

01173
10
Key

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO
FACULTAD DE INGENIERIA



**MODELO COMPUTACIONAL PARA EL TRANSPORTE
DE CONTAMINANTES
NO REACTIVOS EMITIDOS POR FUENTES FIJAS**

TESIS PRESENTADO POR
CARLOS IVAN RIVERA SOLORIO
PARA OBTENER
EL GRADO DE MAESTRO EN INGENIERIA MECANICA

DIRECTOR DE TESIS
DR. ARÓN JAZCILEVICH DIAMANT
NOVIEMBRE 1995

FALLA DE ORIGEN



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.

AGRADECIMIENTOS

Gracias a mi esposa, María Esther, por su apoyo, amor y ayuda inagotable en los momentos mas difíciles, permitiendo que no desistiera de esta meta.

Gracias a mis profesores de la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería, por su colaboraron en mi formación académica, en especial a el Dr. Arón Jazcilevich, a quien considero una persona excelente y un gran amigo, preocupándose mas allá de su deber como asesor.

Gracias a la Universidad Nacional Autónoma de México, por darme el privilegio y el orgullo de ser parte de ella, brindándome no solo conocimientos científicos, sino una forma de apreciar las cosas, que servirá para el resto de mi vida.

Gracias a mis amigos de la UNAM, quienes siempre me dieron su amistad y compañía.

Gracias a mis padres, a quienes no existe forma de pagarles todo lo que me han dado, siempre los llevare dentro de mi, buscando darles más satisfacciones.

Carlos Iván Rivera Solorio

MODELO COMPUTACIONAL PARA EL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES NO REACTIVOS EMITIDOS POR FUENTES FIJAS

INDICE

I. INTRODUCCION	1
II. ANTECEDENTES. METEOROLOGÍA Y DIFUSIÓN ATMOSFÉRICA	
2.1 TEORÍAS DE DIFUSIÓN ATMOSFÉRICA	3
2.2 COEFICIENTES DIFUSIVOS	15
2.3 NÚMERO DE PECLET	18
2.4 GRADIENTE ADIABÁTICO	19
2.5 CLASES DE ESTABILIDAD ATMOSFÉRICA.....	21
2.6 INVERSIÓN TÉRMICA	22
2.7 ALTURA DE LA CAPA DE MEZCLA	24
2.8 VIENTOS	25
2.9 MODELOS METEOROLÓGICOS COMPUTACIONALES.....	27
III. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	
3.1 DESCRIPCIÓN DEL DOMINIO	30
3.2 PLANTEAMIENTO DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN ATMOSFÉRICA	32
IV. MÉTODOS NUMÉRICOS APLICADOS EN EL MODELO COMPUTACIONAL	34
4.1 MÉTODO DE SELECCIÓN ALEATORIA	45
4.2 MÉTODO DE CRANK-NICOLSON	54

4.3	MÉTODO DE TRATAMIENTO PARA FUENTES FIJAS	61
-----	--	----

V. SOLUCION DEL MODELO TRIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE PARA FUENTES FIJAS

5.1	SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN ATMOSFÉRICA	67
5.2	MODELO NUMÉRICO DESARROLLADO Y EL GAUSSIANO	71
5.3	EJEMPLO CONSIDERANDO UN CAMPO DE VIENTOS VARIABLE	79
5.4	EJEMPLO PARA UNA TERMOELÉCTRICA BAJO LAS CONDICIONES METEOROLÓGICAS DEL VALLE DE MEXICO	82

VI.	CONCLUSIONES	86
-----	--------------------	----

APENDICE

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

I. INTRODUCCIÓN

En este trabajo se desarrolló un *modelo computacional de transporte atmosférico* cuya finalidad ha sido simular la dispersión de un contaminante no reactivo emitido por una fuente fija. Las ecuaciones que resultan de la modelación matemática del problema físico, en general no pueden ser resueltas analíticamente, por lo que es necesario desarrollar modelos numéricos para obtener su solución. Estos modelos proveen de una herramienta que ayuda en la evaluación, desarrollo y predicción de medidas para reducir la contaminación.

La aportación de este trabajo consiste en la eliminación de la difusión numérica, lo cual constituye un factor importante en el mejoramiento de la simulación, sobre todo en el plano horizontal, donde el transporte de contaminantes se debe principalmente a la advección por el viento. Para este efecto se introduce el Método de Selección Aleatoria.

En los primeros capítulos se presenta una breve descripción de antecedentes meteorológicos y difusión atmosférica, lo que ayudará a entender la física necesaria para atacar el problema en un medio tan complejo como la atmósfera. En capítulos subsiguientes, se describe el dominio en el cual se simula el transporte del contaminante, la ecuación que simula el fenómeno y las condiciones de frontera a las cuales está sujeta. Se explican, además los métodos numéricos utilizados y sus ventajas. Así mismo, se realizan experimentos numéricos para probar los métodos empleados. En el último capítulo, se hace una evaluación del modelo numérico desarrollado con el modelo gaussiano, ya que éste último es ampliamente utilizado por agencias de protección ambiental. Se resuelve también el modelo, aplicando un campo de vientos variable con objeto de observar en forma cualitativa si los resultados del modelo respetan la física del problema. Finalmente se muestra que el modelo desarrollado puede ser aplicado a problemas reales. Para ello se utilizaron las condiciones meteorológicas del Valle de México y datos técnicos de una termoeléctrica.

La visualización de resultados se llevó a efecto mediante los paquetes Mathematica, XV, Showcase, Imgworks y GraficV3. Este último requiere de programación en Fortran 77. La programación fue realizada en lenguaje C, y se

utilizaron estaciones de trabajo RISC6000 de IBM, SUN, SILICON y NEXT bajo UNIX, así como PC 486DX bajo DOS.

II ANTECEDENTES. METEOROLOGÍA, DIFUSIÓN ATMOSFÉRICA

La Meteorología es una disciplina científica relacionada con los fenómenos atmosféricos y utilizada en el estudio de la calidad del aire en función de la dinámica atmosférica. Para ello, es importante considerar factores que influyen en la determinación del clima, tales como magnitud y dirección de los vientos, así como el perfil de temperatura.

2.1 TEORÍAS DE DIFUSIÓN ATMOSFÉRICA

Una de las aplicaciones más importantes de la difusión atmosférica es el campo de los modelos de dispersión atmosférica diseñados para predecir el comportamiento de los contaminantes.

El comportamiento de los gases y partículas en flujo turbulento se conoce como difusión turbulenta. En el caso de la atmósfera, nos referiremos a ello como difusión atmosférica. El tratamiento de problemas en el ámbito de la difusión atmosférica se puede llevar a efecto aplicando dos técnicas distintas: la euleriana y la lagrangiana. En la primera se elige un sistema fijo de referencia y es la técnica mayormente aplicada a problemas de calor y de transferencia de masa. La segunda se caracteriza porque elige un sistema de referencia que sigue las corrientes existentes en el fluido. En este trabajo nos ocuparemos de la técnica euleriana debido a que es la utilizada por el modelo de contaminación que aquí se presenta.

Para describir el comportamiento de las especies que son transportadas por un fluido en un medio como la atmósfera, se debe de considerar las densidades y velocidades de cada una de las especies. A las densidades de cada una de las N especies las designamos como $c_i(x,t)$, las cuales también se conocen como concentración de la especie i . Las velocidades de cada una de las concentraciones se denotarán como u_i .

Sea D_t una región en un espacio tridimensional conteniendo un fluido que se mueve en el tiempo t . Considere una región fija, sobre la cual pasa el cuerpo D_t ,

lo que se conoce como volumen de control $\mathcal{V}$, como se muestra en la figura (2.1.1).

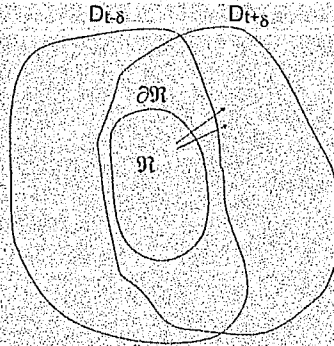


Figura 2.1.1 Región fija $\mathcal{V}$ sobre la cual pasa un fluido

en donde,

- $\mathcal{V}$ es el volumen de control
- $\partial\mathcal{V}$ es la frontera del volumen de control
- $\mathbf{u}$ es un campo espacial de velocidades del fluido
- $\mathbf{n}$ es un campo vectorial unitario dirigido hacia afuera
- dA es un elemento de área de $\partial\mathcal{V}$
- δ es un número positivo pequeño.

El transporte de concentraciones de las diferentes especies en un medio, debe de seguir el principio de conservación de masa de las especies. Este principio indica que el cambio de concentraciones en el volumen de control debe ser igual al flujo neto de concentraciones que atraviesa la frontera, más lo que se genera dentro de este volumen por reacciones químicas o por la adición de un término fuente.

El flujo de concentraciones por unidad de área que atraviesa la frontera $\partial\mathcal{V}$ está dado por $c_i \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$, por lo que aplicando el principio de conservación de masa de las

especies para el volumen de control $\mathcal{V}$ mostrado en la figura (2.1.1), se obtiene:

$$\frac{d}{dt} c_i = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} c_i dV = - \int_{\partial \mathcal{V}} c_i \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA + \int_{\mathcal{V}} S \quad (2.1.1)$$

donde dV es un elemento de volumen, dA es un elemento de área y S es un término fuente.

Aplicando el teorema de la divergencia a la integral de superficie en la ecuación (2.1.1) y considerando que $\mathcal{V}$ es una región fija que no depende del tiempo se tiene:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} c_i dV = \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial c_i}{\partial t} dV = - \int_{\mathcal{V}} \text{div}(c_i \mathbf{u}_i) dV + \int_{\mathcal{V}} S \quad (2.1.2)$$

$$\int_{\mathcal{V}} \left[\frac{\partial c_i}{\partial t} + \text{div}(c_i \mathbf{u}_i) + S \right] dV = 0 \quad (2.1.3)$$

Como lo anterior es válido para cualquier $\mathcal{V}$, entonces aplicando el lema de Raymond-Dubois a la ecuación (2.1.3) se tiene:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \text{div}(c_i \mathbf{u}_i) + S = 0 \quad (2.1.4)$$

En la deducción anterior no se ha especificado un sistema de coordenadas, por lo que es válida para cualquier sistema.

El flujo de concentraciones que pasa a través de la frontera $\partial \mathcal{V}$, está formado por lo que se transporta por el fluido y lo que se difunde a través de éste, lo cual se puede escribir como:

$$c_i \mathbf{u}_i = c_i \mathbf{u} + D_i \nabla c_i \quad (2.1.5)$$

en donde D_i es la difusividad de las especies contaminantes i en el aire. El segundo término del lado derecho proviene de la ley de Fick. Sustituyendo la ecuación (2.1.5) en (2.1.4), se obtiene la ecuación de continuidad para las especies,

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} u_j c_i = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j \partial x_j} + S_i(x, t) \quad (2.1.6)$$

en donde u_j es la j -ésima componente de la velocidad del fluido y S_i representa la razón de emisión de contaminantes a partir de las fuente fija i . Además de que c_i debe satisfacer la ecuación de continuidad (2.1.6), se requiere de que las velocidades u_j del fluido así como la temperatura T satisfagan las ecuaciones de Navier-Stokes (2.1.7) y la ecuación de la energía (2.1.8),

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\mu}{\rho_0} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{g T}{T_0} \delta_{i3} \quad (2.1.7)$$

$$\rho_0 C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = k \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} + Q \quad (2.1.8)$$

donde,

ρ_0 = densidad a nivel del suelo

T_0 = temperatura a nivel del suelo

C_p = calor específico

k = conductividad térmica

Q = calor generado

μ = viscosidad

Las ecuaciones (2.1.7) y (2.1.8) están acopladas por u_j , c_i y T con la ecuación (2.1.6) y la ley de los gases ideales, por lo cual se debe efectuar la solución simultánea de ecuaciones acopladas de masa, momento y energía a fin de considerar los cambios en u_j , c_i y T y el impacto de los efectos de sus cambios sobre cada una de las demás variables.

Considerando que para el caso de contaminación del aire, se puede suponer que los contaminantes en la atmósfera se presentan en concentraciones de partes por millón [Seinfeld et al, 74], la ecuación de continuidad (2.1.6) se puede resolver independientemente de las ecuaciones de momento y energía. En consecuencia, las velocidades u_j del viento así como la temperatura T pueden considerarse independientes de c_i .

Las ecuaciones (2.1.6) a (2.1.8), se resuelven para un instante de tiempo y para escalas espaciales en las que se debe considerar un volumen mayor que el espacio entre las moléculas y, a la vez, suficientemente pequeño, tal que permita que las variables sean constantes en ese volumen, y que en la atmósfera serían escalas de segundos y metros.

Sin embargo en la atmósfera se manejan problemas de tamaño mesoescala, por lo que es necesario emplear escalas de tiempo y de espacio para las que se disponga de información suficiente y que además sea posible procesarlas computacionalmente de una manera eficiente. Numéricamente hablando, es necesario realizar un promedio de los datos que se estén manejando (concentraciones, velocidades, etc.) en una celda de tamaño Δx , Δy , Δz y en un intervalo de tiempo Δt , para lo cual se deben integrar las ecuaciones (2.1.6) a (2.1.8) en los intervalos espaciales y de tiempo. Para esto se recomienda realizar la siguiente descomposición de Reynolds [Pielke, 1984] de las variables dependientes ϕ en:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi'' \quad (2.1.9)$$

en donde $\bar{\phi}$ es el promedio de ϕ en Δx , Δy , Δz y en el tiempo Δt , y esta dado por,

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \int_x^{x+\Delta x} \int_y^{y+\Delta y} \int_z^{z+\Delta z} \phi \frac{dz dy dx dt}{\Delta z \Delta y \Delta x \Delta t} \quad (2.1.10)$$

la desviación del promedio $\bar{\phi}$ se denota por ϕ'' y se conoce como perturbación de escala de la submalla (subgrid scale perturbation).

La ecuación (2.1.9) debe de ser sustituida en las ecuaciones (2.1.6) a (2.1.8), en las cuales es posible sacar de la integral las derivadas parciales en el tiempo y en el espacio, porque se considera que los intervalos espaciales Δx , Δy , Δz y de tiempo Δt , no dependen de la posición ni del tiempo. Además es posible simplificar aun más las ecuaciones (2.1.6) a (2.1.8), al considerar que el promedio de las variables dependientes varía en forma mas lenta que las desviaciones del promedio en los intervalos espaciales Δx , Δy , Δz y de tiempo Δt , por lo que se puede considerar que el promedio de las perturbaciones es igual con cero,

$$\overline{\phi'} = 0 \quad (2.1.11)$$

y (2.1.11) solo ocurre cuando la media es constante, esto es, cuando la media y su promedio son iguales:

$$\overline{\phi} = \overline{\phi} \quad (2.1.12)$$

Las ecuaciones (2.1.11) y (2.2.13) se conocen como la suposición de Reynolds. En la figura (2.1.1) se aprecia que la ecuación (2.1.11) se cumple y que, por lo tanto, la suposición de Reynolds es válida. Sin embargo, puede existir un período de tiempo con extensión tal que la perturbación fluctúe de tal manera que la media se vea afectada (no sea constante) como consecuencia de la baja frecuencia. Por otra parte, si el período de tiempo es muy pequeño, la media puede ser afectada por una perturbación de alta frecuencia. En ambos casos, el promedio de la media será diferente de ésta, dando por resultado que la ecuación (2.1.12) no se cumpla y con ello, que la suposición de Reynolds no sea válida para estos dos últimos ejemplos, como se muestra en la figura (2.1.2).

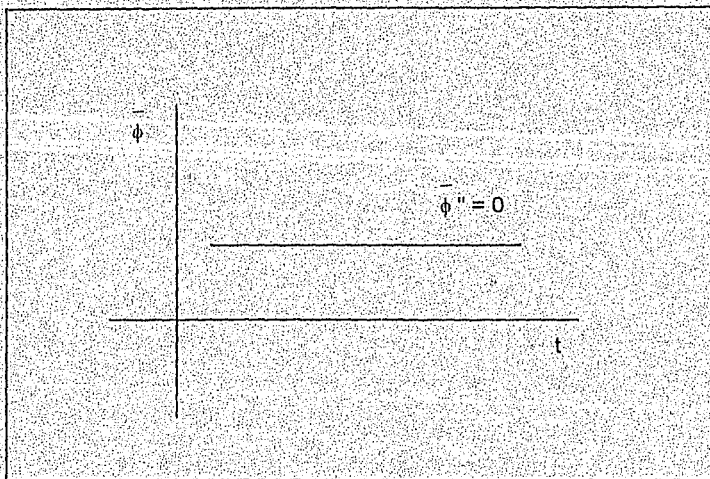


Figura 2.1.2 La media es constante

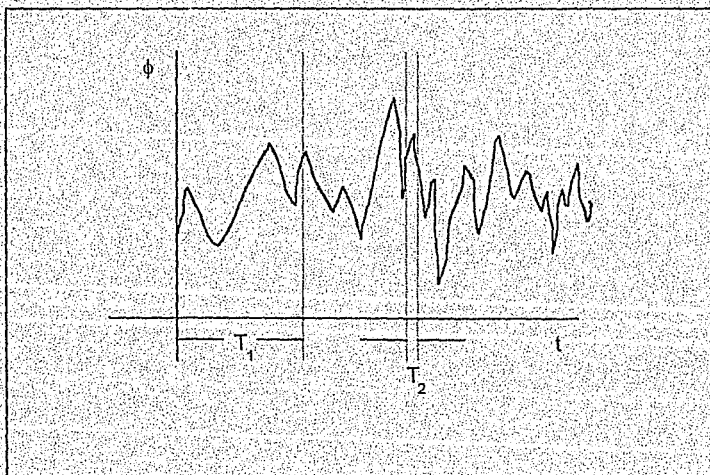


Figura 2.1.3 La suposición de Reynolds no es válida para periodos de tiempo muy largos, como T_1 , ni para periodos muy cortos, como T_2 .

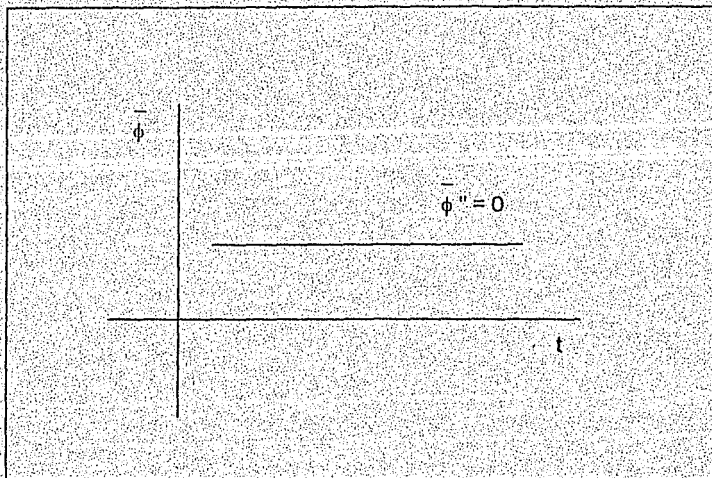


Figura 2.1.2 La media es constante.

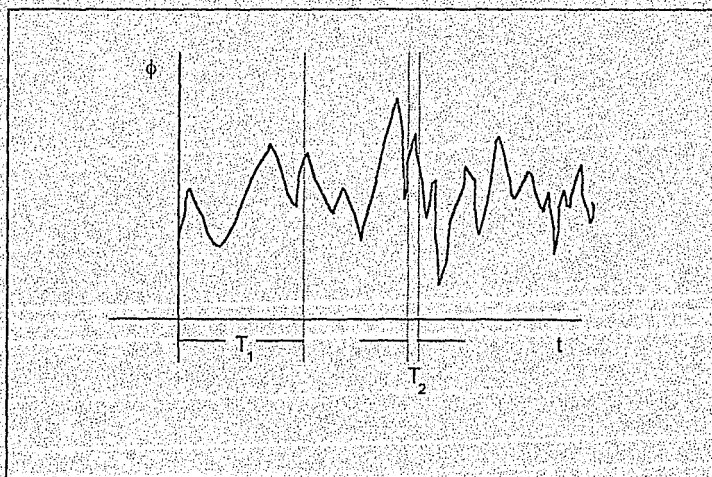


Figura 2.1.3 La suposición de Reynolds no es válida para períodos de tiempo muy largos, como T_1 , ni para períodos muy cortos, como T_2 .

Debido a que los flujos son turbulentos, las velocidades u_j son funciones aleatorias del tiempo y el espacio, podemos utilizar la descomposición de Reynolds, para representarlas como la suma de dos componentes, una que describe las velocidades promedio $\bar{u}_j$ y otra las velocidades fluctuantes u_j'' como se muestra a continuación:

$$u_j = \bar{u}_j + u_j'' \quad (2.1.13)$$

en donde,

$$\bar{u}_j = \frac{1}{\Delta t \Delta x \Delta y \Delta z} \int_t^{t+\Delta t} \int_x^{x+\Delta x} \int_y^{y+\Delta y} \int_z^{z+\Delta z} u_j \frac{dz dy dx dt}{\Delta z \Delta y \Delta x \Delta t} \quad (2.1.14)$$

Sustituyendo la expresión (2.1.13) en la ecuación (2.1.6), tenemos

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\bar{u}_j + u_j'') c_i \right] = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j \partial x_j} + S_i(x, t) \quad (2.1.15)$$

Al tener un flujo turbulento, también se tiene que las concentraciones c_i varían en una forma aleatoria en el tiempo y en el espacio, por lo que es necesario también considerar la descomposición de Reynolds, para considerar que están formadas por una concentración promedio $\bar{c}_i$ y una concentración que varía c_i'' del promedio como se muestra a continuación:

$$c_i = \bar{c}_i + c_i'' \quad (2.1.16)$$

en donde,

$$\bar{c}_i = \frac{1}{\Delta t \Delta x \Delta y \Delta z} \int_t^{t+\Delta t} \int_x^{x+\Delta x} \int_y^{y+\Delta y} \int_z^{z+\Delta z} c_i \frac{dz dy dx dt}{\Delta z \Delta y \Delta x \Delta t} \quad (2.1.17)$$

Sustituyendo (2.1.16) en (2.1.15) y promediando la ecuación resultante y utilizando las suposiciones de Reynolds en las que las variaciones se pueden considerar como $c_i'' = 0$ y $u_j'' = 0$ se obtiene:

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_j \bar{c}_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial (\overline{u_j'' c_i''})}{\partial x_j} = D_i \frac{\partial^2 \bar{c}_i}{\partial x_j \partial x_j} + S_i(x, t) \quad (2.1.18)$$

En la ecuación (2.1.18) aparece un nuevo término $(\overline{u_j'' c_i''})$ el cual se conoce como término dispersivo de Reynolds. Este término representa la difusión turbulenta, lo que ocasiona que exista un mayor número de incógnitas que de ecuaciones. Esto nos conduce a un problema de cerradura.

Debido a la física del problema que se está tratando se pueden realizar algunas simplificaciones en la ecuación (2.1.18). En un medio como la atmósfera se puede considerar la difusión molecular despreciable con respecto a la difusión turbulenta:

$$D_i \frac{\partial^2 \bar{c}_i}{\partial x_j^2} \ll \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_j'' c_i''}) \quad (2.1.19)$$

y al mismo tiempo, considerar que el fluido es incompresible, por lo que,

$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.1.20)$$

Sustituyendo las suposiciones (2.1.19) y (2.1.20) en la ecuación (2.1.18) se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial (\overline{u_j'' c_i''})}{\partial x_j} + S_i \quad (2.1.21)$$

Aun con estas suposiciones, se sigue teniendo el problema de cerradura, y para solucionarlo se utiliza la teoría de coeficientes difusivos K [Monin & Yaglom, 71], en donde los términos $(u_j' c_i')$ son aproximados mediante la siguiente relación:

$$(\overline{u_j'' c_i''}) = - K_{jk} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x_k}, \quad j = 1, 2, 3. \quad (2.1.22)$$

En (2.1.22) K es un tensor de segundo orden y cada uno de sus componentes representa a los coeficientes de difusividad. Cuando los ejes coordenados del tensor K son los ejes principales, su forma diagonal es válida para toda la región, esto es, $K_{jk} \neq 0 \forall k = j$ y la ecuación (2.1.22) toma la siguiente forma:

$$\left(u_j \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right) = -K_{jj} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x_j^2}, \quad j = 1, 2, 3. \quad (2.1.23)$$

Sustituyendo la ecuación (2.1.24) en (2.1.21) se obtiene finalmente la ecuación de difusión atmosférica,

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_{jj} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right) + S(x, t) \quad (2.1.24)$$

La ecuación (2.1.24) describe como se transporta un contaminante no reactivo emitido por una fuente fija $S(x,t)$ en la posición (x, t) en la atmósfera. Las velocidades u_j se obtienen a partir de un modelo meteorológico.

TRANSFORMACIÓN DE COORDENADAS QUE SIGUEN LA TOPOGRAFÍA

Como la frontera inferior del dominio en el cual se resuelve la ecuación (2.1.24) se encuentra determinada por la topografía de la superficie del terreno, se hace necesaria una transformación de coordenadas que nos permita resolver numéricamente la ecuación (2.1.24) con mayor facilidad. La transformación es la siguiente:

$$\xi = x, \quad \eta = y, \quad \gamma = \frac{z - h(x, y)}{H(x, y, t) - h(x, y)}, \quad \tau = t \quad (2.1.25)$$

en donde z es el punto de cálculo, h es la topografía del terreno y H es la altura del dominio, la cual está dada por la altura de capa de mezcla o por la capa más elevada, dependiendo cual de las dos sea considerada como frontera superior.

La ecuación (2.1.24) es una ecuación que conserva masa, por lo que al realizar la transformación de coordenadas se busca que la ecuación siga teniendo la misma estructura conservativa, ya que se ha demostrado que numéricamente se obtienen mejores resultados si se mantiene la forma conservativa de las ecuaciones gobernantes [Roache, 1976]. Utilizando la transformación (2.1.25) en la ecuación (2.1.24) se obtiene la siguiente ecuación para el nuevo dominio computacional:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H \bar{c}}{\partial \tau} + \frac{\partial H \bar{u} \bar{c}}{\partial \xi} + \frac{\partial H \bar{v} \bar{c}}{\partial \eta} + \frac{\partial W \bar{c}}{\partial \gamma} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ K_{xx} \hat{H} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \xi} - K_{xy} \left(\frac{\partial h}{\partial \xi} + \gamma \frac{\partial H}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \bar{c}}{\partial \gamma} \right\} \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ K_{yy} \hat{H} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \eta} - K_{yx} \left(\frac{\partial h}{\partial \eta} + \gamma \frac{\partial H}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \bar{c}}{\partial \gamma} \right\} + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left\{ -K_{xx} \left(\frac{\partial h}{\partial \xi} + \gamma \frac{\partial H}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \bar{c}}{\partial \xi} - K_{xy} \left(\frac{\partial h}{\partial \eta} + \gamma \frac{\partial H}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \bar{c}}{\partial \eta} \right. \\ \left. + \left[\frac{K_{xx}}{\hat{H}} \frac{\partial h}{\partial \xi} + \gamma \frac{\partial H}{\partial \xi} \right]^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial \eta} + \gamma \frac{\partial H}{\partial \eta} \right)^2 + \frac{K_{zz}}{\hat{H}} \right] \frac{\partial \bar{c}}{\partial \gamma} \right\} + S \hat{H} \end{aligned} \quad (2.1.26)$$

en donde W y $\hat{H}$ están dadas por:

$$W = w - u \left(\frac{\partial h}{\partial \xi} + \gamma \frac{\partial H}{\partial \xi} \right) - v \left(\frac{\partial h}{\partial \eta} + \gamma \frac{\partial H}{\partial \eta} \right) - \gamma \frac{\partial H}{\partial \tau}$$

$$\hat{H} = H(x, y, t) - h(x, y)$$

Debido a la presencia de términos fuera de la diagonal del tensor K , resolver numéricamente la ecuación (2.1.26) presenta un mayor grado de complejidad, sin embargo estos términos, para problemas de flujo turbulento en zonas urbanas, pueden ser despreciados cuando se comparan con otros [Blumenthal et al, 1978], como se muestra a continuación:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \xi} \gg \frac{1}{\hat{H}} \left(\frac{\partial h}{\partial \xi} + \gamma \frac{\partial H}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \bar{c}}{\partial \gamma} \quad (2.1.27)$$

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \eta} \gg \frac{1}{\hat{H}} \left(\frac{\partial h}{\partial \eta} + \gamma \frac{\partial H}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \bar{c}}{\partial \gamma} \quad (2.1.28)$$

Finalmente utilizando las suposiciones (2.1.27) y (2.1.28) en la ecuación (2.1.26) se obtiene:

$$\frac{\partial H c}{\partial \tau} + \frac{\partial H u c}{\partial \xi} + \frac{\partial H v c}{\partial \eta} + \frac{\partial W c}{\partial \gamma} =$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\hat{H} K_{xx} \frac{\partial c}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\hat{H} K_{yy} \frac{\partial c}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\frac{K_z}{\hat{H}} \frac{\partial c}{\partial \gamma} \right) + S \hat{H} \quad (2.1.29)$$

la ecuación de difusión atmosférica transformada, la cual mantiene su forma conservativa. Esta ecuación será la que se resuelva numéricamente en este trabajo.

2.2 COEFICIENTES DIFUSIVOS

En la ecuación (2.1.24) las componentes K_{ij} del tensor K representan coeficientes de difusión vertical y horizontal obtenidos generalmente por procedimientos experimentales debido a que su estimación resulta complicada en extremo.

En la solución de la ecuación de difusión atmosférica, la determinación de los coeficientes de difusividad -además de las velocidades del viento- es fundamental.

COEFICIENTE VERTICAL

El coeficiente vertical K_{zz} depende de la velocidad local y de la variación de la temperatura con la altura. Este coeficiente experimenta un crecimiento aproximadamente lineal con z cuanto más se acerca al suelo.

Actualmente existe un buen número de formulaciones de coeficientes difusivos [Seinfeld, 1986, Zanetti, 1990], debido a que las relaciones para determinarlos cambian de acuerdo al tipo de estabilidad atmosférica. Con tal motivo K_{zz} se define en función de z/L , con L (grueso de capa) como la longitud de Monin-Obukhov,

$$K_{zz} = \frac{ku_*z}{\phi(z/L)} \quad (2.2.1)$$

En la expresión anterior, u_* es la velocidad de fricción. El comportamiento de K_{zz} está definido en la tabla (2.2.1).

Cuando la atmósfera es **neutral** -existe un lapso adiabático- los contaminantes se comportan de manera diferente a como lo hacen en los casos de atmósfera estable o inestable y el coeficiente de difusión vertical toma la forma:

$$K_{zz} = ku_*z \exp(-8zf/u_*) \quad (2.2.2)$$

propuesta por Shir en 1973, y que se aplica en modelos de transporte turbulento unidimensional. En la expresión (2.2.2), f es el parámetro de Coriolis.

Atmósfera		$\phi(z/L)$
Neutral	$z/L = 0$	1
Estable	$z/L > 0$	$1 + 4.7(z/L)$
Inestable	$z/L < 0$	$(1 - 15(z/L))^{-1/2}$

Tabla 2.2.1 Valores que toma el denominador de la expresión (2.2.1) dependiendo del tipo de estabilidad atmosférica.

El coeficiente de difusión vertical bajo **condición estable**, está dado por:

$$K_{zz} = \frac{ku_* z}{(0.74 + 4.7(z/L))} \exp\left(-\frac{8zf}{u_*}\right) \quad (2.2.3)$$

propuesto por Businger y Arya en 1974, y donde el mínimo valor del coeficiente fluctúa entre 0.5 y 5 m²/seg.

Para **condición inestable**, el transporte de contaminantes se lleva a efecto por difusión turbulenta y en este caso, la expresión general, según la tabla (2.2.1) es:

$$K_{zz} = ku_* \sqrt{1 - 15(z/L)} \quad (2.2.4)$$

Debido a los datos disponibles, el modelo aplicado en este trabajo para determinar el coeficiente difusivo vertical, es el propuesto por [Eschenroeder & Martínez, 1969] y el cual podemos representar mediante la expresión (2.2.5).

$$K_{zz} = \begin{cases} [2.5q(\xi, \eta, \tau) - 77.3]\gamma + 30.9 & 0 \leq \gamma < 0.4 \\ q(\xi, \eta, \tau) & 0.4 \leq \gamma < 0.8 \\ 5[30.9 - q(\xi, \eta, \tau)]\gamma + 5q(\xi, \eta, \tau) - 123.6 & 0.8 \leq \gamma \leq 1 \end{cases} \quad (2.2.5)$$

en la expresión (2.2.5) $q(\xi, \eta, \tau) = 0.85 [(u^2 + v^2) + 232]^{1/2}$, además de que sus unidades, son m^2/min . Las componentes horizontales del viento en m/min están representadas por u y v .

COEFICIENTES HORIZONTALES

Los coeficientes de difusión horizontal K_{xx} y K_{yy} dependen también del tipo de estabilidad atmosférica. En el caso de condiciones estables, la especificación de las componentes horizontales se realiza tomando en consideración que el transporte de contaminantes se lleva a efecto mayormente por advección que, como en el caso de K_{zz} , por difusión turbulenta.

Los coeficientes horizontales bajo condiciones inestables y para aplicaciones prácticas se consideran $K_{xx} = K_{yy} = K_H$. En este modelo se consideró un coeficiente difusivo horizontal $K_H = 2980 m^2/min$ [Reynolds et al, 1973].

2.3 NÚMERO DE PECLET

Al resolver la ecuación (2.1.29) es importante conocer la relación que existe entre el efecto difusivo y el advectivo, para lo cual utilizamos el número de Peclet, Pe , que está dado por,

$$Pe = \frac{uL}{K} \quad (2.3.1)$$

en donde u es la velocidad (m/s), L es la longitud característica (m) y K es la difusividad térmica (m^2/s). Para números de Peclet que se aproximan a cero, tenemos un problema principalmente difusivo, mientras que para números grandes de Peclet el problema es principalmente advectivo. Cuando se soluciona numéricamente la ecuación (2.1.29), los métodos numéricos que se utilizan generalmente introducen difusión numérica. Para números pequeños de Peclet la difusión numérica no es importante, porque la difusión real es mucho mayor comparada con la numérica, por lo que se desprecia esta última. Sin embargo, para números de Peclet grandes ($Pe \gg 1$) es importante considerar la difusión numérica producida por el método de aproximación utilizado. Por ejemplo, para el modelo numérico desarrollado en este trabajo, se manejan rangos de velocidades que varían desde menos de 1 m/s hasta más de 10 m/s, por lo que al utilizar un intervalo de aproximación espacial de 1000 m y un coeficiente difusivo típico en la horizontal de $K_H = 49.66 \text{ m}^2/s$, tenemos los siguientes números de Peclet,

Velocidad (m/s)	0.5	1	5	10
Pe	10.06	20.13	100.65	200.13

Tabla 2.3.1. Números de Peclet para diferentes velocidades

Esto indica que es recomendable utilizar métodos numéricos que no introduzcan difusión numérica, como el que se ha adoptado para este trabajo.

2.4 GRADIENTE ADIABÁTICO

Como se describirá más adelante, el aire podrá encontrarse en condiciones estables inhibiendo el mezclado y por lo tanto evitando la dispersión de contaminantes o bien en condiciones inestables propiciando el mezclado y facilitando la dispersión. El conocimiento del gradiente adiabático determinará estas situaciones

Como hemos mencionado, la estabilidad vertical de la atmósfera constituye un factor determinante para la calidad del aire. Su relación con la temperatura se establece de acuerdo a las consideraciones que a continuación se describen:

Cuanto mayor es la altura a la que se encuentra una parcela* de aire, menor es la presión que se ejerce sobre ella y esto ocasiona expansión y enfriamiento. Si por el contrario, la parcela de aire baja, la presión comprime el aire e incrementa la temperatura. Por tal razón, cuando la parcela sube o baja, cambian su temperatura, presión y volumen. Aplicando la ley de los gases ideales y la 1ª ley de la termodinámica, se determina la energía (dQ) que el medio proporciona o resta a la parcela de aire cuando ésta sube o baja, mediante la siguiente fórmula,

$$dQ = C_p dT - V dP \quad (2.4.1)$$

En esta relación dQ representa el calor proporcionado a la parcela por unidad de masa (J/kg), C_p es calor específico a presión constante (J/kg-°C), dT es el incremento de temperatura (K), V el volumen por unidad de masa (m^3/kg) y dP el incremento de la presión en la parcela. Para saber como varía la temperatura con la altura debemos tener una expresión que las relacione y ésta la obtenemos de (2.4.1) cuando la parcela se desplaza sin intercambio de calor (el proceso es entonces adiabático) y $dQ = 0$, obteniendo

$$\frac{dT}{dP} = \frac{V}{C_p} \quad (2.4.2)$$

* Parcela de aire: constituida por un número finito de moléculas de aire en un dominio con frontera definida.

La relación del gradiente adiabático seco (2.4.3) se obtiene suponiendo que la parcela se comporta como un gas ideal con desplazamiento sin intercambio de calor, teniéndose,

$$\Gamma = -\frac{dT}{dz} = 9.76 \text{ }^{\circ}\text{C} / \text{km} = 5.4 \text{ }^{\circ}\text{F} / \text{kft} \quad (2.4.3)$$

En la expresión (2.4.3) dz representa el espesor de la parcela en una columna de aire estática y Γ indica que si la parcela de aire sube pierde aproximadamente 1 $^{\circ}\text{C}$ cada 100 metros o lo gana si baja. Si la temperatura en la parcela de aire se decrementa (al incrementar su altura) más rápido que la relación del gradiente adiabático, el aire se vuelve inestable y se observan, en consecuencia, una mezcla y dilución de contaminantes. De otro modo, si la temperatura cae más lentamente que el gradiente adiabático, el aire será estable y los contaminantes se diluirán fácilmente.

La figura (2.4.1) muestra el gradiente térmico de la atmósfera identificado como Λ , y la relación entre éste y el gradiente adiabático seco.

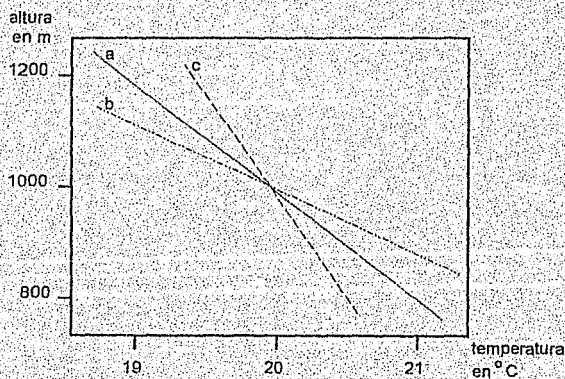


Figura 2.4.1 a) es Γ , b) es Λ superadiabático, c) es Λ subadiabático

Cuando $\Gamma > \Lambda$ los desplazamientos verticales de la parcela de aire son motivados por las fuerzas de flotación que los impulsan hacia arriba, la atmósfera es

inestable y el gradiente atmosférico se denomina super-adiabático, como se observa en la figura (2.4.1). Cuando $\Gamma = \Lambda$ la parcela de aire se encuentra en equilibrio con su entorno, la atmósfera es neutralmente estable y el gradiente atmosférico es igual al adiabático (figura 2.4.1). Por último, cuando $\Gamma < \Lambda$, las fuerzas de flotación suprimen los movimientos verticales de la parcela de aire, esto es, cuando la parcela de aire baja, crea fuerzas (flotación) que la impulsan a su posición original. En este caso la atmósfera es estable y el gradiente atmosférico es subadiabático (figura 2.4.1). Estos conceptos se resumen en la tabla (2.4.1).

Gradiente de Temperatura Ambiental	Atmósfera
Subadiabático	Estable
Superadiabático	Inestable
Adiabático	Neutralmente Estable

Tabla 2.4.1 Relación entre el gradiente de temperatura ambiental y el tipo de atmósfera.

2.5 CLASES DE ESTABILIDAD ATMOSFÉRICA

Pasquill en 1961 y posteriormente Turner en 1969 introdujeron la siguiente clasificación de la estabilidad atmosférica, la cual se utiliza como un parámetro de entrada para determinar los coeficientes dispersivos de los modelos gaussianos (sección 5.2). Para esto se considera factores tales como la velocidad del viento a 10m sobre la superficie del terreno, la radiación solar recibida y el porcentaje de nubosidad existente. De esta forma, se clasifica la estabilidad de la atmósfera en varias categorías que varían de la más inestable a la más estable, lo cual se denotará de la letra A a la F respectivamente, como se muestra en la tabla (2.5.1).

La radiación solar fuerte se refiere a un día claro en el que la posición del sol se encuentra a más de 60° sobre el horizonte. La radiación solar suave, se refiere cuando el sol se encuentra en una posición de 15° a 30°. El período nocturno abarca desde una hora después de oscurecer hasta una hora antes de amanecer.

Velocidad del viento a 10 m (m /seg)	Radiación Solar			Fracción de cielo nuboso nocturno	
	Fuerte $I > 700$	Moderada $350 \leq I \leq 700$	Suave $I < 350$	$\geq 4/8$	$\leq 3/8$
< 2	A	A - B	B		
2 - 3	A - B	B	C	E	F
3 - 5	B	B - C	C	D	E
5 - 6	C	C - D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

Inestables: A) extrema B) moderada C) ligeramente Neutral: D) neutral.
Estables: E) ligeramente F) moderada. I: Irradiación solar en W/m^2

Tabla 2.5.1 Clases de estabilidad

2.6 INVERSIÓN TÉRMICA

Otro aspecto importante en Meteorología es el fenómeno de las inversiones de temperatura ya que éstas constituyen un caso extremo de estabilidad atmosférica y crean -prácticamente- una barrera al movimiento de contaminantes. Las causas de este fenómeno son diversas y las más importantes son por radiación y por hundimiento.

En general, la **inversión térmica por radiación** es un fenómeno que se presenta como resultado del enfriamiento nocturno de la superficie terrestre. Durante las noches despejadas, la superficie se enfría rápidamente debido a que la energía

es radiada al espacio y el aire en contacto con la superficie se enfría, en tanto que el de las capas que están por encima de éste permanecen menos frías creando una inversión.

Las **inversiones por hundimiento** son asociadas con sistemas de alta presión (anticiclones). El aire en el centro del sistema de alta presión desciende mientras que el de las orillas se eleva, ver figura (2.6.1). El aire a nivel del suelo se aleja del centro hacia las orillas y el aire que se encuentra en la parte más alta se dirige, de las orillas, al centro. Esto resulta en un sistema de circulación vertical en el que el aire del centro al caer, experimenta una gran presión, se comprime y se calienta.

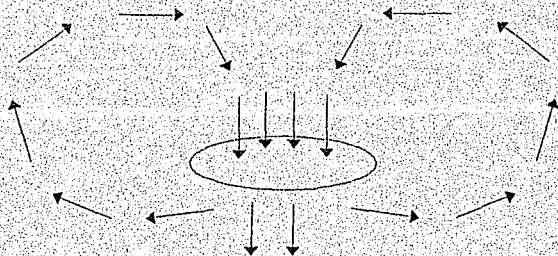


Figura 2.6.1 Comportamiento del aire en sistemas de alta presión.

Al ir bajando, el aire es cada vez más caliente e incrementa la captación de vapor de agua. Como consecuencia, en las zonas de alta presión, el ambiente es limpio y seco, con sol brillante durante el día y cielo limpio por las noches, lo cual favorece la inversión por radiación.

2.7 ALTURA DE LA CAPA DE MEZCLA

La velocidad del viento, así como la extensión en la cual pueden elevarse los contaminantes, nos da cantidad de aire en la que se pueden diluir dichos contaminantes.

Supongamos que queremos conocer la altura a la cual se eleva una parcela de aire caliente que inicialmente se encuentra a nivel del suelo. En este caso, las fuerzas de flotación la impulsarán a subir y la parcela perderá de manera adiabática, aproximadamente, $1\text{ }^{\circ}\text{C}/100\text{m}$ durante su ascenso. Si su temperatura es mayor que la del entorno, continuará subiendo y en caso contrario, bajará. Sin embargo, en un momento dado, la temperatura de la parcela será igual a la del ambiente exterior y entonces permanecerá a esa altura. Si el perfil de temperatura atmosférica es conocido, es posible determinar la altura a la que se eleva la parcela de aire proyectando la temperatura del piso hacia arriba, usando el gradiente adiabático. El punto en el que éste cruza con el perfil de temperatura atmosférico, determina la altura de capa mezcla (fig. 2.7.1).

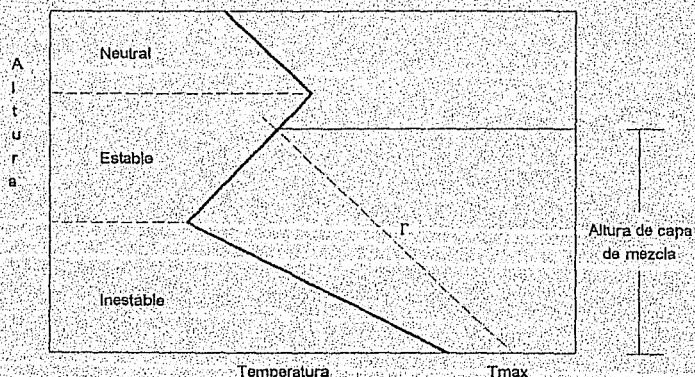


Figura 2.7.1 Máxima capa de mezcla obtenida en el punto de intersección entre el gradiente adiabático seco y el perfil de temperatura atmosférico. [Gilbert M. Masters, 1974].

2.8 VIENTOS

Los vientos desempeñan funciones diferentes dependiendo de la altura a la cual se desplazan, a nivel de tropósfera, estratósfera, mesósfera. En la capa superficial, entre 50 y 100 metros sobre la superficie de la tierra, los vientos están determinados no solo por el gradiente vertical de temperatura sino por la naturaleza misma de la superficie. Indudablemente, esta es la capa con mayor contenido de contaminantes. La turbulencia de los vientos en las capas bajas de la atmósfera se debe a la rugosidad y temperatura variable de su frontera sólida. Es a este viento turbulento al que se debe el transporte de vapor, calor y contaminantes hacia las capas superiores de la atmósfera.

VELOCIDAD PROMEDIO DEL VIENTO

A nivel del suelo, la velocidad promedio del viento se considera muy pequeña. Sin embargo, al incrementar la altura, la velocidad del viento aumenta y determinar el promedio de éste es prioritario en cualquier modelo de contaminación, vea la figura (2.8.1). Para tal efecto, se considera que el viento coincide con la dirección x y es función de la altura descrita por la ecuación (2.8.1), la cual depende tanto de la estabilidad atmosférica como de la rugosidad de la superficie;

$$\frac{\bar{u}}{\bar{u}_r} = \left(\frac{z}{z_r} \right)^p \quad (2.8.1)$$

donde p es un parámetro que varía con la estabilidad de la atmósfera, $\bar{u}$ y $\bar{u}_r$ representan la velocidad del viento en la parte más alta (z) y en la más baja (z_r), respectivamente. En el intervalo de 100 a 500 metros los vientos se determinan en función del gradiente de temperatura, las fuerzas de Coriolis y la rugosidad del terreno. Estos vientos transportan contaminantes a distancias moderadas. Por encima de ésta capa se encuentra la capa geostrófica y en ella los vientos se ven influenciados solo por gradientes horizontales de presión y fuerzas de Coriolis. En la capa geostrófica se supone que la atmósfera se encuentra libre de fricción y que tiene flujo laminar.

Durante el equinoccio, cuando el ecuador recibe con toda intensidad los rayos solares, se favorece la elevación de la masa de aire por efecto de las fuerzas de flotación (debido al calentamiento). Sin embargo este ascenso se detiene aproximadamente a la altura de la tropopausa en donde, por cambios en el gradiente vertical de temperatura, una parte de los vientos se dirige al norte y

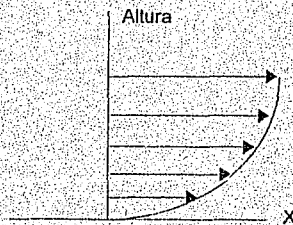


Figura 2.8.1 Perfil de velocidades del viento a diferentes alturas

otra al sur. Al alcanzar alrededor de 30° de latitud norte y sur los vientos pierden altura y regresan al ecuador formando una celda de Hadley (fig. 2.8.2). Las celdas Hadley forman una cadena entre la celda del ecuador y 30° y la celda

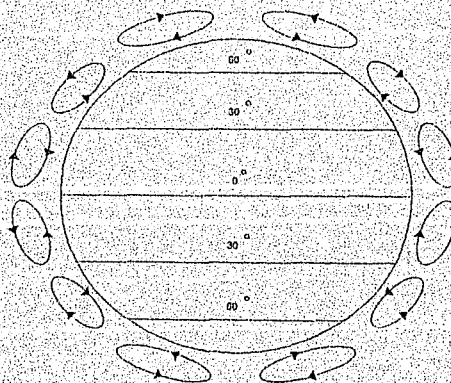


Figura 2.8.2: Circulación térmica del globo mostrando zonas de alta presión.

entre 30° y 60° de latitud y entre 60° y los polos. Vea la figura (2.8.5). Entre las celdas Hadley se generan zonas de alta presión aproximadamente a los 30° de latitud norte y latitud sur (latitudes Horse), favoreciendo la presencia de zonas desérticas. Otras zonas de alta presión se encuentran en los polos norte y sur (fig. 2.8.2).

En latitud 60° norte y sur, las corrientes en sentido ascendente, y cercanas al ecuador, se cargan de humedad a su paso por las extensiones oceánicas, de manera que al elevarse, condensan la humedad formando nubes y clima lluvioso.

2.9 MODELOS METEOROLÓGICOS COMPUTACIONALES

El viento es el factor mas importante en la dispersión de contaminantes; como la dirección y magnitud de los vientos varía con la posición y el tiempo, es necesario describirlos mediante un campo vectorial, para que sean tomados como un dato de entrada en los modelos de dispersión.

El campo de vientos se obtiene de los modelos computacionales meteorológicos, los cuales se clasifican en dos tipos: diagnóstico y pronóstico.

Los **modelos diagnóstico** se basan en la interpolación o extrapolación de datos (vientos, temperaturas, densidades) medidos por las estaciones meteorológicas para el período de tiempo que se necesite considerar. La confiabilidad de los resultados dependerá de la cantidad de información existente.

Existe una gran variedad de modelos diagnóstico que han sido desarrollados por diferentes autores: [Dickerson, 1978], [Sherman, 1978], [Davis et al, 1984] y [Zanetti, 1990]. En México se desarrolló el modelo CAPA (Código de Aproximación de Parámetros Atmosféricos) para el Valle de México [Fuentes et al, 1993], el cual se deriva del modelo DWM (Diagnostic Wind Model) [Douglas and Kessler, 1988], que se basa en la ecuación de conservación de masa.

Los **modelos pronóstico** resuelven las ecuaciones de conservación de masa, movimiento y energía para determinar el campo de vientos en tiempos posteriores. La ventaja de estos modelos es que pueden predecir la evolución

meteorológica, además de que pueden variarse los datos de entrada (por ejemplo el uso de suelo), para simular diferentes situaciones. La desventaja de estos modelos son su complejidad y que computacionalmente requieren de una mayor cantidad de tiempo que los modelos diagnósticos, sin embargo con el advenimiento de nuevas técnicas computacionales así como el incremento de la capacidad de cómputo se han convertido en una herramienta muy importante en la meteorología.

Entre los modelos pronóstico están los de [Pielke, 1983], [Yamada and Bunker, 1985], [Zanetti, 1990] y el modelo MEMO [Moussiopoulus et al, 1993]. Este último fue desarrollado inicialmente en la Universidad de Karlsruhe, y ha sido empleado como uno de los programas principales del modelo EZM (EURAD Zooming Model). MEMO se utilizó para determinar el campo de vientos en el Valle de México [Moussiopoulus et al, 1994]. Este es un modelo no hidrostático y resuelve las ecuaciones de conservación de masa (2.9.1), movimiento (2.9.2-4) y transporte de escalares (2.9.5) en forma conservativa:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (2.9.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vu)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho wu)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + R_u + C_u \quad (2.9.2)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho wv)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + R_v + C_v \quad (2.9.3)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho ww)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + R_w + C_w - p \cdot g \quad (2.9.4)$$

$$\frac{\partial(\rho \psi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u \psi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \psi)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w \psi)}{\partial z} = R_\psi + C_\psi \quad (2.9.5)$$

en donde,

u, v, w = componentes de la velocidad del viento en la dirección x, y, z .
 R_u, R_v, R_w y R_ψ = difusión turbulenta
 C_u, C_v, C_w y C_ψ = componentes de la fuerza de Coriolis
 ρ = densidad del aire
 p = presión atmosférica
 ψ = cualquier escalar (temperatura potencial, energía)

Debido a que se considera que los contaminantes no afectan la meteorología de la atmósfera (sección 2.1), se pueden resolver los modelos pronósticos independientemente de los modelos de dispersión atmosférica.

Los datos del campo de vientos obtenido por el modelo MEMO para el valle de México, son utilizados como datos de entrada del modelo de dispersión atmosférica desarrollado en este trabajo, en el ejemplo de aplicación de la sección 5.4.

III. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

3.1 DESCRIPCIÓN DEL DOMINIO

El dominio para el problema del transporte de contaminantes está dado por Ω . Este dominio es una región fija en $\mathbb{R}^3$ que además, se encuentra delimitado por una frontera $\partial\Omega$.

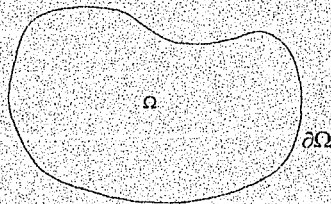
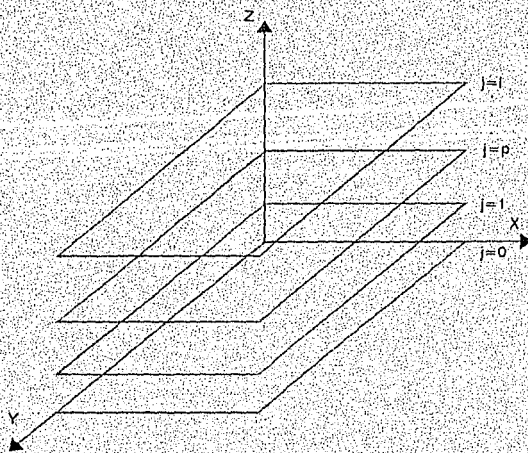
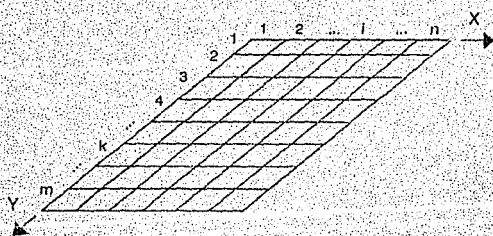


Figura 3.1.1 Dominio Ω para el problema del transporte de contaminantes.

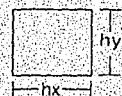
Debido a que el problema en el que se está simulando el transporte de contaminantes, está delimitado por la topografía del terreno, es necesario realizar una transformación de coordenadas (sección 2.1) para facilitar la solución numéricamente. El dominio Ω mostrado en la figura (3.1.1) es transformado a un dominio computacional que sigue la topografía y el cual debe ser discretizado para poder obtener la solución numérica. Es importante conocer la descripción de este dominio discretizado y para ello se especifican los niveles en la dirección vertical, paralelos a la frontera inferior (fig. 3.1.2-a). Cada uno de éstos niveles está formado por una malla rectangular de n celdas en x por m celdas en y (fig. 3.1.2-b). Cada celda es de tamaño h_x por h_y (fig. 3.1.2-c) y el espaciamento h_x y h_y es constante a través del plano de la malla rectangular. En la dirección vertical la distancia entre las capas varía con un factor de 1.6 (fig. 3.1.2-a).



(a)



(b)



(c)

Figura 3.1.2 Descripción del dominio discretizado.

3.2 PLANTEAMIENTO DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN ATMOSFÉRICA

En esta sección se plantea la ecuación de difusión atmosférica la cual determina la distribución de un contaminante no reactivo emitido por una fuente fija. No se consideran reacciones químicas, por lo tanto, para el dominio Ω descrito en la sección anterior, la ecuación (2.1.24) toma la forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (uc) = \nabla \cdot (K \cdot \nabla c) + S(x, t) \quad (3.2.1)$$

en donde,

$c(x, t)$ = concentración química de COx

$u(x, t) = (u, v, w)$ campo de velocidades.

K = tensor de segundo orden

$S(x, t)$ = adición general de las especies contaminantes mediante fuentes fijas.

La condición inicial es:

$$c(x, 0) = c_0(x) \quad (3.2.2)$$

Debido a la física del problema y la naturaleza del dominio, éste tiene diferentes fronteras dependiendo de la ubicación de las mismas y son:

- Para la parte superior, tipo Dirichlet, o sea, $a(x, t)c = g_1(x, t)$
- Para la parte inferior, tipo Neumann, o sea, $b(x, t) \partial c / \partial \sigma = g_2(x, t)$
- Para las caras laterales, tipo Dirichlet, o sea, $d(x, t)c = g_3(x, t)$

en donde σ indica dirección normal a la frontera del dominio y las funciones $a(x, t)$, $b(x, t)$, $g(x, t)$, son especificadas dependiendo de las condiciones del problema.

El dominio sobre el cual se va a resolver (3.2.1) está delimitado por la topografía del terreno, por lo que es necesario realizar una transformación de coordenadas como se indica en la sección 2.1. Al aplicar dicha transformación, se obtienen términos no diagonales en el tensor difusivo. Estos son eliminados para mantener la misma estructura conservativa de la ecuación, ya que como se mencionó en la sección 2.1, de esta manera se facilita la solución numérica obteniéndose buenos resultados numéricos. Entonces, la ecuación de difusión atmosférica que se resolverá numéricamente está dada por:

$$\frac{\partial H c}{\partial \tau} + \frac{\partial H u c}{\partial \xi} + \frac{\partial H v c}{\partial \eta} + \frac{\partial W c}{\partial \gamma} =$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\tilde{H} K_{xx} \frac{\partial c}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\tilde{H} K_{yy} \frac{\partial c}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\frac{K_{zz}}{\tilde{H}} \frac{\partial c}{\partial \gamma} \right) + S \tilde{H} \quad (2.1.29)$$

La incorporación de la emisión proveniente de la fuente fija, al modelo de dispersión, se realiza siguiendo el procedimiento descrito en la sección 4.3, en la que se considera: estabilidad atmosférica, elevación de la pluma, velocidad y dirección del viento. Con este procedimiento se busca tener una mejor aproximación al considerar las emisiones de las fuentes fijas en el modelo de dispersión desarrollado en este trabajo.

IV. MÉTODOS NUMÉRICOS APLICADOS EN EL MODELO COMPUTACIONAL

ANTECEDENTES

Al utilizar métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales parciales es importante considerar ciertas características de éstos, tales como estabilidad, convergencia, difusión numérica, dispersión, disipación y errores de fase, que indiquen si se está utilizando el método correcto.

Considere el siguiente problema de valores iniciales:

$$v(x,t) = P(\partial x) \quad (4.1)$$

$$v(x,0) = f(x) \quad (4.2)$$

en donde $P(\partial x)$ es un polinomio de derivadas parciales.

Sea $w(ih,nk) = w_i^n$ una aproximación a la solución exacta $v(x,t)$ en el punto (ih,nk) , en donde h es un intervalo espacial, k un intervalo de tiempo, i un entero y n un entero no negativo.

Un método de diferencias finitas que permita resolver el problema (4.1) a (4.2), se puede escribir como:

$$w_i^{n+1} = Q(S_+, S_-)w_i^n \quad (4.3)$$

en donde $Q()$ es un polinomio de operadores de diferencias finitas de corrimiento S_+ , S_- los cuales están definidos como:

$$(S_+ w_i^n) = w_{i+1}^n \quad (4.4)$$

$$(S_+ w^n) = w^n \quad (4.5)$$

ESTABILIDAD

Al utilizar un método de diferencias finitas se pretende que la solución numérica no crezca de una forma no acotada. Esto es, la solución puede crecer con el tiempo, pero no debe crecer conforme se aumenta el número de iteraciones para un mismo tiempo. Esto se conoce como estabilidad, por lo que el método de diferencias finitas (4.3) es estable si existen constantes K , β y una norma $\| \cdot \|$ tal que:

$$\|w^n\| \leq K e^{\beta t} \|w^0\| \quad (4.6)$$

Se dice que un método de diferencias finitas es incondicionalmente estable, si es estable para cualquier intervalo espacial h y de tiempo k .

CONDICIÓN DE VON NEUMAN

Una forma de determinar la estabilidad de un método de diferencias finitas es realizar un análisis mediante transformadas discretas de Fourier. Esta transformada para una función $w = w(ih, nk)$ se define como:

$$\hat{w}(\xi) = \sum_j w_j e^{i j \xi} \quad 0 < \xi < 2\pi \quad (4.7)$$

en donde w_j son los coeficientes de Fourier de la función w .

Las transformadas discretas de Fourier de los operadores de corrimiento S_+ y S_- están dadas por:

$$(\hat{S}_+ w)(\xi) = e^{-i\xi} w(\xi) \quad (4.8)$$

$$(\hat{S}_- w)(\xi) = e^{E_- \xi} w(\xi) \quad (4.9)$$

Se obtienen las transformadas de Fourier del método de diferencias finitas (4.3). Teniendo en cuenta (4.8) y (4.9), el método se puede escribir como:

$$\hat{w}^{n+1} = Q(e^{-E_- \xi}, e^{E_+ \xi}) \hat{w}^n \quad (4.10)$$

en donde el término $\rho(\xi) = Q(e^{-E_- \xi}, e^{E_+ \xi})$ se conoce como el símbolo del método de diferencias finitas. El símbolo $\rho(\xi)$ satisface la condición de Von Neuman si existe una constante $C > 0$, independiente de k, h, n, ξ , tal que,

$$|\rho(\xi)| < 1 + Ck \quad (4.11)$$

Se establece que un método de diferencias finitas es estable si y solo si la condición de Von Neuman se cumple.

ERROR DE TRUNCAMIENTO

Para determinar que tan preciso es un método de diferencias finitas, es necesario considerar los errores que se incurren al realizar la aproximación, para lo cual es necesario tomar en cuenta el error de truncamiento, lo cual se explica a continuación.

Utilizando el teorema de Taylor para expandir $v(x, t)$ alrededor del punto (ih, nk) y evaluando en $t = (n+1)k$ se tiene que:

$$v_i^{n+1} = v(ih, (n+1)k) = v_i^n + k(\partial_t v)_i^n + \frac{k^2}{2!} \partial_t^2 v(ih, t^*) \quad (4.12)$$

en donde $nk < t^* < (n+1)k$. Despejando el término que contiene la primera derivada se obtiene:

$$(\partial_t v)_i^n = \frac{v_i^{n+1} - v_i^n}{k} - \frac{1}{2} k \partial_t^2 v(ih, t^*) \quad (4.13)$$

Empleando nuevamente el teorema de Taylor para expandir $v(x, t)$ alrededor del punto (ih, nk) y evaluando en $x = (i-1)h$ y $x = (i+1)h$ se tiene que:

$$v_{i-1}^n = v((i-1)h, nk) = v_i^n - h(\partial_x v)_i^n + \frac{h^2}{2!} (\partial_x^2 v)_i^n - \frac{h^3}{6} (\partial_x^3 v)_i^n + \frac{h^4}{24} \partial_x^4 v(x^*, nk) \quad (4.14)$$

$$v_{i+1}^n = v((i+1)h, nk) = v_i^n + h(\partial_x v)_i^n + \frac{h^2}{2!} (\partial_x^2 v)_i^n + \frac{h^3}{6} (\partial_x^3 v)_i^n + \frac{h^4}{24} \partial_x^4 v(x^{**}, nk) \quad (4.15)$$

en donde $(i-1)h < x^* < ih$ y $ih < x^{**} < (i+1)h$. Sumando (4.14) y (4.15), despejando el término de segundo orden, se tiene que:

$$(\partial_x^2 v)_i^n = \frac{v_{i+1}^n - 2v_i^n + v_{i-1}^n}{h^2} - \frac{h^2}{24} (\partial_x^4 v(x^*, nk) + \partial_x^4 v(x^{**}, nk)) \quad (4.16)$$

Restando (4.13) de (4.16) se obtiene:

$$\frac{v_i^{n+1} - v_i^n}{k} - a^2 \left(\frac{v_{i+1}^n - 2v_i^n + v_{i-1}^n}{h^2} \right) - \tau_i^n = \partial_t v - a^2 \partial_x^2 v = 0 \quad (4.17)$$

Al termino τ_i^n se le conoce como error de truncamiento y para este caso esta dado por:

$$\tau_i^n = \frac{1}{2} k \partial_t^2 v(ih, t^*) - \frac{1}{24} a^2 (h^2 \partial_x^4 v(x_i^*, nk) + \partial_x^4 v(x_i^{**}, nk)) \quad (4.18)$$

CONSISTENCIA

El error de truncamiento nos ayuda a establecer qué tanto se aproxima la solución del método numérico con la ecuación diferencial parcial. Para esto se emplea la siguiente definición [Sod, 1985]. Un método de diferencias finitas es consistente hasta un tiempo T en una norma $\| \cdot \|$ si la solución del problema (4.1) a (4.2), casi satisface el método de diferencias finitas:

$$w_i^{n+1} = Qw_i^n + k\tau^n \quad (4.19)$$

en donde $\|\tau^n\| < \tau(h)$, $nk < T$, $\tau(h) \rightarrow 0$ cuando $k \rightarrow 0$.

ORDEN DE EXACTITUD

Antes de definir orden de exactitud, es necesario indicar la siguiente notación: se dice que α es de orden B , $\alpha = O(B)$, si existe un número positivo K tal que

$$|\alpha| \leq K|B| \quad (4.20)$$

El orden de exactitud está relacionado con el error de truncamiento. Un método de diferencias finitas es exacto de orden (p, q) si se tiene que:

$$\|w_i^{n+1} - Qv_i^n\| = O(h^p) + O(k^q) \quad (4.21)$$

CONVERGENCIA

Un método de diferencias finitas es convergente si la solución numérica se aproxima a la solución exacta conforme los intervalos espaciales y de tiempo utilizados en el método numérico tienden a cero. Entonces, el método de diferencias finitas (4.3) es convergente en una norma si se cumple que:

$$\|v(x, t) - w_i^n\| \longrightarrow 0 \quad \text{conforme } h, k \rightarrow 0 \quad (4.22)$$

El método de diferencias finitas (4.3) es convergente de orden (p, q).

DIFUSIÓN NUMÉRICA

Cuando se resuelven ecuaciones hiperbólicas mediante métodos numéricos tradicionales, tales como diferencias finitas o elemento finito, la solución numérica difiere de la solución exacta en una cantidad mayor a la esperada. Esto se debe a que, al aproximar la ecuación, estos métodos numéricos introducen términos que no corresponden al problema que se está resolviendo. A esto se le denomina difusión numérica [Sod, 1985]. Para ejemplificar lo anterior, considere el siguiente método de diferencias finitas:

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{k} = cD_x w_i^n = c \frac{w_{i+1}^n - w_{i-1}^n}{h} \quad (4.23)$$

el cual aproxima la siguiente ecuación,

$$\partial_t v = c \partial_x v \quad (4.24)$$

Expandiendo mediante el teorema de Taylor a $v(x, t)$, como se realizó en (4.12) y tomando en cuenta que $\partial_t^2 v = \partial_t (c \partial_x v) = c^2 \partial_x^2 v$ se tiene:

$$(\partial_t v)_i^n = \frac{v_i^{n+1} - v_i^n}{k} + \frac{kc^2}{2!} (\partial_x^2 v)_i^n + O(k^2) \quad (4.25)$$

expandiendo $v(x, t)$ como se realizó en (4.15) y despejando se tiene que:

$$(\partial_x v)_i^n = \frac{v_{i+1}^n - v_{i-1}^n}{h} + \frac{h}{2!} (\partial_x^3 v)_i^n + O(h^2) \quad (4.26)$$

Sustituyendo (4.25) y (4.26) en la ecuación (4.24), se obtiene:

$$\partial_t v - c \partial_x v = \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{k} - c \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{h} = \frac{c(ch - h)}{2} (\partial_x^2 v)_i^n + O(k^2) + O(h^2) \quad (4.27)$$

El método de diferencias finitas (4.23) es consistente con la ecuación (4.27), sin embargo el método al aproximar a la ecuación (4.24), aparece un nuevo término:

$$\frac{c^2 k - ch}{2} (\partial_x^2 v) \quad (4.28)$$

lo cual se conoce como difusión numérica. Al coeficiente $\left(\frac{c^2 k - ch}{2} \right)$ de este término se le denomina coeficiente de difusión numérica.

DISIPACIÓN

La solución de una ecuación diferencial parcial puede estar formada por la superposición de modos normales como los que se muestran a continuación:

$$w = a(\beta) e^{[\beta x - \hat{\lambda}(\beta)t]} \quad (4.29)$$

en donde $a(\beta)$ es igual a una constante, β está realmente valuada y $\hat{\lambda}(\beta)$ se selecciona de tal forma que (4.29) satisfaga la ecuación diferencial parcial. Al sustituir los modos normales (4.29) en la ecuación diferencial parcial, y resolver para $\hat{\lambda}(\beta)$, si la parte real de ésta es menor que cero para todas las β , excepto para un número finitas de éstas, se dice que la ecuación diferencial parcial es del tipo disipativo. En este caso los modos normales para los cuales la parte real de $\hat{\lambda}(\beta)$ es menor que cero decaen con el tiempo, mientras que los modos normales en los que la parte real de $\hat{\lambda}(\beta) = 0$, se mantienen, contribuyendo a la solución para tiempos grandes.

RELACIÓN DE DISPERSIÓN

En el caso de ecuaciones del tipo conservativo se tiene que la parte real de $\hat{\lambda}(\beta)$ es igual a cero, por lo que ésta se puede escribir como $\hat{\lambda}(\beta) = -i\omega(\beta)$ y al sustituirla en los modos normales (4.29), adquieren la siguiente forma:

$$w = a(\beta)e^{[i\beta x - \omega t]} \quad (4.30)$$

Los modos normales (4.30) se sustituyen en la ecuación diferencial parcial y se resuelve para $\omega(k)$, la cual se conoce como la relación de dispersión.

Si consideramos que (4.30) representa una onda que se desplaza en el tiempo, podemos identificar a $\theta = \beta x - \omega(\beta)t$ como la fase del modo normal y a $\omega(\beta)/\beta$ como la velocidad de fase.

DISPERSIÓN

Si $\omega(\beta)$ está realmente valuada para todas las β y además no es función lineal de β ($\omega''(\beta)$ es diferente de cero), entonces se tienen diferentes valores de $\omega(\beta)$ para β , por lo que los modos normales (4.30) que forman la solución de la ecuación diferencial parcial, viajan a diferentes velocidades. Esto se conoce como dispersión.

MODO DISCRETO DE FOURIER

Al analizar las ecuaciones mediante los modos normales (4.29) y la relación de dispersión $\omega(\beta)$ obtenemos el comportamiento de la ecuación diferencial parcial, sin embargo para saber como se comporta el método de diferencias finitas, es necesario definir el siguiente modo discreto de Fourier:

$$w = a(\beta)e^{[i\beta]h - \omega nk]} \quad (4.31)$$

en donde se ha utilizado j para diferenciarlo de i que es un número complejo en este caso. El modo discreto de Fourier (4.31), al igual que en el análisis de las

ecuaciones diferenciales parciales, se sustituye en el método de diferencias finitas, de donde se despeja $\omega(\beta, h, k)$, lo cual se conoce como la relación discreta de dispersión y nos indicará la dispersión y/o disipación del método.

Suponga que un método de diferencias finitas aproxima la siguiente ecuación diferencial parcial:

$$\partial_t v = c \partial_x v + a \partial_x^{q+1} v + b \partial_x^{q+2} v \quad (4.32)$$

en donde de acuerdo al valor que tenga q los coeficientes numéricos a y b se denominan como se muestra en la tabla (4.1).

$q+1$	Coficiente de dispersión	Coficiente de disipación
Par	a	b
Impar	b	a

Tabla 4.1 Coeficientes numéricos.

Resumiendo, un **método de diferencias finitas** es **dispersivo**, si la relación discreta de dispersión $\omega(\beta, h, k)$ es función de β . Un **método de diferencias finitas** es **difusivo**, si el símbolo del método $\rho(\xi)$ tiene el siguiente comportamiento:

para toda ξ se tiene que $\|\rho(\xi)\| \leq 1$ y $\|\rho(\xi)\| < 1$ para alguna ξ .

Algunos conceptos adicionales para entender el comportamiento de los métodos de diferencias finitas, son la condición de Courant-Friedrichs-Lewy y Errores de Fase.

CONDICIÓN DE COURANT-FRIEDRICHS-LEWY

Cuando se resuelven ecuaciones del tipo hiperbólico mediante métodos de diferencias finitas, el conjunto de datos iniciales que determinan la solución de la ecuación de diferencias finitas se conoce como el dominio numérico de dependencia del método. Cuando este dominio numérico incluye al dominio de dependencia de la solución de la ecuación diferencial parcial, el método está satisfaciendo la condición de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). Esta condición es necesaria para estabilidad del método.

ERRORES DE FASE

Cuando la solución numérica proporcionada por el método numérico viaja a una velocidad diferente a la solución exacta, se le denomina error de fase, debido a que la solución numérica, se encontrará adelantada o atrasada con respecto a la solución exacta. Cuando ambas soluciones viajan a la misma velocidad se dice que están en fase.

COMPORTAMIENTO DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN ATMOSFÉRICA

Debido a las características del modelo desarrollado, su tratamiento numérico exige la aplicación de diversas técnicas o métodos numéricos especiales, tales que garanticen estabilidad, convergencia y a la vez eviten difusión numérica. A fin de identificarlas, en el presente capítulo será comentado el funcionamiento de las técnicas de Selección Aleatoria, Crank-Nicolson y Pasos Fraccionados.

Considere la ecuación (3.2.1) la cual describe el problema que se resuelve en este trabajo.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (uc) = \nabla \cdot (K \cdot \nabla c) + S(x, t) \quad (3.2.1)$$

En ella se identifican los operadores advectivo y difusivo;

$$\nabla \cdot (u c_j) \quad \text{operador advectivo} \quad (4.33)$$

$$\nabla \cdot (K \nabla c_j) \quad \text{operador difusivo} \quad (4.34)$$

El operador advectivo (4.33) es hiperbólico y el difusivo (4.34) es parabólico. Esto obliga a manejar técnicas numéricas especializadas para cada caso. Se describirá solamente la naturaleza de cada uno de estos operadores ya que está vinculada con el método numérico que se utilice para resolverlos.

OPERADOR ADVECTIVO

Describe el transporte de concentraciones debido a la acción del campo de vientos. Los métodos tradicionales tales como diferencias finitas y elemento finito introducen errores de fase o de difusión. Debido a ello, en el presente trabajo la solución del operador advectivo se lleva a cabo mediante el método de selección aleatoria que evita la difusión numérica y las ondas dispersivas [Sod, 1985] como se mostrará en la sección 4.1.

OPERADOR DIFUSIVO

En cierta forma resulta más sencillo de resolver que el advectivo, ya que tiende a suavizar la solución. En este trabajo optamos por usar métodos de diferencias finitas implícitos, ya que para emplear métodos explícitos se requiere de intervalos de tiempo muy pequeños para evitar inestabilidad.

En el modelo desarrollado para la solución del operador difusivo se utilizó el método de Crank-Nicolson, el cual es un método implícito incondicionalmente estable.

Debido a la diferente naturaleza de los operadores (4.33) y (4.34) dentro de la fórmula de transporte, se aplica el método de separación de operadores, mejor conocido como método de pasos fraccionados [Yanenko, 1971]. Mediante ésta técnica se resuelve cada operador por separado y posteriormente se reúnen para determinar la solución. Otra característica de este método es su capacidad para reducir problemas multidimensionales en varios problemas de una dimensión.

4.1 MÉTODO DE SELECCIÓN ALEATORIA

Una forma de encontrar la solución numérica de sistemas de ecuaciones hiperbólicas no lineales es mediante el Método de Selección Aleatoria [Sod, 1985]. Este método es de amplia aplicación en problemas de hidrodinámica y mecánica de fluidos, ya que entre sus características está el evitar la presencia de difusión numérica, por lo cual se constituye en un método especialmente adecuado para el tratamiento de problemas de transporte atmosférico. Para discutir este método, será empleada una ecuación unidimensional del tipo hiperbólico (4.1.1) prototipo, la cual representa el cambio de las concentraciones con el tiempo $c(x, t)$, en una región debido al transporte por advección dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = u(x, t) \frac{\partial c}{\partial x} \quad -\infty < x < +\infty \quad t > 0 \quad (4.1.1)$$

cuya condición inicial es

$$c(x, 0) = f(x), \quad (4.1.2)$$

donde u = velocidad del viento.

Sea w_i^n una aproximación numérica a $c(ih, nk)$, donde h y k son intervalos de espacio y tiempo respectivamente. Si tenemos w_{i-1}^n , w_i^n y w_{i+1}^n y queremos encontrar w_i^{n+1} , generamos una secuencia de problemas de Riemann, a partir de la ecuación (4.1.1) y una condición inicial continua a tramos, como se muestra en la figura (4.1.a).

Para determinar la solución de w_i^{n+1} deben ser resueltos dos problemas de Riemann con las siguientes condiciones iniciales,

$$c_{i-}(x, nk) = \begin{cases} w_{i-1}^n & x < (i - \frac{1}{2})h \\ w_i^n & x > (i - \frac{1}{2})h \end{cases} \quad (4.1.3)$$

$$c_{i+}(x, nk) = \begin{cases} w_i^n & x < (i + \frac{1}{2})h \\ w_{i+1}^n & x > (i + \frac{1}{2})h \end{cases} \quad (4.1.4)$$

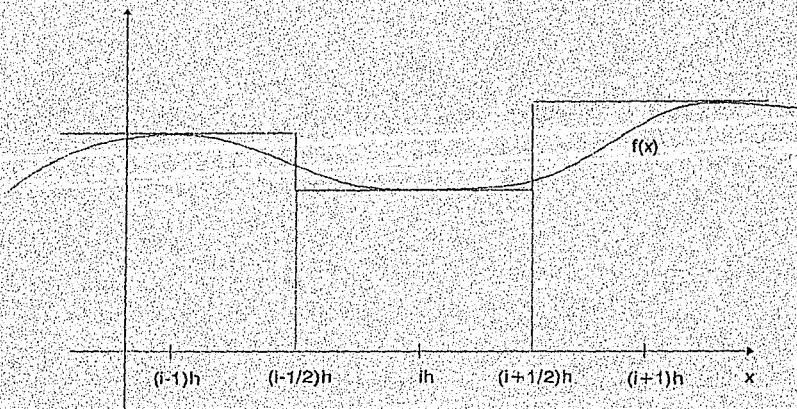


Figura 4.1.a Discretización de la condición inicial.

Las discontinuidades generadas por los problemas de Riemann viajan a través de las características con una velocidad u . Si la discontinuidad no se propaga más allá del intervalo $[ih, (i+1)h]$, es posible resolver cada uno de estos problemas de Riemann individualmente, por lo que la solución puede ser formada por superposición en una sola solución exacta $c^e(x, t)$ en el intervalo de tiempo $nk \leq t \leq (n+1)k$. En la figura (4.1.b) se esquematiza el procedimiento utilizado por el Método de Selección Aleatoria.

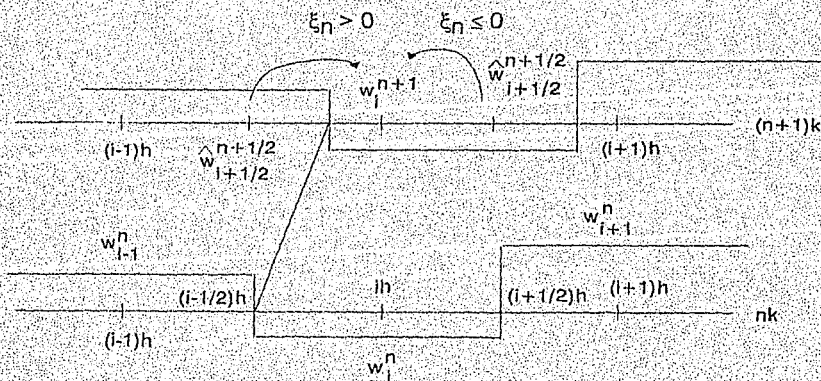


Figura 4.1.b Método de Selección Aleatoria.

Para muestrear los problemas de Riemann relacionados con (4.1.3) y (4.1.4) se utiliza una variable aleatoria uniformemente distribuida x_n en el intervalo $(-1/2, 1/2)$.

$$\hat{w}_{l-1/2}^{n+1/2} = c^e \left(\left(l - \frac{1}{2} + \xi_n \right) h, \frac{k}{2} \right) \quad (4.1.5)$$

$$\hat{w}_{l+1/2}^{n+1/2} = c^e \left(\left(l + \frac{1}{2} + \xi_n \right) h, \frac{k}{2} \right) \quad (4.1.6)$$

Finalmente, se obtiene la solución numérica aplicando el siguiente criterio:

$$w_l^{n+1} = \begin{cases} \hat{w}_{l-1/2}^{n+1/2} & \xi_n > 0 \\ \hat{w}_{l+1/2}^{n+1/2} & \xi_n \leq 0 \end{cases} \quad (4.1.7)$$

Se debe de cumplir la condición de Courant-Friedrichs-Lewi (4.1.8) para asegurar la estabilidad del método,

$$|u| \frac{k}{2h} < 1 \quad (4.1.8)$$

A continuación se resuelven una serie de experimentos numéricos, para mostrar el comportamiento del Método de Selección Aleatoria.

Ejemplo 4.1.1. Se resuelve en seguida la ecuación hiperbólica (4.1.1) con coeficientes constantes, bajo la siguiente condición inicial

$$c(x, 0) = f(x) = \begin{cases} 7 & 10 \leq x \leq 14 \\ 0 & 10 > x > 14 \end{cases} \quad (4.1.9)$$

en donde la solución exacta esta dada por

$$c(x, t) = f(x + u t) \quad (4.1.10)$$

Es importante señalar que se han utilizado un intervalo espacial de $h = 1$ Km, un intervalo de tiempo $k = 0.1$ hr y una velocidad $u = 4$ Km/hr.

En la figura (4.1.1) se compara la solución del método numérico, con la solución exacta para $t = 0.4$ hr y $t = 1.2$ hr. Se puede observar que no existe difusión numérica, ya que la condición inicial mantiene su forma original conforme viaja en el tiempo. Como el método utiliza una muestra de números aleatorios uniformemente distribuidos para determinar si la solución avanza o retrocede conforme transcurre el tiempo, la solución puede estar atrasada o adelantada con respecto a la solución exacta por un intervalo espacial, pero en promedio coincide con la solución exacta. Se observa que en $t = 0.4$ hr está desfasada por un intervalo de tiempo, mientras que en $t = 1.2$ hr coincide con la solución exacta.

Cuando los coeficientes de la ecuación (4.1.1) son variables y no son suaves, el método de selección aleatoria puede crear o desaparecer datos. Este problema se resuelve aplicando el Método de Selección Aleatoria Particular [Jazcilevich, 95].

En la resolución de la parte advectiva para el caso de dos dimensiones, se aplica el Método de Pasos Fraccionados para descomponer el problema en dos ecuaciones de una dimensión, mismas que posteriormente se solucionan mediante el Método de Selección Aleatoria. Para mostrar la implementación de este método en dos dimensiones, se realizó el experimento numérico que se muestra a continuación.

Ejemplo 4.1.2. Se considera la siguiente ecuación hiperbólica en dos dimensiones,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = u_1 \frac{\partial c}{\partial x} + u_2 \frac{\partial c}{\partial y} \quad 0 < x, y < 30 \quad (4.1.11)$$

cuya condición inicial es,

$$\begin{aligned} f(3, 3, 0) &= 9 \\ f(x, 1, 0) &= 7 & 1 \leq x \leq 5 \\ f(x, 5, 0) &= 7 & 1 \leq x \leq 5 \\ f(1, y, 0) &= 7 & 1 \leq y \leq 5 \\ f(5, y, 0) &= 7 & 1 \leq y \leq 5 \\ f(x, 2, 0) &= 5 & 2 \leq x \leq 4 \\ f(x, 4, 0) &= 5 & 2 \leq x \leq 4 \\ f(2, y, 0) &= 5 & 2 \leq y \leq 4 \\ f(4, y, 0) &= 5 & 2 \leq y \leq 4 \end{aligned} \quad (4.1.12)$$

y en donde $u_1 = 5$ Km/hr y $u_2 = 5$ Km/hr son velocidades constantes correspondientes a la dirección x , y a la dirección y , respectivamente, y que describen un campo de vientos constantes como se muestra en la figura (4.1.2).

Se puede observar en la figura (4.1.3) que la concentración inicial se mueve en la dirección del campo de vientos sin perder su forma original, debido a que no existe difusión.

Ejemplo 4.1.3. Superpondremos ahora al experimento anterior, la presencia y efecto de una fuente fija por lo que la ecuación (4.1.11) toma la forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = u_1 \frac{\partial c}{\partial x} + u_2 \frac{\partial c}{\partial y} + S(x, y, t) \quad 0 < x, y < 50 \quad (4.1.13)$$

en donde $S(x, y, t)$ es el término fuente y en este caso esta dado por,

$$S(20, 20, t) = 4 \quad t \geq 0 \quad (4.1.14)$$

Las velocidades son $u_1 = u_2 = 5$ Km/hr y la condición inicial es semejante a la del problema anterior (4.1.12). Se puede observar en la figura (4.1.4) que la concentración emitida por la fuente fija se mueve en la misma dirección que la concentración inicial, siguiendo ambas la dirección descrita por el campo de vientos. Es interesante observar que las concentraciones no pierden su forma original sino hasta el momento en que coinciden y en consecuencia de ello se incrementa el tamaño de la concentración.

y en donde $u_1 = 5 \text{ Km/hr}$ y $u_2 = 5 \text{ Km/hr}$ son velocidades constantes correspondientes a la dirección x , y a la dirección y , respectivamente, y que describen un campo de vientos constantes como se muestra en la figura (4.1.2).

Se puede observar en la figura (4.1.3) que la concentración inicial se mueve en la dirección del campo de vientos sin perder su forma original, debido a que no existe difusión.

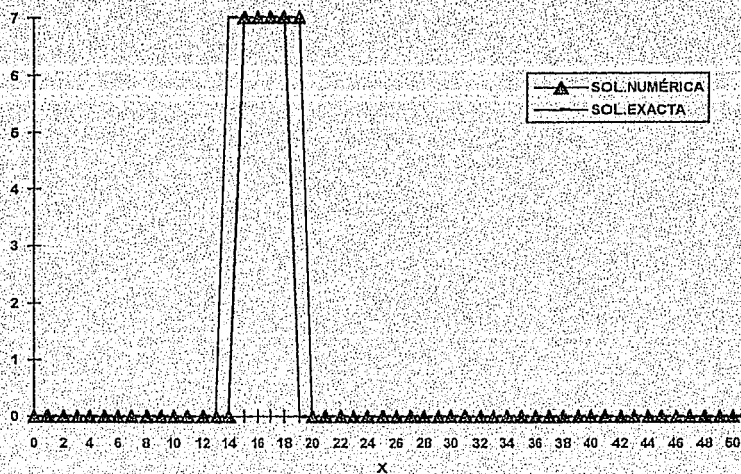
Ejemplo 4.1.3. Superpondremos ahora al experimento anterior, la presencia y efecto de una fuente fija por lo que la ecuación (4.1.11) toma la forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = u_1 \frac{\partial c}{\partial x} + u_2 \frac{\partial c}{\partial y} + S(x, y, t) \quad 0 < x, y < 50 \quad (4.1.13)$$

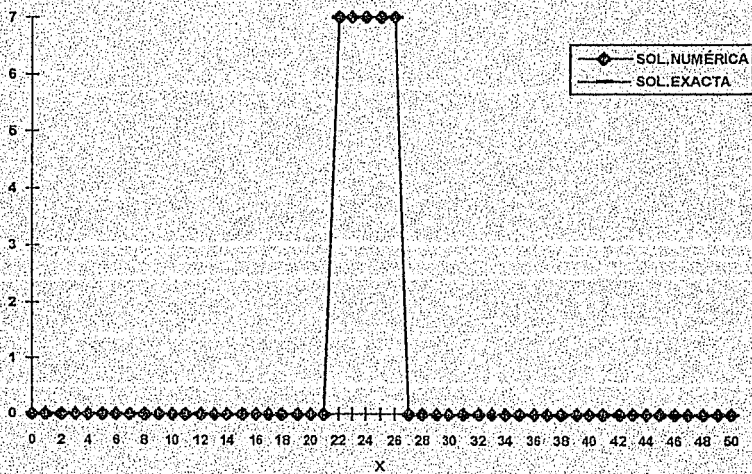
en donde $S(x, y, t)$ es el término fuente y en este caso esta dado por,

$$S(20, 20, t) = 4 \quad t \geq 0 \quad (4.1.14)$$

Las velocidades son $u_1 = u_2 = 5 \text{ Km/hr}$ y la condición inicial es semejante a la del problema anterior (4.1.12). Se puede observar en la figura (4.1.4) que la concentración emitida por la fuente fija se mueve en la misma dirección que la concentración inicial, siguiendo ambas la dirección descrita por el campo de vientos. Es interesante observar que las concentraciones no pierden su forma original sino hasta el momento en que coinciden y en consecuencia de ello se incrementa el tamaño de la concentración.



$t = 0.4$



$t = 1.2$

Figura 4.1.1 Solución numérica mediante el método de selección aleatoria y la solución exacta.

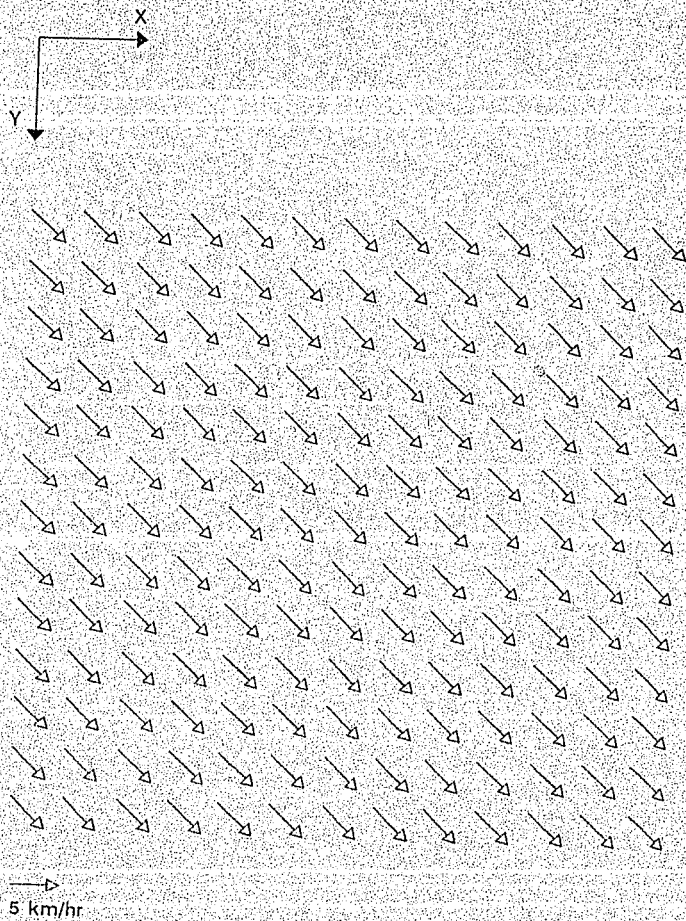


Figura 4.1.2 Campo de vientos constante para el problema de advección.
(Ejemplos 4.1.2 y 4.1.3)

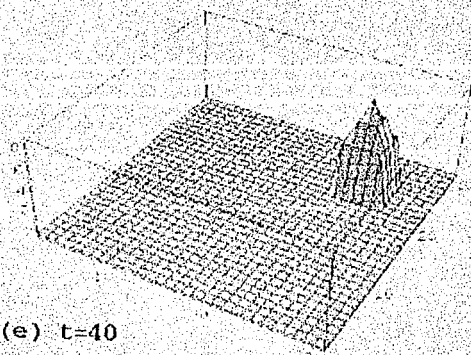
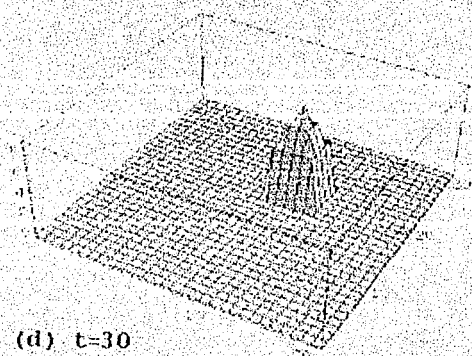
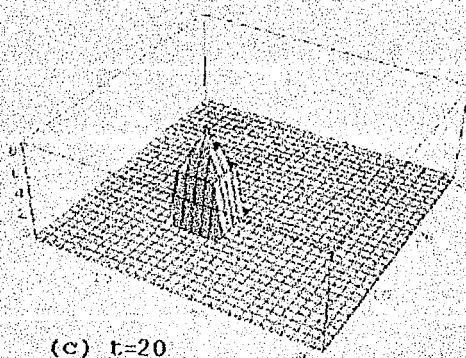
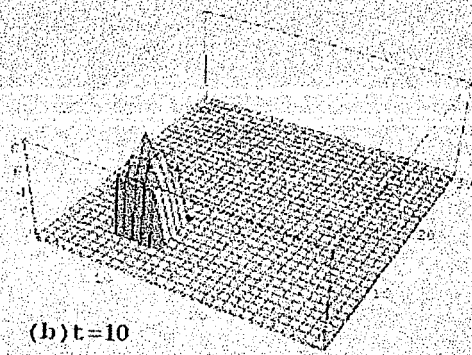
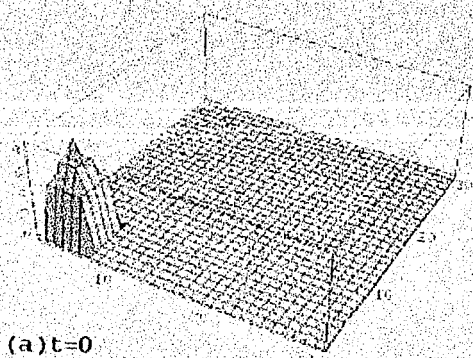


Figura 4.1.3 Solucion del problema de adveccion para diferentes tiempos.

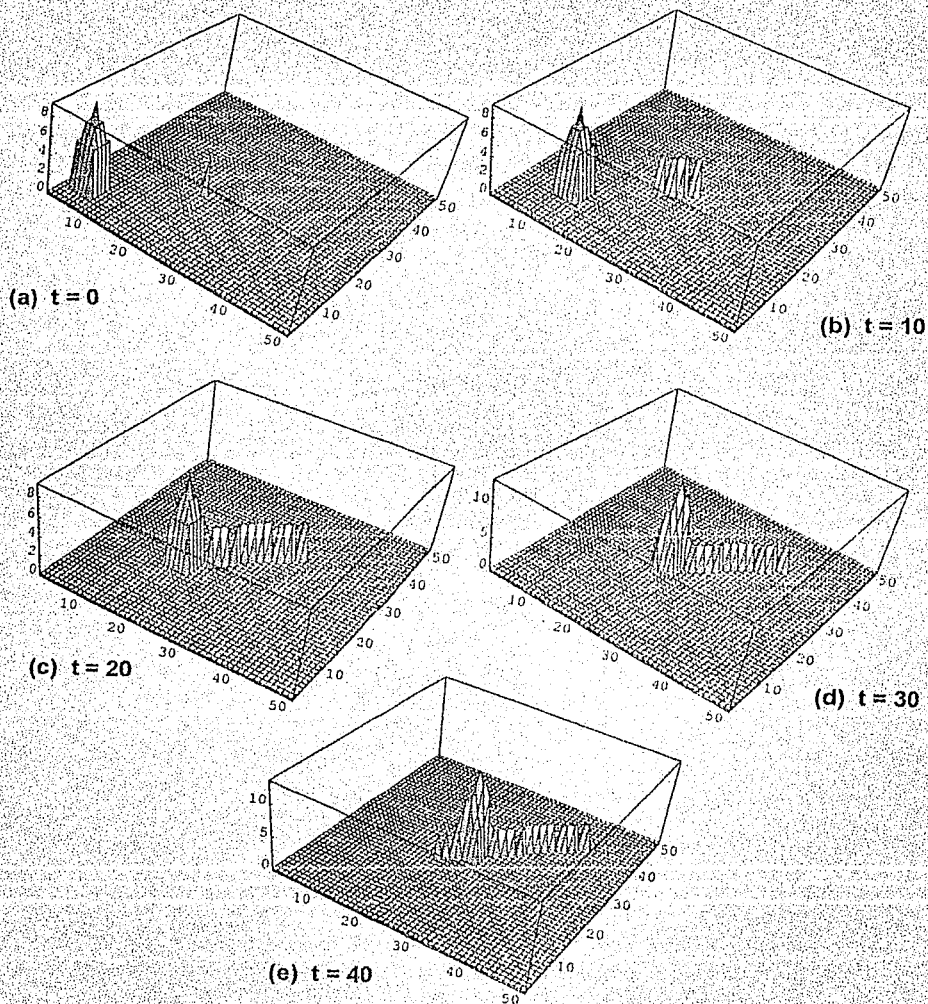


Figura 4.1.4 Solución al problema de advección con una fuente puntual para diferentes tiempos.

4.2 MÉTODO DE CRANK-NICOLSON

El método de Crank-Nicolson es un método numérico implícito, utilizado en la solución de ecuaciones del tipo parabólico, como la que se muestra a continuación,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (4.2.1)$$

El método de Crank-Nicolson se define mediante la ecuación:

$$(1 - a^2 k \alpha D_+ D_-) w_i^{n+1} = (1 + a^2 k (1 - \alpha) D_+ D_-) w_i^n, \quad (4.2.2)$$

donde $D_+ D_-$ es un operador de diferencias finitas tal que,

$$D_+ (D_- w)_i = (w_{i+1} - 2w_i + w_{i-1})), \quad (4.2.3)$$

y donde la difusividad a^2 es: $K_x / \rho c$, con K_x como coeficiente de difusión, ρ como la densidad y c como el calor específico.

Si $\alpha = 0.5$, la expresión (4.2.2) se convierte en el método de Crank-Nicolson (4.2.4).

$$w_i^{n+1} = w_i^n + (a^2 k / 2) D_+ D_- (w_i^n + w_i^{n+1}) \quad (4.2.4)$$

Una de las características del método de Crank-Nicolson es su estabilidad incondicional y su orden de exactitud (2, 2) o sea $O(k^2) + O(h^2)$. Este método ha sido aplicado al módulo que resuelve la parte difusiva.

Ejemplo 4.2.1. Para probar lo anterior, se resolvió la ecuación (4.2.1) con $a^2 = 1 \text{ m}^2/\text{s}$ y la siguiente condición inicial,

$$c(x, 0) = \sin(\pi x) \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (4.2.5)$$

en donde las condiciones de frontera Dirichlet están dadas por,

$$c(x, 0) = 0 \quad t \geq 0 \quad (4.2.6)$$

$$c(x, 1) = 0 \quad t \geq 0 \quad (4.2.7)$$

Los resultados del experimento numérico se muestran en la figura (4.2.1) para diferentes tiempos. Para ello se utilizaron un intervalo espacial de $h = 0.1$ m y un intervalo de tiempo $k = 0.01$ s, con lo que se obtuvo una $\lambda = 1$, en donde $\lambda = a^2 k / h^2$. En la figura (4.2.1) se puede observar que conforme transcurre el tiempo la curva inicial empieza a difundirse debido al gradiente de concentraciones entre esta curva y sus extremos. Esto coincide con el comportamiento físico. La solución exacta está dada por,

$$c(x, t) = \exp(-\pi^2 t) \sin(\pi x) \quad (4.2.8)$$

En la figura (4.2.2), se compara la solución analítica contra la solución numérica, y se observa que ésta se aproxima a la solución analítica considerablemente, obteniéndose un máximo error relativo del 8.6%, como era de esperarse debido al orden de exactitud del método utilizado. El error relativo se determina mediante la siguiente expresión:

$$\text{Error Relativo} = \frac{|\text{Solución Numérica} - \text{Solución Exacta}|}{\text{Solución Exacta}} \quad (4.2.9)$$

Cuando se tienen fronteras del tipo Neumann

$$\partial_x c(0, t) = g_0(x, t) \quad t \geq 0 \quad (4.2.10)$$

$$\partial_x c(1, t) = g_1(x, t) \quad t \geq 0 \quad (4.2.11)$$

para la ecuación (4.2.1), al utilizar el método de Crank-Nicolson, se emplea el siguiente procedimiento para tratar las fronteras de tal forma que el método siga siendo del orden de exactitud $O(h^2)$ e incondicionalmente estable [Sod, 1985]:

- El dominio $[0, 1]$ se discretiza en N intervalos de tamaño h , en donde $i = 0$ y $i = N$ corresponden a los puntos de la frontera $x=0$ y $x=1$ respectivamente.
- Se utiliza un operador de diferencias centradas D_0 para aproximar (4.2.10) en un tiempo $t = nk$ y $t = (n+1)k$ como se muestra a continuación:

$$D_0 w_0^n = \frac{w_1^n - w_{-1}^n}{2h} = g_0(ih, nk) \quad (4.2.12)$$

$$D_0 w_0^{n+1} = \frac{w_1^{n+1} - w_{-1}^{n+1}}{2h} = g_0(ih, (n+1)k) \quad (4.2.13)$$

y similarmente (4.2.11) se aproxima como:

$$D_0 w_N^n = \frac{w_{N+1}^n - w_{N-1}^n}{2h} = g_1(ih, nk) \quad (4.2.14)$$

$$D_0 w_N^{n+1} = \frac{w_{N+1}^{n+1} - w_{N-1}^{n+1}}{2h} = g_1(ih, (n+1)k) \quad (4.2.15)$$

-Los puntos falsos en $i = -1$ y en $i = N+1$ deberán ser eliminados. Para lo cual, se despeja w_{-1}^n y w_{N+1}^{n+1} de (4.2.12) y (4.2.13) y se sustituye en (4.2.4) con $i = 0$ obteniéndose una expresión para w_0^{n+1} .

$$w_0^{n+1} = \left[\frac{\lambda w_1^{n+1} + \lambda w_1^n + (1+\lambda)w_0^n - \lambda h(g_0(nk) + g_0((n+1)k))}{1+\lambda} \right] \quad (4.2.16)$$

-Similarmente de (4.2.14) y (4.2.15) se despeja w_{N+1}^n y w_{N+1}^{n+1} , se sustituyen en (4.2.4) con $i = N$ obteniéndose una expresión para w_N^{n+1} .

$$w_N^{n+1} = \left[\frac{\lambda w_{N+1}^{n+1} + \lambda w_{N+1}^n + (1-\lambda)w_N^n - \lambda h(g_1(nk) + g_1((n+1)k))}{1+\lambda} \right] \quad (4.2.17)$$

con lo que se cierra el sistema de ecuaciones del método de Crank-Nicolson para calcular w_i^{n+1} .

A continuación se muestra la solución de un problema de difusión en dos dimensiones. En él se utilizó el Método de Pasos Fraccionados para descomponerlo en dos problemas, uno en cada dimensión, y aplicar posteriormente el método de Crank-Nicolson.

Ejemplo 4.2.2. Considere el siguiente problema dado por la ecuación:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = a^2 \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) \quad 0 < x < 10, 0 < y < 10 \quad (4.2.18)$$

con la condición inicial,

$$c(x, y, 0) = f(x, y) = 10 \quad 0 \leq x \leq 10, 0 \leq y \leq 10 \quad (4.2.19)$$

y con las condiciones de frontera

$$c(0, y, t) = 0, c(20, y, t) = 0, \quad 0 < y < 10, t > 0 \quad (4.2.20)$$

$$c(x, 0, t) = 0, c(x, 20, t) = 0, \quad 0 < x < 10, t > 0 \quad (4.2.21)$$

En donde $a^2 = 1 \text{ m}^2/\text{s}$, los intervalos espaciales $h_x = h_y = 1 \text{ m}$, el intervalo de tiempo $k = 0.1 \text{ s}$ y $l = 1$. En la figura (4.2.3) se muestra la solución del problema planteado de (4.2.18) a (4.2.21) para diferentes tiempos, en donde se tiene un máximo error relativo del 13%. También en esta figura se puede observar que conforme transcurre el tiempo la condición inicial se dispersa.

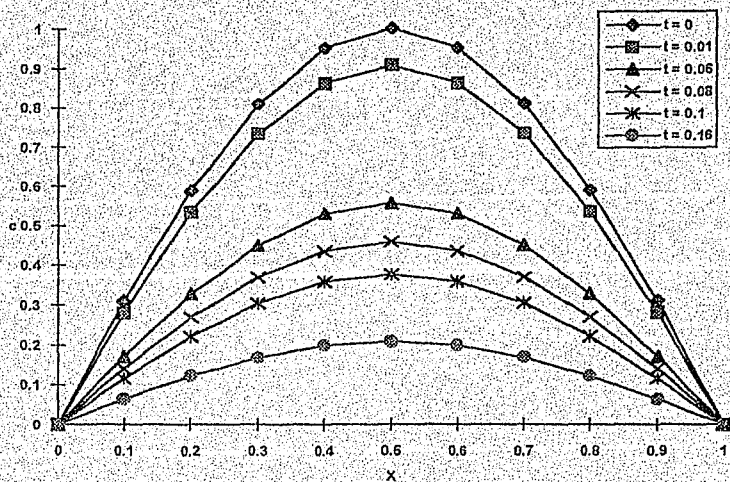


Figura 4.2.1 Problema de difusión en una dimensión para diferentes tiempos.

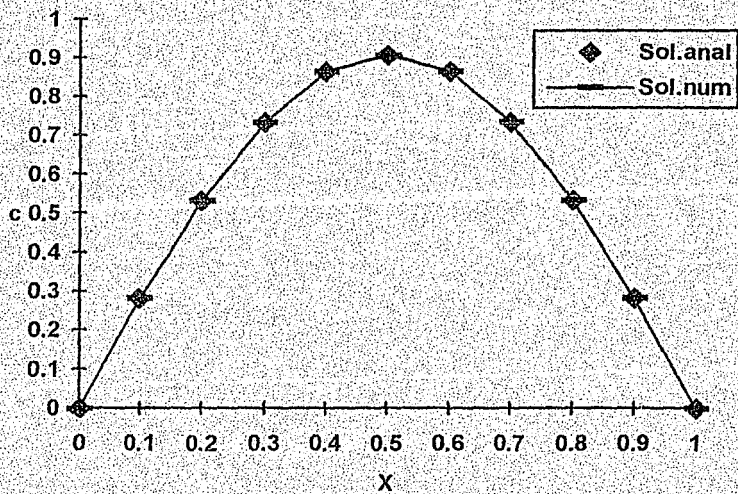
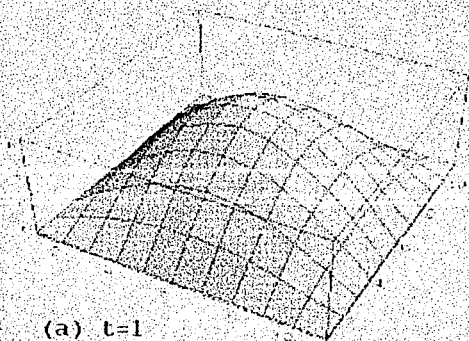
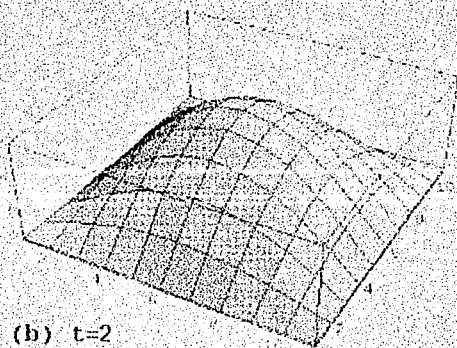


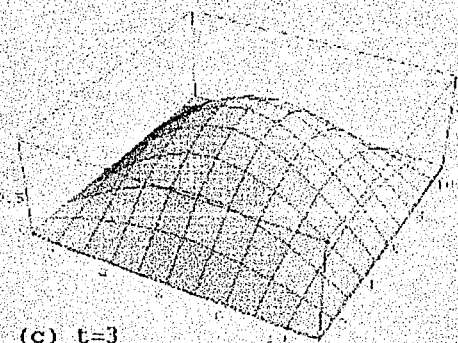
Figura 4.2.2 Comparación de la solución exacta y la numérica. ($t = 0.06$)



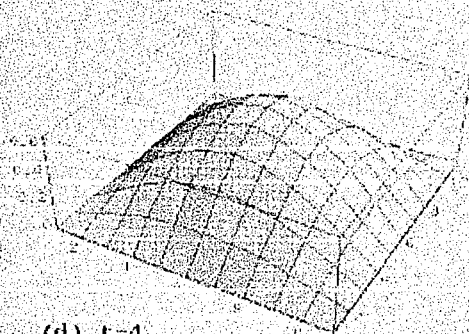
(a) $t=1$



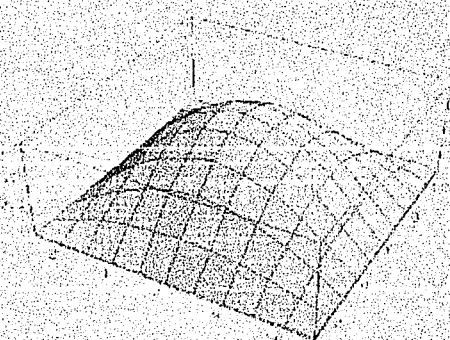
(b) $t=2$



(c) $t=3$



(d) $t=4$



(e) $t=5$

Figura 4.2.3 Solucion del problema de difusion en 2 dimensiones para diferentes tiempos.

4.3 TRATAMIENTO PARA FUENTES FIJAS

Se trata de determinar las concentraciones emitidas por fuentes fijas, para ser incorporadas más tarde en la ecuación de difusión atmosférica (3.2.1)

Los planteamientos más comunes en problemas de emisiones, consisten en asignar la concentración inicial de emisiones -esto es, cuando salen de la fuente fija- a una sola celda (a la altura efectiva de la chimenea). Esto constituye una sobreestimación, porque considera que toda la concentración emitida por la fuente en un intervalo de tiempo se acumula en una sola región delimitada por esta celda, siendo que en realidad la pluma abarca una región más amplia. El método que se presenta a continuación, nos permite llevar a cabo una mejor aproximación ya que distribuye sobre varias celdas la concentración emitida y no solo sobre una de ellas. La selección de tales celdas se realiza con base en la dirección del viento y las expresiones para calcular la elevación de la pluma. La explicación se llevará a efecto en el siguiente orden, primero explicaremos cómo determinar la elevación de la pluma, para después explicar un método especial para asignar las concentraciones emitidas por las fuentes fijas, al modelo de difusión atmosférica desarrollado en este trabajo.

ELEVACIÓN DE LA PLUMA

Esta altura se considera a partir del borde de la chimenea hasta el punto directamente sobre ésta y que coincide con la línea de centro de la pluma, como se muestra en la figura (4.3.1). Por otra parte, la elevación de la pluma sumada a la altura de la chimenea, se conoce como altura efectiva de la chimenea y se representa mediante la expresión:

$$h = h_s + \Delta h \quad (4.3.1)$$

en donde, h representa la altura efectiva de la chimenea (m), h_s es altura de la chimenea (m) y Δh es la elevación de la pluma.

Se debe tener presente que la pluma varía su comportamiento de acuerdo con los tres parámetros que se detallan a continuación:

a) Las condiciones de la fuente. Esto es, la diferencia de temperatura entre los gases de salida y el ambiente (boyancia) y velocidad de salida de los gases (momento inicial). Estas condiciones son necesarias para asegurar la salida de los gases de la chimenea. Es importante citar además que con base en estas condiciones las plumas se clasifican en boyantes, forzadas y jet. Para tener una pluma boyante, la boyancia debe ser mayor que el momento inicial. Las plumas forzadas son consecuencia de una igualdad entre boyancia y momento inicial. Finalmente, las plumas jet se producen a partir de boyancia inferior al momento inicial.

b) La velocidad del viento. La altura de la pluma será mayor o menor dependiendo de si la velocidad del viento es menor o mayor, respectivamente. Además el viento produce fuerzas que ocasionan un doblado de la pluma, generando un momento horizontal.

c) Tipo de estabilidad de la atmósfera. En una atmósfera inestable, se ayuda a que la pluma siga subiendo, mientras que en una atmósfera estable se pierde boyancia y se llega a una altura en la que la temperatura del aire es la misma que la de la pluma, con lo que se inhibe su elevación.

Se han definido conceptualmente la elevación de la pluma y algunas consideraciones respecto a su comportamiento. Sin embargo, para llevar a efecto el cálculo de ésta, es necesario resolver sistemas acoplados de ecuaciones de masa, momento y conservación de energía. Otra alternativa para calcular la elevación de la pluma, es mediante la expresión (4.3.2) cuya aplicación evita resolver los sistemas de ecuaciones citados anteriormente. Los valores de los parámetros de esta expresión son tomados de la tabla (4.3.1).

$$\Delta h = \frac{Ex^b}{U^a} \quad (4.3.2)$$

Dado que estamos tratando el problema de una planta termoeléctrica, las fuerzas de boyancia son dominantes sobre las fuerzas de momento inicial, de manera que los datos considerados en la tabla (4.3.1), para ser empleados en la ecuación (4.3.2), solo pueden aplicarse a cálculos relativos a plumas boyantes.

PLUMAS DOMINADAS POR FUERZAS DE BOYANCIA

Referencia	Estabilidad	a	b	E	Condiciones
ASME (1973)	Neutral e inestable	1	0	$7.4(Fh_s^2)^{1/3}$	
	Estable	1/3	0	$2.9(F/S_1)^{1/3}$	
Briggs (1969, 1971, 1974)	Neutral	1	2/3	$1.6F^{1/3}$	$F < 55, x < 49F^{5/8}$
	e inestable	1	0	$21.4F^{3/4}$	$F < 55, x \geq 49F^{5/8}$
		1	2/3	$1.6F^{1/3}$	$F \geq 55, x < 119F^{2/5}$
		1	0	$38.7F^{3/5}$	$F \geq 55, x \geq 119F^{2/5}$
	Estable	1/3	0	$2.4(F/S_2)^{1/3}$	
		0	0	$5F^{1/4}S_2^{-3/8}$	
		1	2/3	$1.6F^{1/3}$	

Tabla 4.3.1. Compendio de fórmulas para elevación de la pluma (Hanna et. al, 1982)

En donde,

d = diámetro de la chimenea, m.

F = parámetro del flujo de boyancia, $gd^2 V_s(T_s - T_a)/4T_s$, m^4/s

g = aceleración de la gravedad, 9.807 m/s^2

p = presión atmosférica, kPa

$p_0 = 101.3 \text{ kPa}$

$S_1 = (g \partial q / \partial z / T_a)(p/p_0)^{0.29}$, $1/s^2$

$S_2 = (g \partial q / \partial z) / T_a$, $1/s^2$

T_a = temperatura del ambiente a la altura de la chimenea, K

T_s = temperatura de salida a la altura de la chimenea, K

$\Delta T = T_s - T_a$

V_s = velocidad de salida de la chimenea, m/s

MÉTODO DE TRATAMIENTO ESPECIAL PARA FUENTES FIJAS

En los siguientes párrafos será detallado el método, y en ellos veremos la aplicación de las fórmulas que se generan apartir de la ecuación (4.3.2) y la tabla (4.3.1).

1. Ubicación de la fuente. Se coloca la fuente fija en un nodo de la malla del dominio computacional (39 x 39 km, con celdas de 1 x 1 km), de manera tal que la distancia de la fuente al nodo más próximo es siempre de alrededor de 1 km.

2. Campo de velocidades. El campo de velocidades es variable en el tiempo y en el espacio en el dominio computacional. Los datos meteorológicos que se tienen para el Valle de México están dados para celdas de 3 x 3 km, de ahí que si las celdas empleadas son de 1 x 1 km, se generan subdominios de 3 x 3 km con campos de velocidades constantes.

3. Selección de nodos. Se seleccionan éstos, en el plano horizontal y se les agrega la concentración emitida por la pluma como se muestra en la figura (4.3.2), con base en el siguiente criterio:

a) Si el vector de velocidad del campo de vientos (para $t = 1$ hora) correspondiente a la fuente fija, coincide con alguno de los nodos próximos (figura 4.3.2-a), se selecciona este nodo y se determina la distancia de este a la fuente fija (xd_{isn}) y sus coordenadas (x_n, y_n).

b) Si el vector de velocidad correspondiente a la fuente fija, no coincide con los nodos próximos (figura 4.3.2-b), se selecciona el más cercano a la línea de centros. Se determina la distancia de éste a la fuente fija (xd_{isn}) y sus coordenadas (x_n, y_n).

En ambos casos (a) y (b) se determina el tiempo (t_p) que tardaría una partícula en llegar de la fuente al nodo más próximo.

4. De acuerdo al tamaño del intervalo de tiempo k , se determina el número de intervalos de tiempo (nt) que existen en una hora. Utilizando la concentración QT emitida por la fuente fija en una hora y el número de intervalos k existentes en una hora, se efectúa el cálculo de la concentración Q_i correspondiente a un intervalo de tiempo.

$$nt = 1/k$$

(4.3.3)

$$Q_i = QT/nt \quad (4.3.4)$$

Se calcula el número de intervalos de tiempo k (nte) necesarios para que una partícula llegue al nodo más próximo.

$$nte = tp/k \quad (4.3.5)$$

Con esto se obtiene el porcentaje de concentración EQf y EQn correspondiente a la fuente fija y al nodo seleccionado respectivamente en el plano horizontal.

$$EQf = nte \, Q_i \quad (4.3.6)$$

$$EQn = (nt - nte) \, Q_i \quad (4.3.7)$$

5. Utilizando las fórmulas (4.3.1) y (4.3.2), se establece la altura efectiva del nodo seleccionado. La fórmula (4.3.2) es válida para un campo de vientos constantes, restricción que se cumple de acuerdo a los puntos (2) y (3). Se utiliza la distancia x_{dis} y la velocidad del viento a la altura de la fuente fija.

6. Descripción del plano vertical. Se toma la posición del nodo más cercano a la chimenea, a la altura de ésta y en la dirección vertical (figura 4.3.2-a). Igual se procede para el nodo de coordenadas (x_n, y_n) , cuyo plano vertical será tomado en dirección a éste y a la altura efectiva de la chimenea (figura 4.3.2-b). Al nodo correspondiente a la chimenea le será aplicada una concentración EQf y al nodo correspondiente al de coordenadas (x_n, y_n) se le aplica una concentración EQn.

7. Se repiten los pasos (3 a 6) para la siguiente hora, utilizando los datos de viento correspondientes. La consideración que utilizada para determinar el tiempo que tarda el recorrido de una partícula, de la fuente al nodo seleccionado, solo considera transporte por advección, lo cual es una buena aproximación, ya que si comparamos el transporte debido a la advección respecto a la difusión, en la dirección en que se emiten los contaminantes viento abajo, es mucho mayor. Esta consideración es también utilizada por el Modelo Gaussiano.

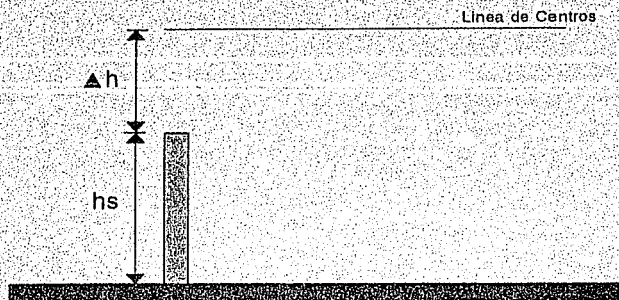


Figura 4.3.1 Elevación de la pluma.

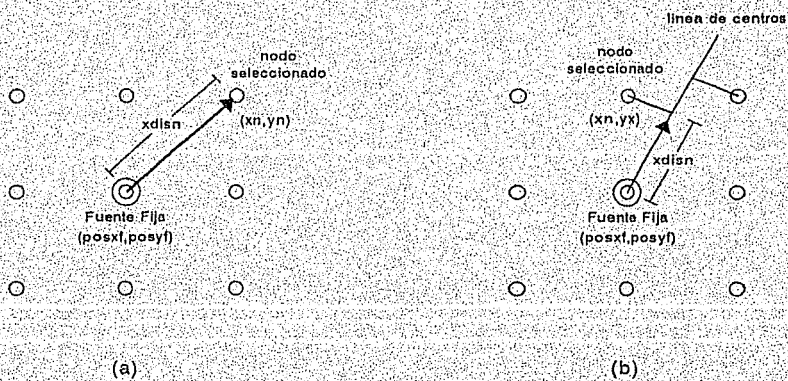


Figura 4.3.2 (a) El vector velocidad coincide con el nodo próximo.
(b) El vector velocidad no coincide con los nodos próximos.

V. SOLUCIÓN DEL MODELO TRIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE PARA FUENTES FIJAS

5.1 SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN ATMOSFÉRICA

La ecuación de difusión atmosférica (3.2.1) que determina la dispersión de contaminantes no reactivos emitidos por fuentes fijas, esta dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (uc) = \nabla \cdot (K \cdot \nabla c) + S(x, t) \quad (3.2.1)$$

Debido a que la frontera fija está determinada por la topografía del terreno, se realiza una transformación de coordenadas que sigue la superficie de éste, en la que se busca que la ecuación (3.2.1) siga manteniendo su misma estructura conservativa, con lo que se facilita su solución numérica, como se explicó en la sección 2.1. Por lo que la ecuación de difusión atmosférica (3.2.1) considerando la transformación de coordenadas y despreciando los términos fuera de la diagonal (ver sección 2.1) adquiere la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H c}{\partial \tau} + \frac{\partial H u c}{\partial \xi} + \frac{\partial H v c}{\partial \eta} + \frac{\partial W c}{\partial \gamma} = \\ \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\hat{H} K_{xx} \frac{\partial c}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\hat{H} K_{yy} \frac{\partial c}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\frac{K_z}{H} \frac{\partial c}{\partial \gamma} \right) + S \hat{H} \end{aligned} \quad (2.1.29)$$

Esta ecuación (2.1.29) se resuelve numéricamente utilizando el método de pasos fraccionados para resolver cada componente por separado. Para la solución de la parte advectiva en tres dimensiones (x,y,z), se aplicó el método de selección aleatoria particular [Jazcilevich,1995]. Este método es una modificación del método de selección aleatoria y con él se evita la creación o destrucción de datos. Para la solución de la parte difusiva se empleó el método de Crank-Nicolson.

adoptando fronteras de tipo Dirichlet en la dirección (x,y). En la dirección vertical se dispusieron, una frontera fija de Neumann en la parte inferior y una frontera móvil de Dirichlet en la parte superior. En el caso de ésta última, su posición está dada por la altura de la capa de mezcla, misma que varía con la posición y el tiempo.

En la solución de la estructura vertical se utilizaron seis capas paralelas a la frontera inferior. La primera de éstas se coloca a una altura de 100 m. Para las siguientes se asignó un factor de espaciamiento de 1.6. Cada capa está dividida por dos celdas computacionales, con lo cual tenemos doce niveles o subcapas. Siguiendo este tipo de estructura vertical, la inclusión de los datos disponibles tales como campo de vientos y altura de capa de mezcla, se facilita de manera significativa. Es importante citar que ésta metodología ha sido aplicada -entre otros modelos- de manera exitosa en el Modelo Metropolitano de Gestión de la Calidad del Aire [Fuentes et al, 93].

Para llevar a efecto la incorporación de la fuente fija, la solución de la ecuación de difusión atmosférica (3.2.1) requiere de la aplicación del principio de Duhamel [Zauderer, 89]. Este principio descompone una ecuación no homogénea, en dos: una ecuación homogénea y otra ecuación para la cual se toman el término fuente y las condiciones iniciales. Se resuelve para un intervalo de tiempo, de manera que la solución de la ecuación no homogénea está dada por la superposición de las soluciones de la ecuación homogénea para diferentes impulsos de tiempo. Se aplica éste principio junto con el método de pasos fraccionados. De ésta manera se obtiene la concentración emitida en un intervalo de tiempo y se incorpora a la ecuación de difusión atmosférica.

Lo anterior fue realizado considerando la altura efectiva de la pluma cuya emisión fue integrada al nivel más próximo y siguiendo el método de tratamiento para fuentes fijas (sección 4.3). Si la altura efectiva de la pluma, rebasa la altura de capa de mezcla, se toma como frontera superior la capa más elevada. En caso contrario se toma la altura de capa de mezcla como frontera superior.

En la figura (5.1.1) se presenta la estructura del Modelo Computacional desarrollado en el que aparece cada una de la etapas explicadas en esta sección.

El Modelo de Transporte Atmosférico desarrollado será probado en los siguientes casos:

- comparación con el modelo gaussiano,
- ejemplo utilizando un campo de vientos variable,
- ejemplo para una termoeléctrica bajo condiciones meteorológicas del Valle de México.

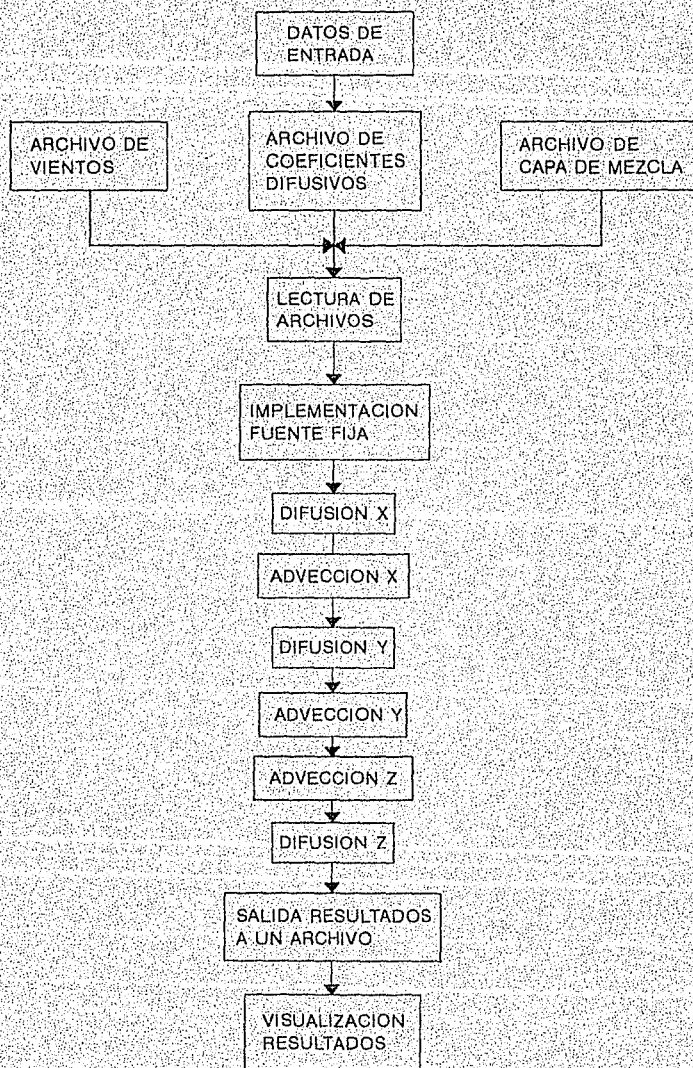


Figura 5.1.1 Diagrama del Modelo Computacional

5.2 MODELO NUMÉRICO DESARROLLADO Y MODELO GAUSSIANO.

El modelo gaussiano determina la dispersión de concentraciones, emitidas por una fuente bien sea ésta continua o no continua. Su simplicidad característica, lo ha convertido en un modelo popularmente empleado por la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (E.P.A) y constituye un punto de comparación para otros modelos numéricos. En este capítulo, el modelo atmosférico desarrollado, será comparado con el gaussiano, a fin de comprobar su buen funcionamiento. Al realizar la comparación se utilizaron las condiciones propias que el modelo gaussiano exige: un campo de vientos constante, que no existan reacciones químicas, que la turbulencia sea homogénea y además, solo se considera para el caso estacionario.

Para llevar a efecto la comparación, en primera instancia se explicará el modelo gaussiano. A continuación serán indicados los términos bajo los cuales se hace la comparación. Finalmente se comparan ambos modelos.

EXPLICACIÓN DEL MODELO GAUSSIANO

Se tiene una fuente fija que emite concentraciones las cuales son transportadas en la dirección del viento a velocidad constante U . En la figura (5.2.1) se observa una pluma en la cual se ha señalado una sección localizada a una distancia x_d de la fuente [Perkins, 74]. Para un instante de tiempo, el perfil de concentraciones de la sección, es irregular; sin embargo, si se toma un promedio de ésta por un período de tiempo grande, 1 hora por ejemplo, el perfil de concentraciones adquiere la forma de una campana, que puede ser aproximada mediante una función gaussiana.

Se considera que en la dirección del viento U , las concentraciones $c(x,y,z)$ son transportadas principalmente por éste, por lo que es posible despreciar la difusión de las concentraciones respecto a la advección en la dirección x . Además se considera que la difusión en la dirección y , y en la dirección z son independientes,

por lo que las concentraciones pueden ser aproximadas mediante el producto de dos funciones gaussianas, como las que se muestran a continuación:

$$c(x, y, z,) \propto \left(\frac{B}{2\pi\sigma_y\sigma_z} \right) \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right) \left(\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{z}{\sigma_z}\right)^2\right) \right) \quad (5.2.1)$$

donde B es una constante, σ_y , σ_z son las desviaciones estandar en cada una de las direcciones. En la ecuación (5.2.1) se debe de cumplir la conservación de masa, o sea que el flujo de concentraciones Q que pasa por una sección transversal de la fuente, debe ser el mismo, o sea que para cada x se tiene que:

$$Q = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} c(x, y, z) U dy dz \quad (5.2.2)$$

Sustituyendo la ecuación (5.2.1) en la ecuación (5.2.2), se tiene,

$$Q = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{BU}{2\pi\sigma_y\sigma_z} \right) \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right) \left(\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{z}{\sigma_z}\right)^2\right) \right) dy dz \quad (5.2.3)$$

De la ecuación (5.2.3) se obtiene la constante $B = Q/U$, misma que se sustituye en la ecuación (5.2.1) y nos da por resultado la expresión (5.2.4),

$$c(x, y, z, H) = \left(\frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z U} \right) \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right) \left(\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H}{\sigma_z}\right)^2\right) + \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\sigma_z}\right)^2\right) \right) \quad (5.2.4)$$

en donde,

$c(x, y, z, H)$ = concentración en la posición (x,y,z), g/m³

(x, y, z) = posición respecto a la pluma donde se desea conocer la concentración.

Q = emisión de la fuente, g/m^3

H = altura efectiva de la pluma, m.

σ_y, σ_z = parámetros de dispersión en la dirección y, z, m.

Esta expresión determina las concentraciones de especies no reactivas en dirección del viento y a cierta distancia de la fuente utilizando el sistema de coordenadas mostrado en la figura (5.2.2).

Se consideró reflexión total en el piso, por lo que se supone que existe una fuente imaginaria invertida bajo la superficie, y en consecuencia los términos que contienen $(z - H)$ y $(z + H)$, representan la contribución de la fuente real y de la fuente imaginaria, respectivamente.

La anterior fórmula considera reflexión total en el piso. Los coeficientes de dispersión σ_y, σ_z se determinan experimentalmente y dependen de la estabilidad atmosférica y la distancia respecto a la pluma en la dirección del viento. La estabilidad atmosférica se determinó utilizando la estimación que realizó Pasquill para determinar el tipo de estabilidad atmosférica (sección 2.5), en la cual se necesita conocer la radiación solar existente y la velocidad del viento a 10m de la superficie. Para determinar σ_y y σ_z se utilizan correlaciones que están basadas en la clasificación que realiza Pasquill de la estabilidad atmosférica [Seinfeld, 86] y las cuales estan dadas como,

$$\sigma_y = \exp [I_y + J_y \ln x + K_y (\ln x)^2] \quad (5.2.5)$$

$$\sigma_z = \exp [I_z + J_z \ln x + K_z (\ln x)^2] \quad (5.2.6)$$

En donde los coeficientes I_y, J_y, K_y, I_z, J_z y K_z estan dados por la tabla (5.2.4) [Turner, 69].

Coefficiente	A	B	C	D	E	F
I _y	-1.104	-1.634	-2.054	-2.555	-2.754	-3.143
J _y	0.9878	1.035	1.0231	1.0423	1.0106	1.0148
K _y	-0.0076	-0.0096	-0.0076	-0.0087	-0.0064	-0.007
I _z	4.679	-1.999	-2.341	-3.186	-3.783	-4.49
J _z	-1.7172	0.8752	0.9477	1.1731	1.301	1.4024
K _z	0.277	0.0136	-0.002	-0.0316	-0.0454	-0.054

Tabla 5.2.1 Coeficientes de las correlaciones para determinar los coeficientes de dispersión σ_y y σ_z .

COMPARACIÓN CON EL MODELO GAUSSIANO

Para realizar la comparación del modelo numérico desarrollado con el modelo gaussiano de forma válida, el modelo numérico se corrió considerando solamente advección en la dirección del viento (dirección x), difusión en la dirección y, y en la dirección z, y se consideró reflexión total en el piso y una concentración en la frontera superior, con lo que se consideró una frontera de tipo Neumann en el suelo y frontera Dirichlet en la parte superior. También se buscó que los coeficientes de dispersión σ_y y σ_z fueran análogos a los coeficientes de difusión K_{yy} y K_{zz} , lo cual se consiguió mediante las relaciones siguientes [Zanetti, 90].

$$\sigma_y = \sqrt{2K_{yy} / U} \quad (5.2.7)$$

$$\sigma_z = \sqrt{2K_{zz} / U} \quad (5.2.8)$$

Se corrieron los modelos numérico y gaussiano, utilizando las suposiciones mencionadas anteriormente para una fuente fija continua, con una velocidad de

5 m/s en la dirección x , y se comparó para diferentes puntos x_i de la línea de centros de la pluma como se muestra en la figura (5.2.3). En esta figura se puede observar que los resultados de los dos modelos son muy semejantes, obteniéndose un máximo error relativo del 3.7%, como era de esperarse.

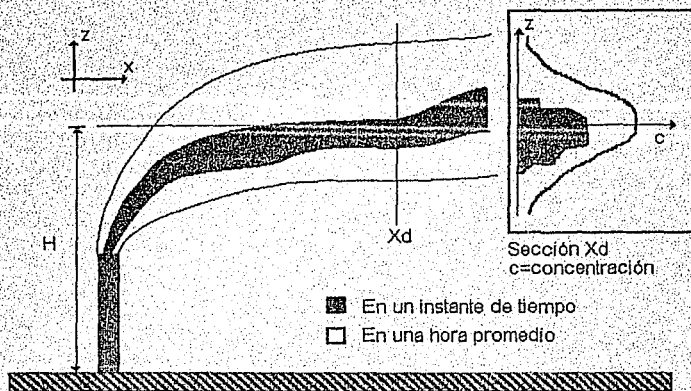


Figura 5.2.1 Distribución de las concentraciones para un instante de tiempo y para una hora promedio.

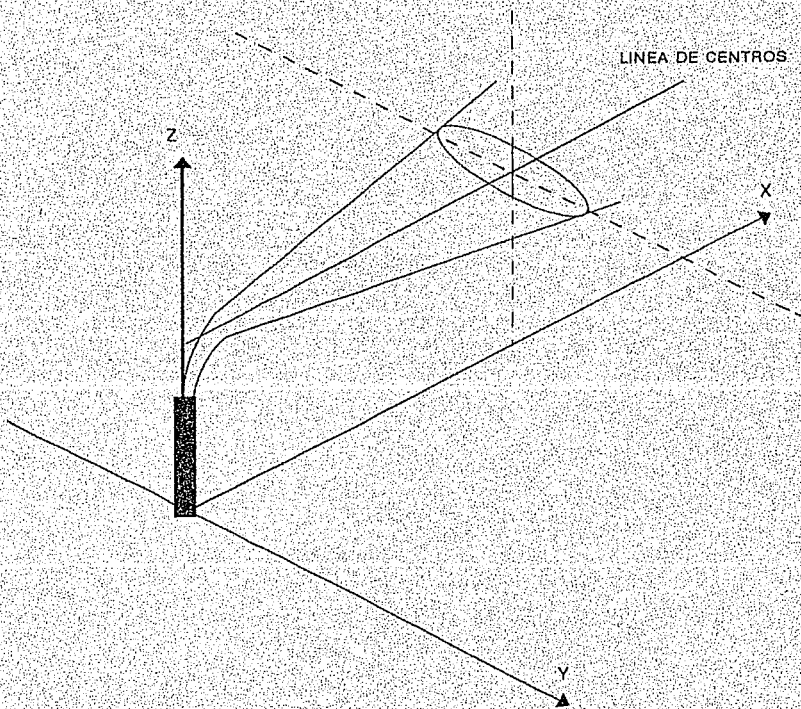


Figura 5.2.2 Sistema de referencia del modelo gaussiano.

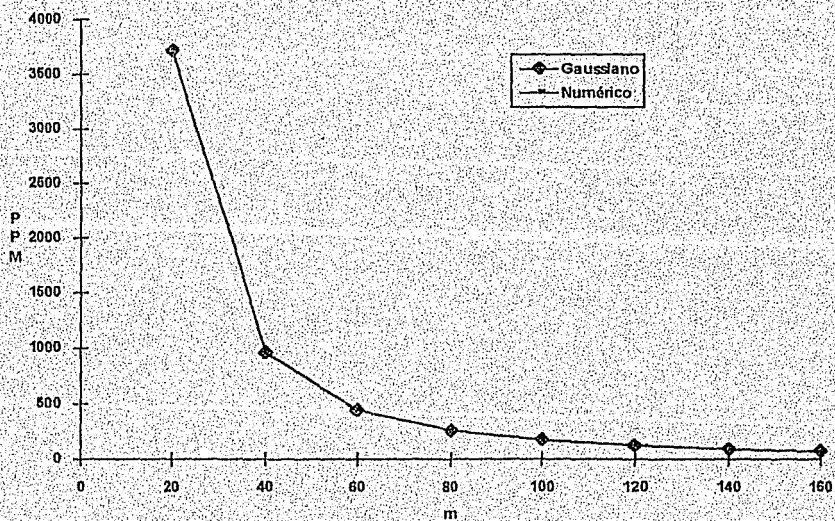


Figura 5.2.2 Comparación entre el Modelo Numérico Desarrollado y el Gaussiano (línea de centros).

5.3 EJEMPLO CONSIDERANDO UN CAMPO DE VIENTOS VARIABLE

El modelo de dispersión se correrá considerando un campo de vientos variable de prueba, el cual fue diseñado para demostrar en forma cualitativa que la pluma sigue la dirección de un campo de vientos variable. En este caso el modelo resuelve la ecuación de difusión atmosférica (3.2.1) como se describe en la sección 5.1, pero con la diferencia de que se considera una frontera fija en la parte superior en lugar de una móvil en la estructura vertical, y se le proporciona la altura efectiva en vez de que el modelo la determine. El dominio se consideró de la forma en que está descrito en la sección 3.1, en donde el tamaño de la malla en el plano horizontal se tomó de 39 x 39 celdas rectangulares de 1 km, con 6 capas en la dirección vertical, utilizando la forma de la estructura vertical de la sección 5.1. El campo de vientos utilizado se muestra en la figura (5.3.1), el cual es un campo vectorial no divergente, y se generó mediante las siguientes funciones,

$$u = \left(8 - \frac{x}{2} \right) \quad (5.3.2)$$

$$v = \left(\frac{1+y}{2} \right) \quad (5.3.1)$$

La fuente fija fue localizada en la celda (5, 5), en donde la concentración se suministra a una altura de 100m. Se resolvió para diferentes tiempos. En la figura (5.3.2) se muestra en vista de planta, un corte transversal a una altura de 100m, en donde se puede observar que la pluma sigue la dirección del campo de vientos.

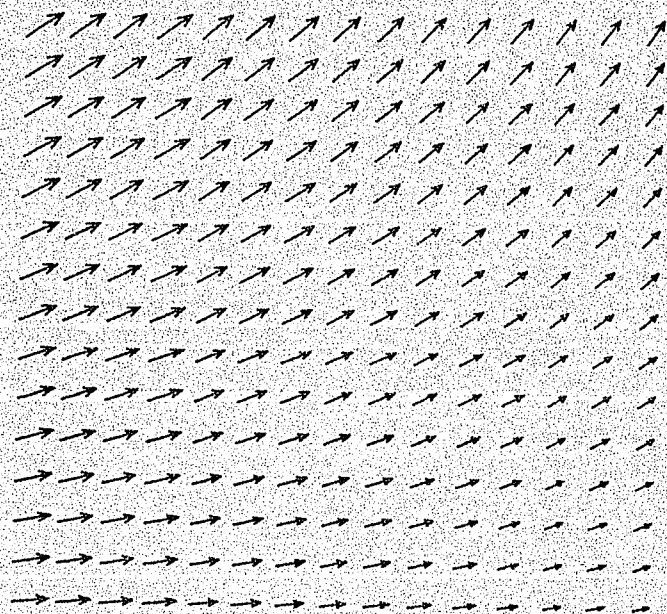


Figura 5.3.1 Campo de vientos variable del ejemplo 5.3

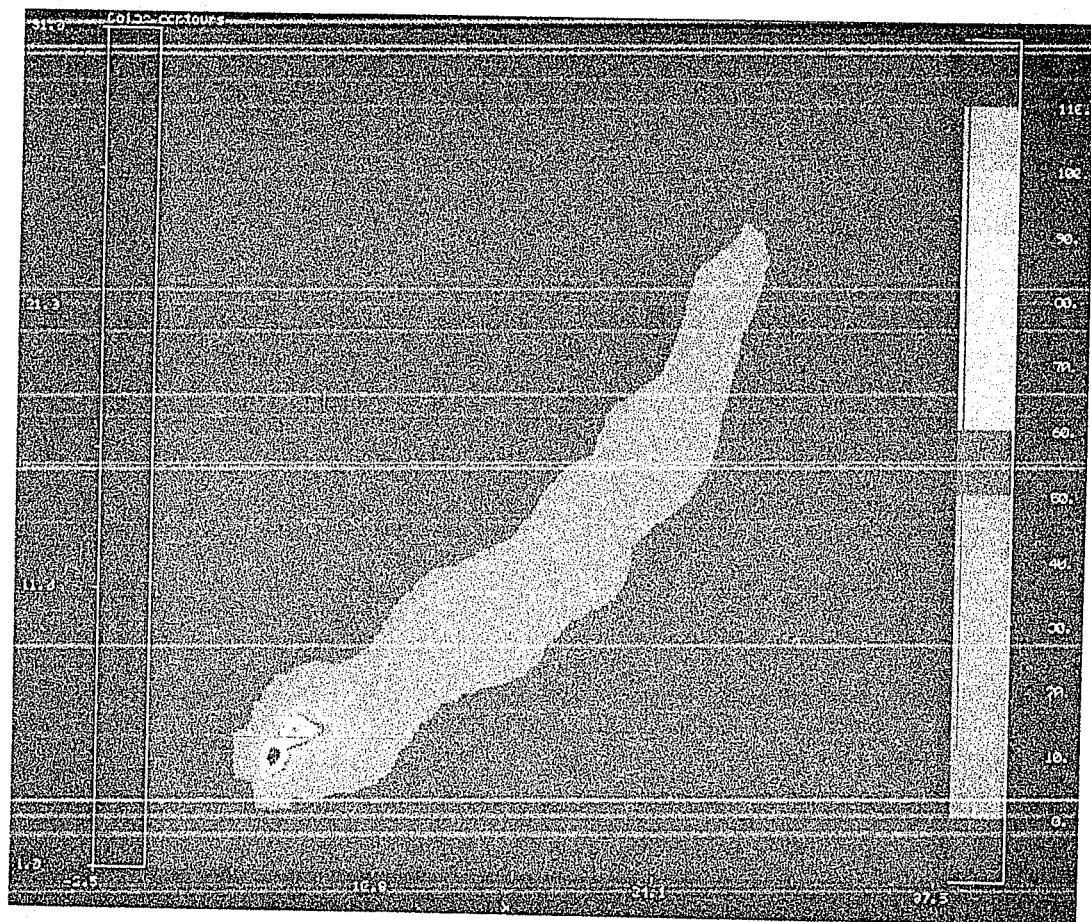


Figura 5.3.2.

5.4 EJEMPLO PARA UNA TERMOELÉCTRICA BAJO LAS CONDICIONES METEOROLÓGICAS DEL VALLE DE MÉXICO.

El modelo de dispersión para fuentes fijas, se correrá con datos técnicos reales de una termoeléctrica, bajo las condiciones meteorológicas del Valle de México.

Se resolvió la ecuación (3.2.1) como se indica en la sección 5.1, en donde el dominio considerado es de un tamaño de 39 x 39 celdas rectangulares de 1 km, con 6 capas en la dirección vertical, espaciadas como se indica en 5.1. La ubicación del dominio que abarca el Valle de México es la siguiente:

La esquina sur se encuentra en la coordenada (470,2139) mientras que la esquina norte se encuentra en la coordenada (509, 2175). A continuación se presentan los datos técnicos de una termoeléctrica de Alemania y posteriormente los datos meteorológicos del Valle de México.

DATOS TÉCNICOS

Los datos técnicos, fueron obtenidos de un estudio realizado para modernizar una termoeléctrica en Berlín, Alemania [Modern Power Systems, 1994]. La planta termoeléctrica que es de ciclo combinado, tiene una capacidad de 380 MW, potencia obtenida de dos turbinas de gas de 165 MW cada una, y una turbina de vapor de 150 MW. El combustible que se utiliza principalmente es gas natural, utilizándose Diesel como combustible de reserva. Los datos obtenidos de este estudio que se utilizarán para el modelo de dispersión son:

Altura de la chimenea	100 m
Diámetro de la chimenea	4 m
Máximo de emisiones permitidas	0.1 g/m ³
Temperatura de los gases de salida	80 °C
Velocidad de salida de los gases	12 m/s

DATOS METEOROLÓGICOS DE ENTRADA DEL MODELO

Los datos meteorológicos de entrada del modelo considerado son: el campo de velocidades, la altura de capa de mezcla y el archivo de coeficientes difusivos verticales. Estos datos están considerados para la región del Valle de México para el día 22 de febrero de 1991, fecha que fue seleccionada debido a los altos índices de contaminación registrados en ese día.

El campo de velocidades se obtiene de la salida del modelo MEMO [Moussiopoulos et al, 94], el cual es un modelo pronóstico no hidrostático y se da en un archivo con datos de velocidades del viento. Este archivo fue modificado para que pueda ser leído por el modelo de difusión para fuentes fijas, en donde fueron proporcionadas las 3 componentes de las velocidades del viento en forma de arreglo en la dirección (x, y, z) para las 6 capas consideradas en la vertical y para un período de tiempo de 24 horas.

La altura de capa de mezcla, fue obtenida del Modelo Metropolitano de Gestión de la Calidad del Aire [Fuentes et al, 1993], en donde se proporcionan en un archivo las alturas de la capa de mezcla para los diferentes puntos en forma de arreglo rectangular, para el dominio descrito anteriormente.

El archivo de coeficientes difusivos verticales se determina considerando la relación dada en la sección 2.2, en donde se necesita conocer las velocidades y la altura de capa de mezcla. En la horizontal se consideró que $K_{xx} = K_{yy} = K_H$, donde $K_H = 2980$ [Reynolds et al, 1973].

RESULTADOS

Se ubicó la afuente fija en la parte norte de la ciudad, cerca de la zona de Tlalnepantla, en la celda (16, 24) y se corrió para diferentes tiempos. Se puede observar para un tiempo $t = 9$ horas, cómo la pluma sigue la dirección descrita por el campo de vientos variable (fig. 5.4.1), en donde se tienen las concentraciones más altas cerca de la fuente fija hasta las de menor cantidad alejados de la pluma.

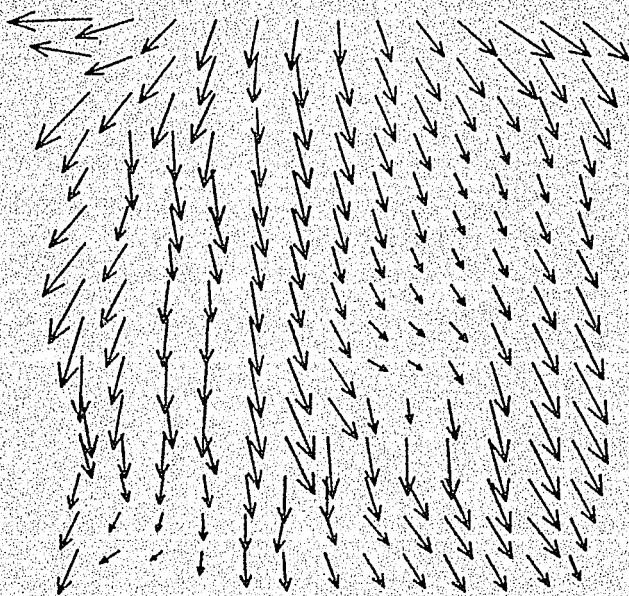


Figura 5.4.1 Campo de vientos del Valle de México para las 9 horas.



Figura 5.4.2

VI. CONCLUSIONES

Debido a que en la horizontal, aun en condiciones de calma (0.5 mts), se calculó un número de Peclet del orden de 10, el problema es mayormente advectivo y por tal motivo la difusión y dispersión numérica constituyen un factor importante.

Los métodos numéricos usados en este trabajo para resolver la parte advectiva, eliminan el problema de difusión y dispersión numérica, como se puede observar en la sección 4.2, donde una concentración es sometida a un campo de vientos y transportada en la dirección de éste. Obsérvese como también el método numérico es capaz de respetar el frente.

Conforme el modelo computacional fue desarrollándose, se compararon las soluciones numérica y exacta tanto para la parte advectiva, como para la difusiva teniéndose muy buena aproximación.

La comparación entre el modelo numérico desarrollado y el gaussiano se realizó cuidando las condiciones, de manera que la comparación fuera válida. Esta comparación demostró que el modelo computacional funciona correctamente para los casos que trata el modelo gaussiano, pero con la ventaja de que se puede aplicar para resolver situaciones más generales, como por ejemplo problemas donde los campos de vientos son variables en el tiempo y el espacio.

En el ejemplo de la sección 5.3 el campo de vientos empleado se diseñó para mostrar que las concentraciones liberadas por la fuente fija siguen la dirección del viento (figuras 5.3.1 y 5.3.2).

Con el ejemplo de la termoeléctrica (sección 5.4) se pretende mostrar que la estructura del modelo computacional es un programa que puede ser aplicado para resolver problemas apegados a la realidad y por ello se probó con datos meteorológicos del Valle de México y datos técnicos de una termoeléctrica de Berlín. En los resultados y siguiendo la dirección del viento, se observa que la concentración va de mayor a menor conforme se aleja de la fuente fija.

Se pretende que el trabajo no solo sea archivado como un expediente más sino que sirva de apoyo a quienes se interesen en resolver problemas relacionados con el tema. A futuro se tiene planeado utilizar los resultados y experimentos realizados en el presente trabajo a fin de optimizarlo. Para ello se cuenta con el apoyo de personas especializadas en el área.

En la visualización se realizó un considerable esfuerzo a fin de presentar resultados cuya interpretación sea más clara y sencilla.

Otros aspectos importantes y necesarios que deberán ser tomados en cuenta para futuras versiones son: la incorporación de reacciones químicas y la forma amigable del software para abrir la posibilidad de comercialización.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Anfonssi D., Boning G., Bossa F., Richairdone R. (1978) Plume Rise for Multiple Sources: A New Model, Atmospheric Environment Pergamon Press, Great Britain, Vol 12, pp 1821-1826.

Blumenthal D. L., White W. H., Smith T. D. (1978) Anatomy of a los Angeles Smog Episode: Pollutant Transport in the daytime sea breeze regime. Atmospheric Enviroment Vol 12, pp 893-907.

Burmeister L. C. (1983) Convective Heat Transfer, John Wiley & Sons, New York

Businger, J. A. and Arya, S. P. (1974) Height of the Mixed Layer in the Stably Stratified Planetary Boundary Layer. Adv. Geophys. 18A, pp 73-92.

Chorin A. J., Marsden (1990) A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics 2d Ed. S.V.

Coffin S. (1980) Unix. Sistema V Version 3, Mc Graw Hill

Davis, C. G., Bunker, S. S. and Mutschlechner J. P. (1984). Atmospheric Transport Models for Complex Terrain. J. Climate and Appl. Meteor., 23, pp 235-238.

Dickerson, M. H. (1978). MASCON- A mass-consistent Atmospheric Flux Model for Regions with Complex Terrain. J. Appl. Meteor., 17, pp 241-253.

Donn W. L. (1965) Meteorology 3d. Ed. Mc Graw-Hill.

Douglas, S. G. and Kessler R. C. (1988) User's Guide to the Diagnostic Wind Model (Version 1.0). Systems Applications, Inc., San Rafael, California.

Fuentes V. G., Jazcilevich A. D., Aguirre R. (1993), Modelo Metropolitano de Gestión de la Calidad del Aire.

Garabedian P. (1964) Partial Differential Equations, . John Wiley & Sons, U.S.A

Golay, M. W. (1982) Numerical Modeling of Bouyant Plumes in a Turbulent Stratified, Atmospheric Environment, Pergamon Press, Great Britain, Vol 16, No. 10, pp 2373-2381

Incropera F. P., Dewitt (1980) Fundamentals of Heat & Mass transfer, 3d Edition, Wiley & Sons

Jazcilevich A. D., Fuentes V. G., (1994), The Random Choice Method in the Numerical Solution of the Atmospheric Transport Equation, Environmental Software Vol 9, pp 23-31.

Kelley A., Pohl I. (1987), Lenguaje C, Addison Wesley, Iberoamericana.

Kernighan B. W., Ritchie D. M. (1985), The C Programming Language, Prentice Hall.

Ludwig L., Salvador R., Bornstein (1989) An Adaptive Volume Plume Model A. E. Vol 23, No. 1 pp 127-138.

Marsden, J. E., Tromba A. J. (1976) Vector Calculus, WH Freeman & Co., San Francisco.

Masters M., Gilbert (1974), Introduction to Environmental Engineering and Science, Prentice Hall, New Jersey pp 300-319.

McRae G. J., Goodin R. W., Seinfeld J. (1982), Development of a Second-Generation Mathematical Model for Urban Air Pollution-I. Model Formulation, Atmospheric Environment, Vol 16, No 4, pp 679-696.

MEMO (1994), The non-hydrostatic mesoscale model, A Technical Reference.

Modern Power System, Germany Supplements, City centre power and heat supplied by Berlin Mitte February 1994, pp 37-48.

Moussiopoulos N., Sahm, P., Fuentes, V., Jazcilevich A. and Wellens A., (1994) Simulation of the Wind Flow in the Valley of Mexico, EUROTRAC.

Özisik M. N. (1993) Heat Conduction, John Wiley & Sons, New York.

Pasquill, F. (1961) The Estimation of the Dispersion of Windborn Material. Meteorol. Magazine, 90, pp 33-49.

Patankar, S. V. (1980) Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Corporation, U.S.A.

Perkins, C. H. (1974) Air Pollution, McGraw-Hill, U.S.A pp 182-217.

Pettersen S. (1969) Introduction to Meteorology 3d. Ed. McGraw-Hill.

Peyret R., Taylor T. D. (1983) Computational Methods for Fluid Flow, Springer Verlag, New York

Pielke, R. A., McNider, R. T., Segal M., and Mahrer Y., (1983) The Use of Mesoscale Numerical Model for Evaluations of Pollutant Transport and Diffusion in Coastal Regions and over Irregular Terrain. Bull. Am. Meteor. Soc., 64, pp 243-249.

Pielke R. A. (1984) Mesoscale Meteorological Modeling, Academic Press.

Reynolds, S. D., Roth P. M., Seinfeld J. H. (1973), Mathematical Modeling of Photochemical Air Pollution--I. Formulation of the Model, Atmospheric Environment Pergamon Press, Great Britain, Vol 7, pp 1033-1061.

Roache P. J. (1976) Computational Fluid Dynamics, Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexico, pp 446.

Schatzmann M. (1979) An Integral Model of Plume Rise, Vol 13, pp 721-731.

Sherman C. A. (1978). A mass-consistent Model for Wind Fields over Complex Terrain. J. Appl. Meteor., 17, pp 312-319.

Shir, C. C. (1973) A Preliminary Numerical Study of Atmospheric Turbulent Flows in the Idealized Planetary Boundary Layer. J. Atmos. Sci., Vol 30, pp 1327-1339.

Seinfeld J. H. (1986), Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution, John Wiley & Sons, U.S.A.

Shaw W. T., Tigg J. (1994) Applied Mathematica, Addison Wesley, U.S.A.

Sod G. A., (1985), Numerical Methods in Fluid Dynamics, Cambridge University Press.

Sun O. S. Users's Guide (1990).

Turner, D. B. (1985) Proposed Pragmatic Methods for Estimating Plume Rise and Penetration Through Atmospheric Layers, Atmospheric Environment Pergamon Press, Great Britain, Vol 19, No. 7, pp 1215-1218.

Turner, D. B. (1969) Workbook of Atmospheric Diffusion Estimates, U. S. Environmental Protection Agency Report 999-Ap-26, Washington D. C.

Wolfram S. (1991) Mathematica, Addison Wesley, California.

Yamada, T. and Bunker, S. S., (1988). Development of a Nested Grid, Second Moment Turbulence closure Model and Application to the 1982 ASCOT Brush Creek Data Simulation. J. Appl. Meteor., 27, pp 562-578.

Zannetti P. (1990) Air Pollution Modelig Theories, Computational Methods and Available Software, Van Nostrand Reinhold, Boston.

Zauderer G. (1989) Partial Differential Equations of Applied Mathematics, 2nd. Ed. Wiley-Interscience, New York.

APENDICE

Se muestra la parte principal del programa en donde se utiliza el método de pasos fraccionados para resolver la ecuación de transporte atmosférico con los métodos numéricos descritos anteriormente.

```
void control(void)
{
    int i,j,k,x,jx,ly,jy,lb,jb,ix1,jy1,ix2,jy2,lz,ga,paz;
    int i9,i9,k9;
    gp=0;          /*Inio. Control tiempo */
    ga=1h;

    for(jk=0;jk<=ltemp;jk++){
        pz=1;          /*Inio. Control capa */
        paz=numhz;
        jbx=jk;
        n=jk;
        u[nx][gp][nyf[gp]][nzf1[gp]][0]=EQnod[gp];
        u[posx][posy][nzd[gp]][0]=EQf[gp];
        for(iz=0;iz<=numz;iz++){
            izk=iz;
            for(jx=0;jx<=ny;jx++){          /*Adveccion en x, comienzo*/
                for(jy=0;jy<=nx;jy++){
                    up[jx][0]=u[jx][jy][iz][0];
                    c1p[jx][0]=c1[jx][jy][pz][gp];
                }
                advx();
                for(jx=0;jx<=nx;jx++){
                    u[jx][jy][iz][1]=up[jx][1];
                }
            }          /*Adveccion en x, fin*/
            jy=jk;
            for(jy=0;jy<=nx;jy++){          /*Adveccion en y, comienzo*/
                for(jx=0;jx<=ny;jx++){
                    uq[jy][0]=u[jy][jx][iz][1];
                    c2p[jy][0]=c2[jy][jx][pz][gp];
                }
                advy();
                for(jy=0;jy<=nx;jy++){
                    u[jy][jx][iz][2]=uq[jy][2];
                }
            }          /*Adveccion en y, fin*/
            MatA();          /*Matriz A, difusion inicio*/
            for(jy1=0;jy1<=ny;jy1++){          /*Difusion en x, inicio*/
                for(ix1=0;ix1<=nx;ix1++){
                    up1[ix1][n]=u[ix1][jy1][ic][2];
                }
                Difus();
                for(ix1=0;ix1<=nx;ix1++){
                    u[ix1][jy1][iz][3]=up1[ix1][n+1];
                }
            }          /*Difusion en x, Fin*/
            for(ix2=0;ix2<=nx;ix2++){          /*Difusion en y, Comienzo*/
                for(jy2=0;jy2<=ny;jy2++){
                    up1[jy2][n]=u[ix2][jy2][iz][3];
                }
                Difus();
                for(jy2=0;jy2<=ny;jy2++){
                    u[ix2][jy2][iz][4]=up1[jy2][n+1];
                }
            }          /*Difusion en y, Fin*/
            if(paz==lz){          /*Control intervalos de capas*/
                paz=pz+1;
                paz=pz*numhz;
            }
        }
    }
}
```

```

for(lyz=0;lyz<=mx;lyz++){ /*Estructura Vertical*/
    for(ixz=0;ixz<=mx;ixz++){
        estvrz();
    }
}

for(k9=0;k9<=numz;k9++){
    for(j9=0;j9<=ny;j9++){
        for(i9=0;i9<=nx;i9++){
            u[i9][j9][k9][0]=u[i9][j9][k9][6];
        }
    }
}

if((k==ga){ /*Control Intervalos de tiempos*/
    gp=1+gp;
    ga=(gp+1)*th;
    salresul();
}
}

}

void advx(void)
{
    int i,r2;
    float ksilhx[2],kvx[45][2],kv_sl[45],st1,st2,st3;

    ksilhx[1]=(Enx[n]+0.5)*hx;
    for(i=0;i<=nx;i++){
        kvx[i][1]=kt*c1p[i][0];
    }
    for(i=1;i<=nx;i++){
        kv=kvx[i][1]+hh;
        s[i]=2;
        if((kv>hh){
            if(((hh<=ksilhx[1])&&(ksilhx[1]<=kv))
                {
                    s[i]=1;
                }
        }
        else
        {
            if(((ksilhx[1]<=hh)&&(kv<=ksilhx[1]))
                {
                    s[i]=4;
                }
        }
    }
}

for(i=1;i<=nx;i++){
    if(s[i-1]==1){
        st1=1;
    }
    else
    {
        st1=0;
    }
    if(s[i]==2){
        st2=1;
    }
    else
    {
        st2=0;
    }
    if(s[i+1]==4){
        st3=1;
    }
    else
    {
        st3=0;
    }
    up[i][2]=(st1*up[i-1][1])+(st2*up[i][1])+(st3*up[i+1][1]);
}

```

```

}

void advy(void)
{
    int i,r2;
    float kslhx[2],kvx[45][2],kv,s[45],st1,st2,st3;

    kslhx[1]=(Eny[n]*0.5)*hy;
    for(i=0;i<ny;i++){
        kvx[i][1]=kt*c2p[i][0];
    }
    for(i=1;i<ny;i++){
        kv=kvx[i][1]+hh;
        s[i]=2;
        if((kv>ht)){
            if(((hh<=kslhx[1])&&(kslhx[1]<=kv))
                {
                    s[i]=1;
                }
            }
        else
        {
            if(((kslhx[1]<=hh)&&(kv<=kslhx[1]))
                {
                    s[i]=4;
                }
            }
        }
    }
    for(i=1;i<ny;i++){
        if(s[i-1]==1){
            st1=1;
        }
        else
        {
            st1=0;
        }
        if(s[i]==-2){
            st2=1;
        }
        else
        {
            st2=0;
        }
        if(s[i+1]==4){
            st3=1;
        }
        else
        {
            st3=0;
        }
    }
    uq[i][2]=(st1*uq[i-1][1])+ (st2*uq[i][1])+(st3*uq[i+1][1]);
}
}

```

```

void MatA(void)
{
    Inicializa();
    Invierte();
    Cambia();
}

```

```

void Inicializa(void)
{
    int f,g;
    for(f=1;f<=m;f++){
        for(g=1;g<=m;g++){
            if(f==g){
                a[f][g]=1+2*alfa*lbht[pz][gp];
            }
            else if(abs(f-g)==1)
                a[f][g]=-1*alfa*lbht[pz][gp];

```

```

    }
    void Cambia(void)
    { int i;
      }
    }
  }
}

void Inverte(void)
{
  int h,j,k,camb,error;
  local invlemen,guarda,elemneg;
  for(i=1;i<=m;i++)
  {
    for(j=1;j<=m;j++)
    {
      if(i[j][h]==0)
      {
        error=0;
        camb=1;
        j=m;
      }
      if(i[j][h]!=0)
      {
        for(j=h;j<=m;j++)
        {
          error=1;
          for(i=1;i<=m;i++)
          {
            if(i[j][h]==0)
            {
              error=0;
              camb=1;
              j=m;
            }
          }
          if(error==1)
          {
            printf("La matriz es no invertible\n");
          }
          else
          {
            for(i=1;i<=m;i++)
            {
              for(j=1;j<=m;j++)
              {
                guarda=a[i][j];
                a[i][j]=a[j][i];
                a[j][i]=guarda;
              }
            }
            invlemen=1/a[i][h];
            for(j=1;j<=m;j++)
            {
              a[j][h]=invlemen*a[j][i];
              d[i][h]=invlemen*d[i][i];
            }
            for(i=1;i<=m;i++)
            {
              for(j=1;j<=m;j++)
              {
                guarda=a[i][j];
                a[i][j]=a[j][i];
                a[j][i]=guarda;
              }
            }
            invlemen=1/a[i][h];
            for(j=1;j<=m;j++)
            {
              a[j][h]=invlemen*a[j][i];
              d[i][h]=invlemen*d[i][i];
            }
            for(i=1;i<=m;i++)
            {
              elemneg=a[i][i];
              for(k=1;k<=m;k++)
              {
                a[i][k]=a[i][k]+elemneg*a[h][k];
                d[i][k]=d[i][k]+elemneg*d[h][k];
              }
            }
          }
        }
      }
    }
  }
}

```

```

for(i=1; i<=m; i++){
    for(j=1; j<=m; j++){
        id[i][j]=a[i][j];
    }
}
for(i=1; i<=m; i++){
    for(j=1; j<=m; j++){
        a[i][j]=d[i][j];
    }
}
}

void Difus(void)
{
    Inicialmatb();
    Multiplica();
    Cambu();
}

void Inicialmatb(void)
{
    int i,p;
    p=1;
    for(i=finf; i+3<fsup; i++){
        p=p+1;
        b[p][n]=((1-alfa)*lbht[pz][gp]*(up1[i+1][n]+up1[i+3][n]))
                +((1-2*(1-alfa)*lbht[pz][gp])*up1[i+2][n]);
    }
    b[1][n]=((1-alfa)*lbht[pz][gp]*(up1[finf][n]+up1[finf+2][n]))
            +((1-2*(1-alfa)*lbht[pz][gp])*up1[finf+1][n])+(alfa*lbht[pz][gp]*up1[finf][n+1]);
    b[m][n]=((1-alfa)*lbht[pz][gp]*(up1[fsup-2][n]+up1[fsup][n]))
            +((1-2*(1-alfa)*lbht[pz][gp])*up1[fsup-1][n])+(alfa*lbht[pz][gp]*up1[fsup][n+1]);
}

void Multiplica(void)
{
    int i,km;
    float sum;
    for(km=1; km<=m; km++){
        sum=0;
        for(i=1; i<=m; i++){
            sum=((a[km][i])*(b[i][n]))+sum;
        }
        c[km][1]=sum;
    }
}

void Cambu(void)
{
    int i,q,r;
    q=0;
    for(i=finf+1; i<=fsup-1; i++){
        q=q+1;
        up1[i][n+1]=c[q][1];
    }
    up1[finf][n+1]=vfinf;
    up1[fsup][n+1]=vfsup;
}

void estvrz(void)
{
    int lb,zl;
    for(zl=0; zl<=numz; zl++){
        uz1[zl][0]=u[ixz][lyz][zl][4];
        c3p[zl][0]=c3[ixz][lyz][zl][gp];
    }
    advz();
    for(zl=0; zl<=numz; zl++){
        u[ixz][lyz][zl][5]=uz1[zl][1];
    }
}

```

```

MatAz();
for(zl=0;zl<=nzf[|xz|][|yz|][n];zl++){
    uz[zl][n]=u[|xz|][|yz|][zl][5];
}
Dl(uz);
for(zl=0;zl<=nzf[|xz|][|yz|][n];zl++){
    u[|xz|][|yz|][zl][6]=uz[zl][n+1];
}
if(nzf[|xz|][|yz|][n]<numz){
    for(lb=nzf[|xz|][|yz|][n]+1;lb<=numz;lb++){
        u[|xz|][|yz|][lb][6]=u[|xz|][|yz|][lb][5];
    }
}
}

void MatAz(void)
{
    Inicialz();
    Inviertez();
    Cambiaz();
}

void Inicialz(void)
{
    int f,g,pa1,qa1;
    for(f=1;f<=nzf[|xz|][|yz|][n];f++){
        pa1=1;
        qa1=numhz;
        for(g=1;g<=nzf[|xz|][|yz|][n];g++){
            if(qa1==g){
                pa1=pa1+1;
                qa1=pa1*numhz;
            }
            if(f==g){
                a[f][g]=1+2*alfa*lb[|xz|][|yz|][pa1][n];
            }
            else if(abs(f-g)==1)
                a[f][g]=-1*alfa*lb[|xz|][|yz|][pa1][n];
            else
                a[f][g]=0;
        } /* for g */
    } /* for f */
    for(f=1;f<=nzf[|xz|][|yz|][n];f++){
        for(g=1;g<=nzf[|xz|][|yz|][n];g++){
            if(f==g){
                d[f][g]=1;
            }
            else
            {
                d[f][g]=0;
            }
        }
    }
}

void Inviertez(void)
{
    int h,j,k,camb,error;
    float invelemen,guarda,elemneg;

    for(h=1;h<=nzf[|xz|][|yz|][n];h++)
    {
        error=1;
        for(j=h;j<=nzf[|xz|][|yz|][n];j++)
            if(a[j][h]==0)
            {
                error=0;
                camb=j;
                j=nzf[|xz|][|yz|][n];
            }
    }
}

```

```

if(error==1)
{
    printf("La matriz es no invertible \n");
}
else
{
    for(i=1; i<nzf[bx2][lyz][n]; i++)
    {
        guarda=a[h][i];
        a[h][i]=a[camb][i];
        a[camb][i]=guarda;
        guarda=d[h][i];
        d[h][i]=d[camb][i];
        d[camb][i]=guarda;
    }
    invelemen=1/a[h][h];
    for(j=1; j<nzf[bx2][lyz][n]; j++)
    {
        a[h][j]=invelemen*a[h][j];
        d[h][j]=invelemen*d[h][j];
    }
    for(j=1; j<nzf[bx2][lyz][n]; j++)
    {
        if(j!=h)
        {
            elemneg=-a[j][h];
            for(k=0; k<nzf[bx2][lyz][n]; k++)
            {
                a[j][k]=a[j][k]+elemneg*a[h][k];
                d[j][k]=d[j][k]+elemneg*d[h][k];
            }
        }
    }
}
}
}

```

```

void Cambiaz(void)
{
    int i,j;
    for(i=1; i<nzf[bx2][lyz][n]; i++){
        for(j=1; j<nzf[bx2][lyz][n]; j++){
            d[i][j]=a[i][j];
        }
    }
    for(i=1; i<nzf[bx2][lyz][n]; i++){
        for(j=1; j<nzf[bx2][lyz][n]; j++){
            a[i][j]=d[i][j];
        }
    }
}

```

```

void Difuz(void)
{
    if(nzf[bx2][lyz][n]<=2){
        bz[1][n]=uz{1}[n] + lb[bx2][lyz][1][n]*(1-alfa)*(uz[2][n]-2*uz{1}[n])+uz{0}[n];
    }else
    {
        Inicialmatbz();
    }
    Multiplic();
    Cambuz();
}

```

```

void Inicialmatbz(void)
{
    int i,p,j,c,mkt,pa1,qa1,iku;
    p=1;
    pa1=1;
    qa1=1*numhz;
    for(i=0; i+3<nzf[bx2][lyz][n]; i++){
        p=p+1;
    }
}

```

```

bz[p][n]=((1-alfa)*lb[kxz][lyz][pa1][n]*(uz[l+1][n]+uz[l+3][n]))
          +((1-2*(1-alfa)*lb[kxz][lyz][pa1][n])*uz[l+2][n]);
if(jc==qa1){
    pa1=pa1+1;
    qa1=pa1*numhz;
}
}

```

```

bz[1][n]=((1-alfa)*lb[kxz][lyz][1][n]*(uz[0][n]+uz[2][n]))
+((1-2*(1-alfa)*lb[kxz][lyz][1][n])*uz[1][n]);
mkt=nz[kxz][lyz][n]-1;
lku=(nz[kxz][lyz][n])/2;
bz[mkt][n]=((1-alfa)*lb[kxz][lyz][lku][n]*(uz[mkt-2][n]+uz[mkt][n]))
+((1-2*(1-alfa)*lb[kxz][lyz][lku][n])*uz[mkt-1][n])
+(alfa*lb[kxz][lyz][lku][n]*uz[mkt][n+1]);
}

```

```

void MultIplz(void)
{
    int i,km;
    float sum;
    for(km=1;km<nz[kxz][lyz][n];km++){
        sum=0;
        for(i=1;i<nz[kxz][lyz][n];i++){
            sum=((e[km][i])*(bz[i][n]))+sum;
        }
        c[km][1]=sum;
    }
}

```

```

void Cambuz(void)
{
    int i,q,r;
    q=0;
    for(i=1;i<nz[kxz][lyz][n];i++)
    {
        q=q+1;
        uz[i][n+1]=c[q][1];
    }
    uz[nz[kxz][lyz][n][n+1]=u[bxz][lyz][0][n];
    uz[nz[kxz][lyz][n][n+1]=u[kxz][lyz][nz[kxz][lyz][n][n];
}

```

```

void advz(void)
{
    int i,r2;
    float ksilhx[2],kvx[25][2],kv,s[25],st1,st2,st3;

    ksilhx[1]=(Enz[n]+0.5)*hx;
    for(i=0;i<numz;i++){
        kvx[i][1]=kt*c3p[i][0];
    }
    for(i=1;i<numz;i++){
        kv=kvx[i][1]+hh;
        s[i]=2;
        if((kv>hlh)){
            if((hh<=ksilhx[1])&&(ksilhx[1]<=kv))
            {
                s[i]=1;
            }
        }
        else
        {
            if((ksilhx[1]<=hh)&&(kv<=ksilhx[1]))
            {
                s[i]=4;
            }
        }
    }
    for(i=1;i<numz;i++){
        if(s[i-1]==1){
            st1=1;

```

```

    }
    else
    {
        st1=0;
    }
    if(s[i]==2){
        st2=1;
    }
    else
    {
        st2=0;
    }
    if(s[i+1]==4){
        st3=1;
    }
    else
    {
        st3=0;
    }
    uz1[i][2]=(st1*uz1[i-1][1])+(st2*uz1[i][1])+(st3*uz1[i+1][1]);
}

}

void salresul(void)
{
    int li,li,jz,lmk,ab1,ab2;
    char nombre[60];
    printf("\nDa el nombre del archivo donde deseas salvar los datos:\n");
    scanf("%s",&nombre);
    if((fpat=fopen(nombre,"w"))==NULL){
        printf("\nNo puede ser abierto el archivo\n");
        return;
    }
    fprintf(fpat,"t=%d".gp);
    for(jz=0;jz<=numz;jz++){
        fprintf(fpat,"Capa %d".jz);
        fprintf(fpat,"\n");
        for(jl=0;jl<=ny;jl++){
            for(ll=0;ll<=nx;ll++){
                fprintf(fpat,"%2.2f ",u[ll][jl][jz][6]);
            }
            fprintf(fpat,"\n");
        }
    }
    fclose(fpat);
}
}

```