizdat, Leningrad, 448 p.
- Berlyand M.E.** (1991). *Prediction and Regulation of Air Pollution*. Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 312 p.
- Boubel, Richard W., Fox Donald L., Bruce Turner D., and Stern Arthur C.** (1994). *Fundamentals of Air Pollution*. Academic Press. San Diego–N.Y.–Boston–London–Sydney – Tokyo – Toronto, 574 p.
- Bowling, S.A.** (1985). *Modification necessary to use standard dispersion models at high latitudes*. Atmospheric Environment, **19** (1), 93-98.
- Bravo Álvarez H.** (1987). *La Contaminación del Aire en México*. Fundación Universo, México, 297 p.
- Brimblecombe P.** (1986). *Air composition & chemistry*. Cambridge University Press, 350 p.
- Byzova, N.L.** (1974). *Dispersion of pollutants in the boundary layer of the atmosphere*. Moscow, Gidrometeoizdat, 190 p.

- Byzova, N.L. and Veltishcheva V.V.** (1987). Temperature and wind speed profiles in the boundary layer. *Trudy IEM*, **41** (126), 105-113.
- Chamberlain, A.C.** (1953) Aspects of travel and deposition of aerosols and vapor clouds, AERE Harwell, Report R1261 HMSO, London.
- Chanady, G.** (1973). *Turbulent diffusion in the environment*. D. Reidel Publ. Co. 205 p.
- Crank J. y Nicholson P.** (1947). *A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type*. Proc. Cambridge Philos. Soc., **43**, 50-67.
- Davenport A.G.** (1963). *The relationship of wind structure to wind loading*. Proceedings of the 1st conference on "Wind effects on building and structures". Teddington.
- Davydova V.** (1993). *Análisis de las inversiones térmicas en Guadalajara*. Horizonte, 337, 8-12.
- Davydova-Belitskaya V. and Skiba Yu.N.** (1999). *Climate of Guadalajara city (Mexico); its variation and change within latest 120 years*. World Resource Review, **11** (2), 258-270.
- Davydova-Belitskaya V., Skiba Yu.N., Bulgakov S.N. y Martínez A.Z.** (1999). *Modelación matemática de los niveles de contaminación en la Cd. de Guadalajara, Jalisco, México. Parte I. Microclima y monitoreo de la contaminación*. Revista Internacional de Contaminación Ambiental, **15** (2), 103-111.
- Davydova-Belitskaya V., Skiba Yu.N., Martínez Z. A. y S.N. Bulgakov S.N.** (2001). *Modelación Matemática de los Niveles de Contaminación en la Ciudad de Guadalajara, Jalisco, México. Parte II. Modelo numérico de transporte de contaminantes y su adjunto*. Aceptado en la Revista Internacional de Contaminación Ambiental, **17** (2).
- Díaz Galindo S.** (1934). *Sesenta años de observación pluviométrica en la ciudad de Guadalajara*. Talleres Gráficos de la U. de G.

- Díaz Galindo S.** (1946). *Geografía General y Física del Estado de Jalisco*. Talleres Gráficos de la U. de G.
- Ezekiel M.** (1941). *Methods of correlation analysis*. John Wiley and Sons, London, 241 p.
- García E.** (1988). *Modificaciones al sistema de clasificación climática de Köppen*. Talleres Gráficos, México D.F., 76 p.
- García M. E.** (1997). *Curso de contaminación en las grandes ciudades*. Conferencia magistral, U. de G. - Ecología Estatal.
- Gavrilov V.P. and Gormatyuk Yu. K.** (1989). *Pollutant dispersion from stationary sources in the surface layer of the atmosphere*. Sov. Meteorol. Hydrology 2, 28.
- Godev, N. and Kanchov, J.** (1972). *Meteorological and nonmeteorological factors influencing for regimen in Sofia*. Hidrologiya i Meteorologiya, 23-30.
- Godunov, S.K.**, (1971). *Equations of Mathematical Physics*, Nauka, Moscow, (in Russian).
- Godunov, S.K. and Riabeñkii, V.S.**, (1973) *Raznostnye skhemy*. Nauka, Moscow, (in Russian), 400 p.
- Golub, G.H. and J.M. Ortega**, (1992). *Scientific Computing and Differential Equations: An Introduction to Numerical Methods*, Academic Press, Boston, 337 p.
- González R.** (1995). *Proyecto piloto para la creación de una normatividad ambiental metropolitana*. Ecología Estatal de Jalisco. Gobierno del Estado. Jalisco.
- Hadamard J.** (1923). *Lectures on Cauchy's problems in linear partial differential equations*. Dover, 316 p.
- Hicks, B.B., Meyers, T.P., and Baldocchi D.D.** (1998). *Aerometric Measurement Requirements for Quantifying Dry Deposition*. En: *Principles of Environmental Sampling*. (Lawrence H. Keith, Ed.) ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, pp.297 – 315

- Hadamard J.** (1923). *Lectures on Cauchy's problems in linear partial differential equations*. Dover.
- Hidy, George M.** (1994). *Atmospheric sulfur and nitrogen oxides*. Academic Press. San Diego – N.Y. – Boston – London – Sydney – Tokyo – Toronto, 447 p.
- Hino, M.** (1986). *Maximum ground-level concentration and sampling time*. *Atmospheric Environment*, **2**, 149-166.
- Jáuregui, E.** (1988). *Local wind and air pollution interaction in the Mexico Basin*. *Atmósfera*, **1**, 131 - 140.
- Jáuregui, E., Godínez, L., and Cruz, F.** (1992). *Aspects of Heat - Island Development in Guadalajara, Mexico*. *Atmospheric Environment*, **26B**, (3), 391 - 396.
- Jáuregui, E. y Romales, E.** (1996). *Urban Effects on Convective Precipitation in Mexico City*. *Atmospheric Environment*, **30** (20), 3338 - 3389.
- Jáuregui, E.** (1997a). *Climates of Tropical and Subtropical Cities*. *Climates and Societies - A Climatological Perspectiv*, 361 - 373.
- Jáuregui, E.** (1997b). *Heat Island Development in Mexico City*. *Atmospheric Environment*, **31** (22), 3821 - 3831.
- Kincaid, D. y W. Cheney,** 1994. *Análisis Numérico. Las Matemáticas del Cálculo Científico*. Addison - Wesley Iberoamericana, 406 p.
- Liu M., and Carroll J.J.** (1996). *A high-resolution air pollution model suitable for dispersion studies in complex terrain*. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 2396.
- Lumley, J.L. and Panofsky, H.A.** (1964). *The structure of atmospheric turbulence*. Wiley, New York, 239 p.
- Lyusternik L., and Sobolev V.** (1964). *Elements of functional analysis*. Ungar, New York.

- MacMahon, T.A., and Denison, P.J.** (1979). *Atmospheric Environment*, **13**, 571-585.
- Manahan, Stanley E.** (1991). *Environmental Chemistry*. Lewis Publisher, Chelsea, USA, 583 p.
- Marchuk, G.I.** (1975). *Methods of Numerical Mathematics*, Springer-Verlag, New York, 535 p.
- Marchuk, G.I.** (1982). *Mathematical issue of industrial effluent optimization*. *J. Meteor. Soc. Japan* **60**, 481- 485.
- Marchuk, G.I.** (1986). *Mathematical models in environmental problems*. Elsevier, New York, 217 p.
- Marchuk, G.I.** (1995). *Adjoint equations and analysis of complex systems*. Kluwer, Dordrecht, 468 p.
- Marchuk, G.I., Penenko V.V., Aloyan A.E., and Lazriev G.L.** (1979). *Numerical simulation of the urban microclimate*. *Sov. Meteorol. Hydrology* **8**, 5 –15.
- Marchuk, G.I., and Skiba Y.N.** (1976). *Numerical calculation of the conjugate problem for a model of the thermal interaction of the atmosphere with the oceans and continents*. *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics* **12** (4), 279-284.
- Marchuk, G.I., Skiba Y.N., and Protsenko I.G.** (1985a). *Method of Calculating the Evolution of Random Hydrodynamic Fields on the Basis of Adjoint Equations*. *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*, **21** (2), 87-92.
- Marchuk, G.I., Skiba Y.N. and Protsenko I.G.** (1985b). *Application of Adjoint Equations to Problems of Estimating the State of Random Hydrodynamic Fields*. *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*, **21** (3), 175-180.
- Marchuk, G.I. and Skiba Y.N.** (1990). *Role of Adjoint Functions in Studying the Sensitivity of a Model of the Thermal Interaction of the Atmosphere and Ocean to Variations in Input Data*. *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*, **26** (5), 335-342.

- Marchuk, G.I. and Skiba Y.N.** (1992): *Role of the Adjoint Equation Solution in Estimating the Mean Temperature Anomalies*. *Atmósfera*, **5** (3), 119-133.
- Matveyev, L.T.** (1984). *Fundamentals of General Meteorology. Physics of the atmosphere*. Leningrad. Gidrometeoizdat, 751 p.
- McBeam, G.A.** (1979). *The planetary boundary layer*. WMO Tech. Note, **165**, 202 p.
- Mestayer, Patrice G. and Sandrine Anquetin** (1995). *Climatology of Cities*. In: *Diffusion and Transport of Pollutants in Atmospheric Mesoscale Flow Fields* (Gyr Albert and Franz_S. Rys Ed.) Kluwer Academic Publishers, Dordrecht / Boston / London, **1**, 165 – 190.
- Mikkelsen, Torben** (1995). *Modeling Diffusion and Dispersion of Pollutants*. In: *Diffusion and Transport of Pollutants in Atmospheric Mesoscale Flow Fields* (Gyr Albert and Franz_S. Rys Ed.) Kluwer Academic Publishers, Dordrecht / Boston / London, **1**, 145 – 164.
- Monin, A.S. and Obukhov, A.M.** (1954). *Main characteristics of turbulent mixing in the surface air layer*. *Trudy Geophys. Inst. Asc. URSS*, **24** (151), 163-187.
- Monin, A.S. and Yaglom, A.M.** (1965). *Statistical hydrodynamics*. Moscow, Nauka, **1**, 633 p.
- Nieuwstadt, F.T.M., and Van Dop, H. (ed.)** (1982). *Atmospheric turbulence and air pollution modeling*. D. Reidel PC. Dordrecht, 358 p.
- Oke, T.R., Zeuner, G and Jáuregui, E.** (1992). *The Surface Energy Balance in Mexico City*. *Atmospheric Environment*, **26B** (4), 433 - 444.
- Panofsky, H.A. and Dutton, J.A.** (1984). *Atmospheric turbulence*. J. Wiley and Sons, 380 p.
- Parra-Guevara, D. and Yu.N. Skiba** (2000). *Transport of Industrial Pollutions. Part II: Control of Industrial Emissions*. *Environment Modeling and Assessment*, **5**, 177-184.
- Pasquill, F.** (1974). *Atmospheric diffusion*. 2ed ed., J. Wiley, New York, 429 p.

- Penenko V.V. and Raputa V.F.** (1982). *Experiment planning in inverse problems of pollutant transport*. Sov. Meteorol. Hydrology 8, 28-35.
- Penenko V.V. and Raputa V.F.** (1983). *Some models for optimizing the operation of the atmospheric – pollution sources*. Sov. Meteorol. Hydrology 2, 46-54.
- Plan Lerma. Asistencia Técnica*, Boletín Meteorológico #1, 151, Secretaría de Agricultura y Recursos Hidráulicas, Guadalajara, México, (1966).
- Pišútová, Z.**, (1991). *Analytical model of air pollution due to motor car traffic*, Contributions of the Geophysical Institute of the Slovak Academy of Sciences, **11**, 99.
- Renderson, D. (ed.)** (1984). *Atmospheric science and power production*. Tech. Inf. Cent. US Dep. Of Energy, 850 p.
- Reynolds, O.** (1883). *III. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous and of the law of resistance in parallel channels*. Phil. Trans. Roy. Soc., **174** (935).
- Reynolds, O.** (1894). *On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion*. Phil. Trans. Roy. Soc., London, **A 186** (123).
- Seinfeld J. H.** (1986). *Atmospheric chemistry and Physics of Air Pollution*. Willey Interscience Publication, J.Wiley & Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore, 738 p.
- Seinfeld J. H. and Pandis, S.N.** (1998). *Atmospheric Chemistry and Physics. From Air Pollution to Climate Change*. Willey Interscience Publication, John Wiley & Sons, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Toronto, Singapore, 1326 p.

- Serón Arbeola F.J., Pérez Caseiras C., Nogué Lahuerta L.J. and Latorre Andrés P.M.** (1993). *Air quality monitoring : Optimization of a network around a hypothetical potash plant in open countryside*. Atmospheric Environmental, Vol. 27A, 5, 729 - 738.
- Shir C.C. and Shich L.J.** (1974). *A generalized urban air pollution model and its application to the study of SO₂ distributions in the St. Louis Metropolitan Area*. J. Applied Meteorology, 13, 185-204.
- Skiba Yu. N.**, (1993). *Balanced and absolutely stable implicit schemes for the main and adjoint pollutant transport equations in limited area*. Rev. Inter. Contam. Ambiental, 9, 39-51.
- Skiba, Yu. N.**, (1996a). *Dual oil concentration estimates in ecologically sensitive zones*, Environmental Monitoring and Assessment, 43 (2), 139-151.
- Skiba, Yu. N.**, (1996b). *The derivation and applications of the adjoint solutions of a simple thermodynamic limited area model of the atmosphere-ocean-soil system*, World Resource Reviews, 8 (1): 98-113.
- Skiba Yu. N.** (1997). *Air pollution estimates*. World Resource Review, 9(4), 542 - 556.
- Skiba, Yu.N.** (1999). *Direct and Adjoint Oil Spill Estimates*. Environmental Monitoring and Assessment 59 (1), 95-109.
- Skiba Yu. N.** (2001). *Introducción a Los Métodos Numéricos*. Editorial UNAM, México.
- Skiba Yu.N. and J. Adem.** (1995). *A Balanced and Absolutely Stable Numerical Thermodynamic Model for Closed and Open Oceanic Basins*. Geofísica Internacional, 34, 385-393.
- Skiba Yu.N., Adem J. and Morales-Acoltzi T.** (1996). *Numerical algorithm for the adjoint sensitivity study of the Adem ocean thermodynamic model*. Atmósfera 9 (3), 147-170.

- Skiba, Yu.N. and Parra-Guevara D.** (1999). *Mathematics of Oil Spills: Existence, Uniqueness, and Stability of Solutions*, Geofísica Internacional (MEXICO), **38** (2), 117-124.
- Skiba Yu.N. and Parra-Guevara D.** (2000). *Industrial pollution transport. Part I: Formulation of the problem and air pollution estimates*. Environment Modeling and Assessment, **5**, 169-175.
- Stern, A. A.** (1985). *Fundamentals of air pollution*. Academic Press, 450 p.
- Stockwell, W.R., and Calvert, J.G.** (1983). *The mechanism of HO – SO₂ reaction*, Atmospheric Environment, **17**, 2231 – 2235.
- Turner, D.B.** (1979). *Atmospheric dispersion modeling. A critical review*. J. Air Poll. Cont. Assoc., **29**, 502-519.
- Turner, D.B.** (1994). *Workbook of atmospheric dispersion estimates: an introduction to dispersion modeling*. Lewis Publishers, Boca Raton, Ann Arbor, London, Tokyo, 179 p.
- Van Dop, Han** (1995). *Some topics in turbulent diffusion*. En: *Diffusion and Transport of Pollutants in Atmospheric Mesoscale Flow Fields* (Gyr Albert and Franz_S. Rys Ed.) Kluwer Academic Publishers, Dordrecht / Boston / London, **1**, 129 – 144.
- Wallace, J.M. and Hobbs, P.V.** (1977). *Atmospheric Science. An introductory survey*. Academic Press, San Diego / NY / Boston / London / Sydney / Tokyo / Toronto, 467 p.
- Wark, K, y Warner, C.F.** (1996). *Contaminación del aire. Origen y control*. Limusa, Noriega Editores, 650 p.
- Weber, J.J. (ed.)** (1982). *Air pollution, Assessment, methodology and modeling*. Plenum Press, **4**, London, 330 p.

Williamson D.L. (1992). *Review of numerical approaches for modeling global transport*. In: *Air Pollution Modelling and Its Application IX* (H. van Drop and G. Kallos, Eds.), Plenum Press, New York, **17**, 377-394.

Zúñiga M. L. (1993). *Análisis estadístico multivariable aplicado al problema de contaminación en Guadalajara*. Tesis profesional para obtener el grado de Licenciada en Matemáticas, Facultad de Ciencias, Universidad de Guadalajara.

C PROGRAMA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN (X, Y) ESPACIO
C PROBLEMA ADJUNTO

C*****

```

INTEGER E,E1,E2,I,J,K,L,N,T
INTEGER TIME,FORCE
REAL NORMA,BALANCE,MU,SIGMA,COEF,H,TAU
REAL*8 PI,V
REAL*8 U0,V0,PSI(41,39)
COMMON /ADJ1/ A(40),AL(40),B(40),BE(40),C(40),F(40)
COMMON /ADJ2/ TT(40),V(41),N0,L0,H,MU,SIGMA,TAU
COMMON /ADJ3/ Q0(40,38),U0(41,38),V0(40,39)

```

C***** Input Information *****

```

OPEN(1,FILE='RESULT.DAT',STATUS='NEW')
WRITE(*,*) 'Ingresar los parámetros de TAU y H'
READ(*,*) TAU,H
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) 'Ingresar los parámetros FORCE y TIME'
READ(*,*) FORCE,TIME
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) 'Ingresar el coeficiente de difusión MU'
READ(*,*) MU
WRITE(*,*)
    PI=3.141592653
    SIGMA=0.
    T=0
    N0=40
    L0=38

```

C*** Input PSI(I,J),U0(I,J),VO(I,J) and Q0(I,J) *****

```

DO 110 J=1,L0+1
    DO 110 I=1,N0+1
110  PSI(I,J)=0.
    DO 111 J=2,L0
        DO 111 I=2,N0
C 111  PSI(I,J)=5000.0D0*SQRT((I*1.0)**2+(J*1.0)**2)
111  PSI(I,J)=30000.0D0*DSIN((I-1)*PI/N0)*DSIN((J-1)*PI/L0)
C  WRITE(1,*) 'Campo de función de corriente, PSI'
C  WRITE(1,121) PSI
121  FORMAT(41F7.1)
    DO 112 J=1,L0
        DO 112 I=1,N0+1
112  U0(I,J)=-((PSI(I,J+1))-PSI(I,J))/H
C 112  U0(I,J)=2.220000000
C 112  U0(I,J)=0.0d0
C  WRITE(1,*) 'Campo del viento, componente U0(I,J)'
C  WRITE(1,122) U0

```

```

122 FORMAT(41F10.7)
  DO 113 J=1,L0+1
    DO 113 I=1,N0
113  V0(I,J)=(PSI(I+1,J)-PSI(I,J))/H
C 113  V0(I,J)=0.920000000
C 113  V0(I,J)=0.0d0
  DO 311 J=1,38
    U0(I,J)=0.0D0
311  U0(41,J)=0.0D0
  DO 312 I=1,40
    V0(I,1)=0.0D0
312  V0(I,39)=0.0D0
C  WRITE(1,*) 'Campo del viento, componente V0(I,J)'
C  WRITE(1,123) V0
123 FORMAT(40F10.7)
  DO 114 J=1,L0
    DO 114 I=1,N0
114  Q0(I,J)=0.
C*****
1000 IF (T.GE.TIME) GO TO 9000
  T=T+1
C *****
C * 1-RST AND 2-ND STEPS:(Y,X)-SPLITTING UP METHOD IN OCEAN *
C *****
  CALL DIRECY
  CALL DIRECX
C*****
C  Introducción de Forcing: FORCE *
C*****
  IF (T.GT.FORCE) GO TO 201
  JI=31
  JF=34
  II=25
  IF=29
  DO 115 J=JI,JF
    DO 115 I=II,IF
115  Q0(I,J)=Q0(I,J)+0.5/(FORCE*TAU)
C *****
C * 4-TH AND 5-TH STEPS:(X,Y)-SPLITTING UP METHOD
C *****
201 CONTINUE
  CALL DIRECX
  CALL DIRECY
  BALANCE=0.
  NORMA=0.

```

```

DO 116 J=1,L0
  DO 116 I=1,N0
    BALANCE=BALANCE+Q0(I,J)
116  NORMA=NORMA+Q0(I,J)**2
C   WRITE(1,*) 'T=',T,' BALANCE=',BALANCE,' NORMA=',NORMA

C   WRITE(1,126) Q0

      WRITE(1,127) Q0(1,27),Q0(9,9),Q0(9,15),Q0(13,16),Q0(15,15)
C 126  FORMAT(40F10.8)
127  FORMAT(5F10.8)
      IF (T.LT.TIME) GO TO 1000
9000  CONTINUE
C   WRITE(1,*) 'Q0(1,27) Q0(2,4) Q0(15,15) Q0(9,21) Q0(34,12)'
      WRITE(1,*) 'Campo de Q0(I,J)nuevo.'
      WRITE(1,128) Q0
128  FORMAT(40F10.8)
      CLOSE(1,STATUS='KEEP')
      STOP
      END
C*****
SUBROUTINE PROG(E1,E2)
INTEGER E1,E2
REAL MU,SIGMA,H,TAU
REAL*8 V
COMMON /ADJ1/ A(40),AL(40),B(40),BE(40),C(40),F(40)
COMMON /ADJ2/ TT(40),V(41),N0,L0,H,MU,SIGMA,TAU
I=E1+1
X=1./(B(E1)-A(E1))
AL(I)=C(E1)*X
BE(I)=F(E1)*X
K=E2-1
DO 1 N=I,K
  J=N+1
  X=1./(B(N)-A(N)*AL(N))
  BE(J)=(F(N)+A(N)*BE(N))*X
1  AL(J)=C(N)*X
  TT(E2)=(A(E2)*BE(E2)+F(E2))/(B(E2)-C(E2)-A(E2)*AL(E2))
DO 3 M=I,E2
  N=E2+I-M
  J=N-1
3  TT(J)=AL(N)*TT(N)+BE(N)
RETURN
END
C*****

```

```

SUBROUTINE DIRECY
COMMON /ADJ1/ A(40),AL(40),B(40),BE(40),C(40),F(40)
COMMON /ADJ2/ TT(40),V(41),N0,L0,H,MU,SIGMA,TAU
COMMON /ADJ3/ Q0(40,38),U0(41,38),V0(40,39)
REAL*8 U0,V0,V
INTEGER E,E1,E2
REAL SIGMA,COEF,MU,TAU
I=0
1 I=I+1
E1=1
E2=L0
DO 3 N=E1,E2+1
    V(N)=V0(I,N)
    IF (N.LE.E2) TT(N)=Q0(I,N)
3 CONTINUE
NE2=E2+1
IF (V(E1).GT.0.) TTNE1=TT(E1)
    FE1=V(E1)*H
    FE2=V(NE2)*H
IF (V(E1).LE.0.) TTNE1=((2*MU+FE1)*TT(E1))/(2*MU-FE1)
IF (V(NE2).LT.0.) TT(NE2)=TT(E2)
IF (V(NE2).GE.0.) TT(NE2)=((2*MU-FE2)*TT(E2))/(2*MU+FE2)
DO 4 N=E1,E2
    II=N+1
    IF (N.EQ.E1) AM1=TTNE1
    IF (N.NE.E1) AM1=TT(N-1)
    COEF=TAU/(2.*H)
    A(N)=COEF*(MU/H-V(N)/2)
    C(N)=COEF*(MU/H+V(II)/2)
    B(N)=1.+(TAU/2.)*(SIGMA/2.+2.*MU/H**2)
    CH=2.-B(N)
    F(N)=A(N)*AM1+CH*TT(N)+C(N)*TT(II)
4 CONTINUE
CALL PROG(E1,E2)
DO 5 N=E1,E2
5 Q0(I,N)=TT(N)
IF(I.LE.39) GO TO 1
RETURN
END

```

C *****

```

SUBROUTINE DIRECX
COMMON /ADJ1/ A(40),AL(40),B(40),BE(40),C(40),F(40)
COMMON /ADJ2/ TT(40),V(41),N0,L0,H,MU,SIGMA,TAU
COMMON /ADJ3/ Q0(40,38),U0(41,38),V0(40,39)
REAL*8 U0,V0,V

```

```

INTEGER E,E1,E2,S
REAL SIGMA,COEF,MU
J=0
1 J=J+1
  E1=1
  E2=N0
  DO 3 N=E1,E2+1
    V(N)=U0(N,J)
    IF (N.LE.E2) TT(N)=Q0(N,J)
3 CONTINUE
  NE2=E2+1
  IF (V(E1).GT.0.) TTNE1=TT(E1)
    FE1=V(E1)*H
    FE2=V(NE2)*H
  IF (V(E1).LE.0.) TTNE1=((2*MU+FE1)*TT(E1))/(2*MU-FE1)
  IF (V(NE2).LT.0.) TT(NE2)=TT(E2)
  IF (V(NE2).GE.0.) TT(NE2)=((2*MU-FE2)*TT(E2))/(2*MU+FE2)
  DO 4 N=E1,E2
    S=N+1
    IF(N.EQ.E1) AM1=TTNE1
    IF(N.NE.E1) AM1=TT(N-1)
  COEF=TAU/(2.*H)
  A(N)=COEF*(MU/H-V(N)/2)
  C(N)=COEF*(MU/H+V(S)/2)
  B(N)=1.+(TAU/2.)*(SIGMA/2.+2.*MU/H**2)
  CH=2.-B(N)
  F(N)=A(N)*AM1+CH*TT(N)+C(N)*TT(S)
4 CONTINUE
  CALL PROG(E1,E2)
  DO 5 N=E1,E2
5   Q0(N,J)=TT(N)
  IF(J.LE.37) GO TO 1
  RETURN
END

```

C PROGRAMA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN (X,Y) ESPACIO
C PROBLEMA DIRECTO

C*****

```

INTEGER E,E1,E2,I,J,K,L,N,T
INTEGER TIME
REAL NORMA,BALANCE,MU,SIGMA,COEF,H,TAU
REAL*8 PI,V
REAL*8 U0,V0,PSI(41,39)
COMMON /ADJ1/ A(40),AL(40),B(40),BE(40),C(40),F(40)
COMMON /ADJ2/ TT(40),V(41),N0,L0,II,MU,SIGMA,TAU
COMMON /ADJ3/ Q0(40,38),U0(41,38),V0(40,39)

```

C***** Input Information *****

```

OPEN(1,FILE='RESULT.DAT',STATUS='NEW')
WRITE(*,*) 'Ingresar los parámetros de TAU y H'
READ(*,*) TAU,H
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) 'Ingresar los parámetros TIME'
READ(*,*) TIME
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) 'Ingresar el coeficiente de difusión MU'
READ(*,*) MU
WRITE(*,*)
    PI=3.141592653
    SIGMA=0.
    T=0
    N0=40
    L0=38

```

C*** Input PSI(I,J),UO(I,J),VO(I,J) and Q0(I,J) *****

```

DO 110 J=1,L0+1
    DO 110 I=1,N0+1
110  PSI(I,J)=0.
    DO 111 J=2,L0
        DO 111 I=2,N0
111  PSI(I,J)=50.0D0*SQRT((I*2.0)**2+(J*1.0)**2)
C 111  PSI(I,J)=30000.0D0*DSIN((I-1)*PI/N0)*DSIN((J-1)*PI/L0)
    WRITE(1,*) 'Campo de función de corriente, PSI'
    WRITE(1,121) PSI
121  FORMAT(41F7.1)
    DO 112 J=1,L0
        DO 112 I=1,N0+1
112  U0(I,J)=-((PSI(I,J+1))-PSI(I,J))/H
C 112  U0(I,J)=-3.00000000
C 112  U0(I,J)=0.0d0
    WRITE(1,*) 'Campo del viento, componente U0(I,J)'
    WRITE(1,122) U0

```

```

122 FORMAT(41F10.7)
  DO 113 J=1,L0+1
    DO 113 I=1,N0
113  V0(I,J)=(PSI(I+1,J)-PSI(I,J))/II
C 113  V0(I,J)=2.00000000
C 113  V0(I,J)=0.0d0
  DO 311 J=1,38
    U0(1,J)=0.0D0
311  U0(41,J)=0.0D0
  DO 312 I=1,40
    V0(I,1)=0.0D0
312  V0(I,39)=0.0D0
  WRITE(1,*) 'Campo del viento, componente V0(I,J)'
  WRITE(1,123) V0
123 FORMAT(40F10.7)
  DO 114 J=1,L0
    DO 114 I=1,N0
114  Q0(I,J)=0.
C *****
1000 IF (T.GE.TIME) GO TO 9000
  T=T+1
C *****
C * 1-RST AND 2-ND STEPS:(Y,X)-SPLITTING UP METHOD IN OCEAN *
C *****
  CALL DIRECY
  CALL DIRECX
C *****
C  Introducción de Fuentes de contaminación *
C *****
  Q0(16,13)=Q0(16,13)+TAU*0.50
  Q0(1,25)=Q0(1,25)+TAU*0.50
  .0
  Q0(32,28)=Q0(32,28)+TAU*0.50
  Q0(30,6)=Q0(30,6)+TAU*0.50
C *****
C * 4-TH AND 5-TH STEPS:(X,Y)-SPLITTING UP METHOD
C *****
201 CONTINUE
  CALL DIRECX
  CALL DIRECY
  BALANCE=0.
  NORMA=0.
  DO 116 J=1,L0
    DO 116 I=1,N0
      BALANCE=BALANCE+Q0(I,J)

```

```

116  NORMA=NORMA+Q0(I,J)**2
      WRITE(1,*) 'T=',T,' BALANCE=',BALANCE,' NORMA=',NORMA
      WRITE(1,*) 'Campo de Q0(I,J)nuevo.'
      WRITE(1,126) Q0
126  FORMAT(40F10.5)
      IF (T.LT.TIME) GO TO 1000
9000 CONTINUE
C    WRITE(1,126) Q0
C 126  FORMAT(40F10.8)
      CLOSE(1,STATUS='KEEP')
      STOP
      END
C*****
SUBROUTINE PROG(E1,E2)
INTEGER E1,E2
REAL MU,SIGMA,H,TAU
REAL*8 V
COMMON /ADJ1/ A(40),AL(40),B(40),BE(40),C(40),F(40)
COMMON /ADJ2/ TT(40),V(41),N0,L0,H,MU,SIGMA,TAU
I=E1+1
X=1./(B(E1)-A(E1))
AL(I)=C(E1)*X
BE(I)=F(E1)*X
K=E2-1
DO 1 N=I,K
  J=N+1
  X=1./(B(N)-A(N)*AL(N))
  BE(J)=(F(N)+A(N)*BE(N))*X
1  AL(J)=C(N)*X
  TT(E2)=(A(E2)*BE(E2)+F(E2))/(B(E2)-C(E2)-A(E2)*AL(E2))
DO 3 M=I,E2
  N=E2+I-M
  J=N-1
3  TT(J)=AL(N)*TT(N)+BE(N)
RETURN
END
C*****
SUBROUTINE DIRECY
COMMON /ADJ1/ A(40),AL(40),B(40),BE(40),C(40),F(40)
COMMON /ADJ2/ TT(40),V(41),N0,L0,H,MU,SIGMA,TAU
COMMON /ADJ3/ Q0(40,38),U0(41,38),V0(40,39)
REAL*8 U0,V0,V
INTEGER E,E1,E2
REAL SIGMA,COEF,MU,TAU
I=0

```

```

1 I=I+1
  E1=1
  E2=L0
  DO 3 N=E1,E2+1
    V(N)=V0(I,N)
    IF (N.LE.E2) TT(N)=Q0(I,N)
3 CONTINUE
  NE2=E2+1
  IF (V(E1).le.0.) TTNE1=TT(E1)
    FE1=V(E1)*H
    FE2=V(NE2)*H
  IF (V(E1).gt.0.) TTNE1=((2*MU-FE1)*TT(E1))/(2*MU+FE1)
  IF (V(NE2).ge.0.) TT(NE2)=TT(E2)
  IF (V(NE2).lt.0.) TT(NE2)=((2*MU+FE2)*TT(E2))/(2*MU-FE2)
  DO 4 N=E1,E2
    II=N+1
    IF (N.EQ.E1) AM1=TTNE1
    IF (N.NE.E1) AM1=TT(N-1)
  COEF=TAU/(2.*H)
  A(N)=COEF*(MU/H+V(N)/2)
  C(N)=COEF*(MU/H-V(II)/2)
  B(N)=1.+(TAU/2.)*(SIGMA/2.+2.*MU/II**2)
  CH=2.-B(N)
  F(N)=A(N)*AM1+CH*TT(N)+C(N)*TT(II)
4 CONTINUE
  CALL PROG(E1,E2)
  DO 5 N=E1,E2
5 Q0(I,N)=TT(N)
  IF(I.LE.39) GO TO 1
  RETURN
  END
C *****
  SUBROUTINE DIRECX
  COMMON /ADJ1/ A(40),AL(40),B(40),BE(40),C(40),F(40)
  COMMON /ADJ2/ TT(40),V(41),N0,L0,II,MU,SIGMA,TAU
  COMMON /ADJ3/ Q0(40,38),U0(41,38),V0(40,39)
  REAL*8 U0,V0,V
  INTEGER E,E1,E2,S
  REAL SIGMA,COEF,MU
  J=0
1 J=J+1
  E1=1
  E2=N0
  DO 3 N=E1,E2+1
    V(N)=U0(N,J)

```

```

      IF (N.LE.E2) TT(N)=Q0(N,J)
3 CONTINUE
  NE2=E2+1
  IF (V(E1).lc.0.) TTNE1=TT(E1)
      FE1=V(E1)*H
      FE2=V(NE2)*H
  IF (V(E1).gt.0.) TTNE1=((2*MU-FE1)*TT(E1))/(2*MU+FE1)
  IF (V(NE2).ge.0.) TT(NE2)=TT(E2)
  IF (V(NE2).lt.0.) TT(NE2)=((2*MU+FE2)*TT(E2))/(2*MU-FE2)
  DO 4 N=E1,E2
    S=N+1
    IF(N.EQ.E1) AM1=TTNE1
    IF(N.NE.E1) AM1=TT(N-1)
    COEF=TAU/(2.*H)
    A(N)=COEF*(MU/H+V(N)/2)
    C(N)=COEF*(MU/H-V(S)/2)
    B(N)=1.+(TAU/2.)*(SIGMA/2.+2.*MU/H**2)
    CH=2.-B(N)
    F(N)=A(N)*AM1+CH*TT(N)+C(N)*TT(S)
4 CONTINUE
  CALL PROG(E1,E2)
  DO 5 N=E1,E2
5   Q0(N,J)=TT(N)
  IF(J.LE.37) GO TO 1
  RETURN
  END

```