

03063

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTILÁN
POSGRADO EN CIENCIAS E INGENIERIA DE LA COMPUTACIÓN

22

“MODELOS COMPUTACIONALES EN PROBLEMAS DE
CONTAMINACIÓN AMBIENTAL”

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE :
MAESTRO EN CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN
P R E S E N T A :
ING. GUSTAVO MONROY SÁNCHEZ

DIRECTOR DE LA TESIS: DR. VLADIMIR TCHIJOV.

MÉXICO, D.F.

2001



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta 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.

GRACIAS...

A Dios,

Por concederme el don de la vida y por ser siempre mi fortaleza en momentos de flaqueza y pena.

A mis padres,

Por su paciencia y apoyo en mis estudios desde temprana edad, motivación que actualmente mantengo como la mejor herencia y educación que me legan.

A mis hermanos,

Por su cariño, confianza y por contagiarme de su entusiasmo y deseos de superación

En especial a ti Mary, mi confidente, amiga y esposa,

Por ser mi compañera incondicional, por permitirme ser parte de tu vida, por ese gran apoyo, cariño y amor que me han dado la fuerza para seguir adelante en este arduo camino del profesionalismo.

Gracias, Mary.

A mis tres mosqueteros, mis hijos.

Con todo mi amor y que esto sirva de ejemplo para que logren alcanzar sus metas que se fijen en la vida. Dedico este trabajo a la seriedad y dedicación de Martín, la seguridad e ingenio de Leonardo, a las travesuras, inocencia y su eterna sonrisa de Alex, el bebé que crece.

A la Universidad Autónoma de México campus Cuautitlán,

Por haberme dado la oportunidad de ser parte de ella e impulsar mi deseo de superación

Al Instituto Mexicano del Petróleo,

Por su apoyo técnico y económico para el desarrollo de esta tesis

GRACIAS...

A mi director de tesis, Dr. Vladimir Tchijov,

Por reconocer en él la disponibilidad de tiempo, la compartición de conocimientos, el valor de la experiencia, la certeza en la orientación. . verdadero significado de "Maestro"

A mis sinodales,

Por sus valiosos comentarios, sugerencias y el tiempo dedicado a la revisión de este trabajo

En especial a un gran amigo, Ing. Jesús Cruz Castro,

Por apoyarme en el momento en el que tome la decisión de realizar esta meta, gracias por esa confianza y motivación para seguir adelante y ofrecerme la oportunidad de ser parte de tu equipo de trabajo

Al Ing. Ezequiel Santos Rosales,

Por su amistad, consejos y apoyo incondicional en la revisión de este trabajo.

A mi tutor de tesis en el IMP, Ing. Luis Felipe Mancilla Ramón.

Por su apoyo y motivación para el cumplimiento de esta meta.

A mis amigos,

Por la amistad incondicional que me han brindado

A mis compañeros de plataformas marinas y del IMP,

Por sus consejos, apoyo y "chicoteo" para la terminación de este trabajo.

A toda persona que en este momento no recuerdo,

Pero, aún así, lograron con su presencia que me encuentre en la posición donde estoy



**Universidad Nacional Autónoma
de México**

INDICE

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



INDICE

INTRODUCCIÓN.....	1
CAPITULO 1.....	7
ANTECEDENTES.....	7
1.1 Generalidades de la contaminación del aire.....	7
1.1.1 Principales contaminantes del aire.	7
1.1.2 Definición de smog fotoquímico	8
1.1.2.1 Precursores de los oxidantes fotoquímicos.	8
1.1.3 Contaminación atmosférica fotoquímica en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México (ZMCM).	8
1.2 Analisis de mecanismos de reacciones fotoquímicas en la atmósfera, para la formación del smog fotoquímico u ozono.....	9
1.2.1 Mecanismo de reacción generalizado de Seinfeld, para la formación del smog fotoquímico	10
1.3 Modelos de calidad del aire.....	12
1.3.1 Introducción a los modelos de calidad del aire.....	12
1.3.2 Modelos de Dispersión o Difusión	13
1.3.2.1 Modelos de Caja Fija.....	15
1.3.2.2 Modelos Eulerianos o de Celdas Múltiples.....	16
1.3.2.3 Modelos de Lagrange.....	17
1.3.2.4 Modelo Gaussiano	18
1.3.3 Modelos comerciales de calidad del aire.....	19
CAPITULO 2.....	21
MODELO MATEMATICO DE REACCIONES QUÍMICAS, PARA LA FORMACIÓN DEL SMOG FOTOQUÍMICO.....	21
2.1 Método numérico propuesto.....	21
2.2 Modelación matemática del mecanismo de reacción propuesto.....	28
2.2.1 Mecanismo de reacción generalizado de formación de smog fotoquímico.....	28
2.3 CVOICE.....	31
2.3.1 Organización de CVOICE.....	33
CAPITULO 3.....	37
MODELO DE CALIDAD DEL AIRE PARA LA CONTAMINACIÓN POR OZONO EN LA CIUDAD DE MÉXICO.....	37
3.1 Esquema numérico del modelo de calidad del aire propuesto	38
3.2 Descripción del dominio del problema	42
3.3 Interpolación de los datos iniciales	46
3.3.1 Método de triangulación por diagramas de Voronoi.....	46
3.3.2 Técnicas de Kriging	48
3.4 Influencia del viento en la dispersión de contaminantes atmosféricos.....	48

INDICE (CONTINUACION)

CAPITULO 4	51
DESCRIPCION DEL PROGRAMA "SIMCONT"	51
4.1 Características del programa	52
4.2 Algoritmos del programa	52
4.3 Estructura del programa	54
4.4 Descripción del programa.....	56
CAPITULO 5	81
ANÁLISIS DE RESULTADOS	81
5.1 Situación inicial	82
5.2. Resultados en casos con intensidad de luz variable.....	90
5.2.1 Caso 1, relación VOC's/NOx = 0.33.	91
5.2.2 Caso 2, relación VOC's/NOx = 1.66.	91
5.2.3 Caso 3, relación VOC's/NOx = 6.66.	92
5.3. Resultados en casos con intensidad de luz constante.....	118
CONCLUSIONES:	127
ANEXO 1 SISTEMA DE MONITOREO ATMOSFERICO DE LA ZONA METROPOLITANA DE LA CIUDAD DE MEXICO	132
ANEXO 2 PRINCIPALES CONTAMINANTES DEL AIRE	142
ANEXO 3 DATOS INICIALES USADOS EN EL PROGRAMA SIMCONT	147
ANEXO 4 METODOS NUMERICOS	149
BIBLIOGRAFIA:	166



**Universidad Nacional Autónoma
de México**

INTRODUCCIÓN

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



INTRODUCCIÓN.

El problema de la contaminación del aire es inherente a la vida moderna. La contaminación del aire se produce fundamentalmente en combustiones, que desafortunadamente son esenciales en nuestra civilización.

Cuando ocurre la combustión perfecta, el hidrógeno y el carbono del combustible se combina con el oxígeno del aire dando como resultado dióxido de carbono, vapor de agua y desprendimiento de calor. Sin embargo, relaciones no adecuadas entre el combustible y el aire, otros elementos presentes en el combustible y temperaturas de combustión inadecuadas, traerán como consecuencia la formación de compuestos, como por ejemplo, monóxido de carbono, óxidos de azufre, óxidos de nitrógeno, partículas suspendidas, etc., los cuales son contaminantes del aire.

Sabemos que un país en progreso es sinónimo de industrialización, y por lógica con sus propias consecuencias como son la contaminación del medio ambiente. Por lo tanto es necesario establecer programas de control de contaminantes adecuados a las condiciones naturales, técnicas, sociales económicas y culturales de cada país.

Antes de establecer estos programas, el organismo a cargo de la implementación de estos, debe efectuar un estudio de lo provechoso que será este programa antes de aplicarlo y descubrir sus imperfecciones y consecuencias. Ahora bien sabemos que políticamente y económicamente esto traería malas experiencias para el organismo que establezca estos programas de control de contaminantes. Es por eso que este organismo debe de apoyarse en herramientas que lo auxilien en tener una predicción de los resultados antes de aplicar dicho programa de control o evaluar los que ya tiene funcionando. Entre estas herramientas se encuentran modelación matemática y simulación computacional.

Un modelo computacional es el resultado de la modelación matemática del problema y aplicación de los métodos numéricos para ser resuelto a través de algún medio computacional haciendo uso de un lenguaje de programación

Un buen modelo computacional permite predecir situaciones futuras porque imita la realidad y da la posibilidad de adelantarse al presente y situarse en lo que vendrá.

Otra ventaja de los modelos es que permiten hacer "experimentos" que nunca serían posibles en la realidad. Por ejemplo, si se dispone de un buen modelo del funcionamiento de la atmósfera se podrá predecir que pasaría si se aumenta la concentración de un gas, por ejemplo del CO_2 , y ver como variará la temperatura.

Los mejores modelos Computacionales que se han desarrollado desde luego, distan de ser el modelo ideal, ya que todos los modelos son simplificaciones de la realidad

El modelar el comportamiento de los contaminantes en la atmósfera engloba diversos procesos muy interrelacionados: procesos físicos, como el propio flujo atmosférico, la dispersión de los contaminantes así como su transformación y deposición química. Hasta los años 80 la caracterización del comportamiento de los contaminantes atmosféricos y sus efectos se realizaba individualmente, dado que la interacción con otros contaminantes químicos complica el problema tanto en su planteamiento como en su resolución.

La modelación matemática es una herramienta indispensable para algunos análisis importantes sobre la calidad del aire. De hecho, ninguna estrategia para la reducción y control de emisiones a bajo costo será efectiva, sin la aplicación previa de las técnicas de modelación matemática.

Este trabajo de tesis pretende poner en práctica los conocimientos adquiridos dentro del plan de estudios de la Maestría en Ciencias e Ingeniería de la Computación y una buena opción de aplicarlos es en uno de los problemas que actualmente nos afecta tanto, como es la contaminación de la Cd. de México. Sabemos muy bien que actualmente existen una gran cantidad de modelos de calidad del aire que nos permiten predecir la contaminación de un determinado lugar, todas estas herramientas están elaboradas en base a principios matemáticos diferentes y además estos modelos son muy caros y algunos son de aplicaciones dedicadas a ciertas regiones con ciertas condiciones topográficas y climatológicas. El objetivo de nuestro trabajo "Modelos Computacionales en Problemas de Contaminación Ambiental", fue evaluar algunas de las técnicas matemáticas usadas por algunos modelos de calidad del aire, con la finalidad de desarrollar un modelo computacional de calidad del aire para ser aplicado en la Cd. De México, para esto se investigaron las bases matemáticas de algunos modelos. Al final se optó por aplicar un modelo computacional de calidad del aire que describe la difusión, advección y transformación de los contaminantes químicos, para obtener la evolución de las concentraciones del ozono, del óxido nítrico y del dióxido de nitrógeno en superficie.

Al evaluar los diferentes modelos de calidad del aire, se observó que existen algunos muy interesantes como son los modelos fotoquímicos de reacciones químicas, que nos simulan la formación de contaminantes, por lo tanto, para tener un modelo mucho más completo se pensó en incluir un término de reacciones químicas en nuestras ecuaciones de difusión-advección.

Se analizan el ciclo fotoquímico básico, al sistema óxidos de nitrógeno- aire seco y al esquema generalizado de formación del smog fotoquímico propuesto por Seinfeld (1986). Con el propósito de mostrar que el modelo general de Seinfeld nos proporciona reacciones químicas que nos permiten alcanzar niveles de ozono cercanos a la realidad y es el que estamos incluyendo en nuestro modelo computacional.

El modelo de calidad de aire propuesto, es un modelo dinámico que nos permite describir la evolución de la concentración de los contaminantes en el transcurso del tiempo y en diferentes puntos del área de interés. Tomará en cuenta las concentraciones iniciales de los óxidos de nitrógeno y del ozono, las emisiones de los precursores, el mecanismo de reacción de los contaminantes químicos, así como el campo de vientos y de temperatura.

Una vez que tenemos el modelo de reacciones químicas y el modelo de difusión-advección para los once contaminantes químicos que estamos considerando, investigamos y desarrollamos los métodos numéricos para resolver los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias rígidas generadas por el modelo de reacciones químicas y el sistema de ecuaciones diferenciales parciales generadas por la ecuación de difusión advección en tres dimensiones.

Al determinar los modelos matemáticos y métodos numéricos para el modelo de calidad del aire planeado, generamos el programa computacional "SIMCONT", este programa es desarrollado en lenguaje C++ y usa los métodos numéricos que dan solución a los sistemas de ecuaciones generado por la modelación de la ecuación de difusión advección y transformación de los contaminantes químicos para un conjunto de once contaminantes químicos, en un dominio tridimensional.

Para que nuestro trabajo sea más completo, se decidió probar y aplicar el modelo computacional "SIMCONT", en el problema de contaminación que se tiene en la Zona Metropolitana de la Cd. de México (ZMCM).

Para la simulación de la evolución de la concentración de los contaminantes en el área de estudio se utilizó un modelo euleriano, el cual nos permite dividir nuestra área de estudio (ZMCM), en una mailla de 14 x 16 celdas, cada una de ellas con un área de 25 km². En la dirección vertical sobre el eje "Z" se consideran 5 capas, por lo tanto tendríamos un total de 1120 celdas. Con esta división del área en estudio, nos permitirá cumplir conocer en espacio y tiempo la contaminación por ozono del valle de México, es decir, podremos saber a que hora y en que región, delegación o área de la ciudad de México tenemos los más altos niveles de contaminación por ozono.

Al proporcionar los datos iniciales al programa "SIMCONT", Se escogió un día en especial seleccionado por ser el día de mayor información disponible, para que mediante tres condiciones iniciales de los compuestos orgánicos volátiles y utilizando como mecanismo de reacción el propuesto por Seinfeld (1986), se simule la evolución del ozono, del óxido nítrico y del dióxido de nitrógeno en la ZMCM.

Los resultados obtenidos de SIMCONT en formato *.txt, son graficados con ayuda del software "SURFER" y se presentan en gráficas de contorno y superficie. Estos resultados de las concentraciones de ozono en superficie, calculadas para distintas horas, ilustran como en los tres casos diferentes de condiciones iniciales de VOC's, las concentraciones de ozono aumentan precisamente en las horas pico (15 hrs y 18 hrs) y se dispersan en el transcurso de la noche y como a partir de una baja relación de VOC's/NOx, el aumento en los VOC's produce cantidades muy altas de ozono.

En el CAPITULO I se mencionan algunos conceptos que se usan en el desarrollo de este tema de tesis, tenemos por ejemplo; definiciones y referencias de los principales contaminantes de la atmósfera, mencionamos la definición de smog fotoquímico y sus principales precursores. Se muestra el análisis efectuado a varios mecanismos de reacciones fotoquímicas para la formación de smog fotoquímico y se mencionan las características del mecanismo generalizado propuesto por Seinfeld, (1986). También, en este capítulo, se efectúa una revisión de algunos modelos de calidad del aire y se mencionan algunos modelos de dispersión sin indicar las ecuaciones matemáticas que caracterizan a estos modelos. Para finalizar este capítulo, se mencionan algunos modelos comerciales de calidad del aire similares al modelo computacional desarrollado en este tema de tesis (SIMCONT)

En el CAPITULO 2, se desarrolla un método numérico para la integración de las ecuaciones de cinética química. Se establecen las ecuaciones diferenciales ordinarias que modelan la formación del smog fotoquímico, de acuerdo al mecanismo de reacción generalizado propuesto por Seinfeld, (1986). También se propone al software CVODE como medio de solución a este sistema rígido de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales y se da un panorama general de las características y estructura de este software cuyo código en "C" es usado en el modelo computacional "SIMCONT" para solución de la parte de modelación de reacciones químicas

En el CAPITULO 3, se complementa el objetivo de este trabajo, al proponer las ecuaciones de difusión-
advección para un conjunto de "N" contaminantes químicos, en un dominio tridimensional, como modelo
para la simulación de los contaminantes ambientales. Se propone la solución numérica con condiciones
iniciales y las de frontera, empleando el método numérico de diferencias finitas, complementado con el
esquema implícito de Crank-Nicolson y el método de puntos falsos. Además, en este capítulo se describe el
dominio del problema para aplicar el modelo computacional "SIMCONT" en la simulación del ozono, del
óxido nítrico y del dióxido de nitrógeno en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México. Se mencionan
algunas técnicas de interpolación de datos que pueden ser usadas para obtener la base de datos inicial
de los contaminantes dispersos en la malla del dominio del problema.

En el CAPITULO 4, se efectúa una descripción detallada del programa "SIMCONT" desarrollado en "C++"
para la solución de las ecuaciones de difusión-advección y transformación de contaminantes.

Para finalizar se incluye el CAPITULO 5, en donde se efectúa un análisis de las gráficas de los resultados
obtenidos.

Se cuenta también con una sección de conclusiones en donde se efectúa una crítica constructiva hacia los
modelos de difusión de contaminantes y hacia los resultados obtenidos.

Se incluyen una serie de anexos que corresponden a información que nos permite un mejor entendimiento
del estudio desarrollado.

Teniendo en cuenta todo lo anterior, consideramos que nuestro modelo será de gran utilidad en una
aproximación razonable del proceso real de tal manera que nos permitirá poder evaluar la calidad del aire
cuando variemos las condiciones iniciales, con esto nuestro modelo puede funcionar como una herramienta
en los estudios de control de la contaminación al simular diversas estrategias de control al variar las
condiciones iniciales, para evaluar el impacto de estas antes de ponerlas en operación.



**Universidad Nacional Autónoma
de México**

CAPITULO 1

ANTECEDENTES

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



CAPITULO 1

ANTECEDENTES.

1.1 Generalidades de la contaminación del aire.

1.1.1 Principales contaminantes del aire.

El aire puro es una mezcla gaseosa compuesta por un 78% de nitrógeno, un 21% de oxígeno y un 1% de diferentes compuestos tales como el argón, el dióxido de carbono y el ozono. Entendemos pues por contaminación atmosférica cualquier cambio en el equilibrio de estos componentes, lo cual altera las propiedades físicas y químicas del aire.

Los principales contaminantes del aire se clasifican en:

- Contaminantes primarios.
- Contaminantes secundarios.

Los contaminantes primarios, son los que permanecen en la atmósfera tal y como fueron emitidos por la fuente. Para fines de evaluación de la calidad del aire se consideran: óxidos de azufre, monóxido de carbono, óxido de nitrógeno, hidrocarburos y partículas.

Los contaminantes secundarios, son los que han estado sujetos a cambios químicos, o bien, son el producto de la reacción de dos o más contaminantes primarios en la atmósfera. Entre ellos destacan los oxidantes fotoquímicos y algunos radicales de corta existencia como el ozono.

En la atmósfera se encuentra presente una amplia variedad de sustancias contaminantes, sin embargo, sólo se consideran aquellas que normalmente se encuentran en un índice de contaminación muy alto y las cuales son las más importantes para evaluar la calidad del aire [Quadri, Sánchez, (1994)]:

- Partículas suspendidas totales.
- Monóxido de carbono.
- Plomo.
- Óxidos de azufre.
- Óxidos de nitrógeno.
- Hidrocarburos.
- Ozono y otros oxidantes fotoquímicos

1.1.2 Definición de smog fotoquímico.

El término general de **oxidante o smog fotoquímico** se refiere a la mezcla de reactivos y productos de la reacción existente cuando compuestos orgánicos volátiles (VOC's) y óxidos de nitrógeno (NO) están presentes simultáneamente en una atmósfera urbana en presencia de luz solar.

Los productos de reacción más importantes, contaminantes secundarios, son el ozono, el nitrato de peroxiacetilo (PAN), aldehídos y cetonas, así como varios gases asociados a ácidos orgánicos e inorgánicos. De estos, el ozono es el compuesto más abundante en la atmósfera urbana, [Quadri, Sánchez, (1994)].

Este tipo de contaminación atmosférica hizo su aparición con el uso extenso de las gasolinas como combustible de los automóviles.

A este tipo de contaminación del aire tradicionalmente se le ha llamado smog. El término smog fotoquímico fue el resultado del descubrimiento de Haagen –Smit en 1952 y 1956, acerca de la importancia que la fotólisis del dióxido de nitrógeno (NO₂) tiene en la transformación de los contaminantes primarios en secundarios en este tipo de contaminación.

1.1.2.1 Precursores de los oxidantes fotoquímicos.

Los contaminantes primarios involucrados activamente en la formación de los **oxidantes fotoquímicos** vía las reacciones inducidas por la luz solar en la atmósfera, se conocen como **precursores**. Los precursores más importantes son el **NO**, el **NO₂**, y varios hidrocarburos, los cuales sufren reacciones con radicales **OH**, átomos de oxígeno y ozono, [Quadri, Sánchez, (1994)]

El óxido nítrico (NO) y el dióxido de nitrógeno (NO₂) se suelen considerar en conjunto con la denominación de NO_x. Son contaminantes primarios de mucha trascendencia en los problemas de contaminación.

El emitido en más cantidad es el NO, pero sufre una rápida oxidación a NO₂, siendo este el que predomina en la atmósfera. NO_x tiene una vida corta y se oxida rápidamente a NO₃⁻ en forma de aerosol o a HNO₃ (ácido nítrico). Tiene una gran trascendencia en la formación del smog fotoquímico, del nitrato de peroxiacetilo (PAN) e influye en las reacciones de formación y destrucción del ozono, tanto troposférico como estratosférico, así como en el fenómeno de la lluvia ácida [Quadri, Sánchez, (1994)].

1.1.3 Contaminación atmosférica fotoquímica en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México (ZMCM).

La contaminación atmosférica fotoquímica en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México (ZMCM), representada principalmente por el ozono y las partículas suspendidas menores a 10 micras de diámetro, constituye un gran problema que afecta la salud de sus habitantes

Los mecanismos de formación, transporte y distribución del ozono y de las partículas secundarias en la atmósfera urbana, dependen de una combinación de los siguientes factores físicos: topografía, meteorología, clima y posición geográfica, asociados con emisiones de precursores: óxidos de nitrógeno e hidrocarburos reactivos. Con el suministro de combustibles no adecuados para su uso en la ZMCM, se complementan todos los elementos para que nuestra atmósfera pueda funcionar como un gran reactor, en el que todas las condiciones de alimentación de reactivos están dadas para que los fenómenos físicos naturales locales funcionen como agitadores de esa mezcla reaccionante y la radiación solar actúe como activador energético de la misma.

En resumen, la cuenca atmosférica de la ciudad de México presenta características que lo hacen susceptible a la contaminación; valle rodeado de montañas, vientos moderados casi todo el año, frecuentes inversiones térmicas, alta radiación solar en época seca y por supuesto altas emisiones de contaminantes debido al parque vehicular, así como a la gran cantidad de industria de transformación y de servicios establecidas en la ciudad [Jáuregui, (1992)].

En los últimos años se han instrumentado dos programas para mejorar la calidad del aire en la zona metropolitana del valle de México (ZMVM). Uno de ellos es el *Programa Integral para la Prevención y Control de la Contaminación Ambiental (PICCA)* dado a conocer en 1989, y el otro es el *Programa para Mejorar la Calidad del Aire en el Valle de México 1995-2000 (PROAIRE)*, en los cuales han participado organismos públicos y privados.

Gracias a estos programas, y a la aplicación de sus medidas que entre otras se encuentran el *Hoy No Circula*, la *Verificación Vehicular*, la *Sustitución de Convertidores Catalíticos* y la *Reformulación y Sustitución de Combustibles de Uso Industrial y Vehicular*, se han alcanzado logros importantes en la disminución de las concentraciones de algunos contaminantes atmosféricos como el monóxido de carbono, el dióxido de azufre y el plomo, [Quadri, Sánchez, (1994)].

1.2 Analisis de mecanismos de reacciones fotoquímicas en la atmósfera, para la formación del smog fotoquímico u ozono.

Existen varios modelos de reacciones químicas que explican la formación de ozono en la atmósfera. Sin embargo, algunos no explican cuantitativamente el grado de ozono en la atmósfera.

En el análisis realizado a diferentes modelos para la formación de smog fotoquímico:

- Ciclo fotoquímico básico del NO_2 , NO y O_3 .
- Sistema de óxidos de nitrógeno-aire seco
- Sistema de óxidos de nitrógeno- agua-monóxido de carbono.
- Mecanismo de reacción generalizado de Seinfeld

Se observa que estos modelos parten del hecho de que el NO emitido en la atmósfera, reacciona con el oxígeno atmosférico formando el NO_2 , y a su vez, el NO_2 formado reacciona con la luz solar y se disocia en NO y oxígeno atómico. El oxígeno atómico formado reacciona con el oxígeno molecular del aire para formar ozono

Estudiando las reacciones de los diferentes modelos, a fin de explicar las concentraciones de ozono observadas, se llega a la conclusión de que el modelo de óxidos de nitrógeno-aire seco y el ciclo fotoquímico básico, no logran explicar las concentraciones reales monitoreadas de ozono, debido a que existe consumo de ozono para la oxidación del NO [Seinfeld, (1978)]

Cuando se analizó el modelo de óxidos de nitrógeno-agua-monóxidos de carbono, se observó que este sistema no logra explicar las concentraciones de monóxido de carbono presentes, además las concentraciones de NO₂ y ozono no son suficientes para explicar los niveles reales alcanzados en una atmósfera contaminada. Lo interesante de este estudio fue que se observó un proceso mediante el cual el NO se oxida en NO₂, sin la participación del ozono como oxidante y sí mediante el uso de radicales libres como oxidantes. Estos radicales se formaron en la reacción de agua con el NO y con pequeñas cantidades de NO₂ [Seinfeld, (1978)].

Existen varios mecanismos de reacciones químicas que justifican el nivel y grado de ozono alcanzados en atmósferas contaminadas. En la presente tesis, se usa el mecanismo de reacciones generalizado de Seinfeld, (1986), debido a que este incorpora en sus reacciones químicas a los compuestos orgánicos volátiles (VOC's) con el objetivo de explicar las concentraciones de óxidos de nitrógeno y ozono medidos en la atmósfera. Este mecanismo cumple con las necesidades del modelo computacional SIMCONT, para ser aplicado en la ZMCM, lugar donde abundan los VOC's o hidrocarburos emitidos por la gran cantidad de automóviles circulantes.

1.2.1 Mecanismo de reacción generalizado de Seinfeld, para la formación del smog fotoquímico.

Este modelo de reacciones químicas propuesto por Seinfeld, (1986), incorpora en sus reacciones químicas a los compuestos orgánicos volátiles (VOC's). El término COV's ó VOC's engloba a todos los compuestos orgánicos volátiles capaces de producir oxidantes fotoquímicos mediante reacciones provocadas por la luz solar en presencia de óxidos de nitrógeno.

Se denominan compuestos orgánicos volátiles a los hidrocarburos, alcanos, alquenos y alquinos, de bajo peso molecular, así mismo formaran parte de este grupo los aldehídos, cetonas y ácidos, productos de la oxidación de los hidrocarburos. Por lo general, se dice que la gasolina es un hidrocarburo porque en su mayor parte contiene átomos de hidrogeno y de carbono, pero también contiene átomos de oxígeno, nitrógeno y azufre, [Quadri, Sánchez, (1994)].

Las reacciones de los VOCs que nos interesan son las reacciones de oxidación, ya que es en ellas donde se producirán los suficientes radicales libres que a su vez favorecerán la oxidación del NO y con esto la formación del smog fotoquímico

El mecanismo de reacción generalizado para la formación del smog fotoquímico, propuesto por Seinfeld, (1986), se muestra en la Tabla 1.1. Las constantes de velocidad de las reacciones fotoquímicas dependen de la intensidad de luz

Tabla 1.1 Mecanismo de reacción generalizado de formación del smog fotoquímico, propuesto por Seinfeld (1986).

Reacción	Constante de velocidad	Constante de velocidad (298°K)
$\text{NO}_2 + h\nu \rightarrow \text{NO} + \text{O}$	0.533 min^{-1} (supuesto) (Seinfeld)	0.533 min^{-1}
$\text{O} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{O}_3 + \text{M}$	$6.0 \times 10^{-34} (T/300) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-2} \text{ s}^{-1}$	$2.183 \times 10^{-3} \text{ ppm}^{-2} \text{ min}^{-1}$
$\text{NO} + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}_2$	$2.2 \times 10^{-12} \exp(-1430/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$26.59 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$
$\text{RH} + \text{OH} \rightarrow \text{RO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$1.68 \times 10^{-11} \exp(-559/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$3.775 \times 10^3 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$
$\text{RCHO} + \text{OH} \rightarrow \text{RC(O)O}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$6.9 \times 10^{-12} \exp(250/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$2.341 \times 10^4 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$
$\text{RCHO} + h\nu \rightarrow \text{RO}_2 + \text{HO}_2 + \text{CO}$	$1.91 \times 10^{-4} \text{ min}^{-1}$ (supuesto) (Seinfeld)	$1.91 \times 10^{-4} \text{ min}^{-1}$
$\text{HO}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{OH}$	$3.7 \times 10^{-12} \exp(240/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$1.214 \times 10^3 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$
$\text{RO}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{RCHO} + \text{HO}_2$	$4.2 \times 10^{-12} \exp(180/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$1.127 \times 10^4 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$
$\text{RC(O)O}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{RO}_2 + \text{CO}_2$	$4.2 \times 10^{-12} \exp(180/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$1.127 \times 10^4 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$
$\text{OH} + \text{NO}_2 \rightarrow \text{HNO}_3$	$1.1 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$1.613 \times 10^4 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$
$\text{RC(O)O}_2 + \text{NO}_2 \rightarrow \text{RC(O)O}_2\text{NO}_2$	$4.7 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$6.893 \times 10^3 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$
$\text{RC(C)O}_2\text{NO}_2 \rightarrow \text{RC(O)O}_2 + \text{NO}_2$	$1.95 \times 10^{-16} \exp(-3543/T) \text{ s}^{-1}$	$2.143 \times 10^{-6} \text{ min}^{-1}$

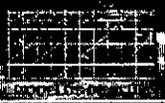
1.3 Modelos de calidad del aire.

1.3.1 Introducción a los modelos de calidad del aire.

La modelación matemática es una herramienta indispensable para análisis importantes sobre la calidad del aire. De hecho, ninguna estrategia para la reducción y control de emisiones a bajo costo será efectiva, sin la aplicación previa de las técnicas de modelación matemática.

Los modelos matemáticos son las únicas herramientas prácticas para dar respuesta a la pregunta "Qué pasara si ..."

A continuación se presenta una revisión de algunos modelos matemáticos y numéricos que son usados para simular el fenómeno de contaminación del aire. Se señala cada método sin introducir notación matemática.

	<p>Modelos meteorológicos - La simulación de aquellos parámetros meteorológicos, tales como el viento, intensidad y turbulencia etc., que afecta la dispersión de contaminantes en la atmósfera.</p>
	<p>Modelos de elevación de pluma - La simulación de la fase inicial de dispersión de las plumas boyantes caracterizado por la elevación de la pluma por encima de su nivel de emisión.</p>
	<p>Modelo gaussiano. Aquellas técnicas para las cuales la difusión atmosférica es aproximada suponiendo que el campo de concentración dentro de la pluma mantiene una distribución horizontal o vertical.</p>
	<p>Modelos eulerianos. El dominio computacional se divide en celdas y las ecuaciones son resueltas para cada celda.</p>
	<p>Modelos Lagrangianos. Técnicas numéricas para las cuales las plumas se rompen en elementos tales como segmentos o partículas</p>
	<p>Modelos químicos Simulan frecuentemente la química no lineal y las transformaciones fotoquímicas de los contaminantes atmosféricos.</p>
	<p>Modelos de depositación Simulan en fenómeno de depositación húmeda y seca en la cual una fracción de la contaminación atmosférica se deposita en la superficie</p>

 <p>MODELOS DE CONTAMINACIÓN</p>	<p>Modelos de contaminación de aire interior Simulan la acumulación de contaminantes dentro de construcciones y áreas pobremente ventiladas.</p>
 <p>MODELOS RECEPTORES</p>	<p>Modelos receptores Técnicas que únicamente a través del análisis de los registros de contaminantes, es posible reconocer la contribución de cada fuente sin necesidad de reconstruir el patrón de dispersión.</p>
 <p>MODELOS ESTOCASTICOS</p>	<p>Modelos estocásticos. Técnicas estadísticas o semiempíricas dirigidas a entender periodicidades y correlaciones en la determinación de la calidad del aire y predecir la evolución de los episodios contaminantes.</p>
 <p>MÉTODOS DE INTERPOLACIÓN</p>	<p>Métodos de interpolación de datos y técnicas de graficación Tales como Kriging, reconocimiento de patrones, análisis cluster y fractales.</p>
 <p>MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN</p>	<p>Métodos de optimización Para identificar la localidad óptima para las redes de monitoreo o minimizar cualquier efecto adverso de contaminación o incidir los costos de control de éste.</p>
 <p>TÉCNICAS ESTADÍSTICAS</p>	<p>Técnicas estadísticas Para evaluar el desarrollo de los modelos de dispersión cuando su simulación es comparada contra los registros de contaminación presente</p>
 <p>MODELOS SOBRE EFECTOS ADVERSOS</p>	<p>Modelos sobre los efectos adversos de la contaminación Tales como el deterioro de la visibilidad, los cambios climáticos y la destrucción de la capa de ozono.</p>

De los modelos anteriormente vistos se concluye que la mayoría de los modelos, basa su estudio en la teoría del transporte de masa, energía y momentum, el cual constituye al modelo básico para la dispersión o también llamado modelo de difusión turbulenta.

1.3.2 Modelos de Dispersión o Difusión.

Los modelos de difusión atmosférica se manifiestan como necesarios, si se considera que la previsión y cuantificación del impacto ambiental atmosférico, sólo es posible con un análisis idóneo, cuando se ha conseguido de una manera suficientemente representativa la modelización de las características básicas de los medios emisor, difusor y receptor en su interrelación temporal y espacial.

La aplicación de un modelo de difusión tiene como objeto la integración entre aquellos elementos que inciden en la calidad del aire, como son los condicionantes atmosféricos, localización de los focos e intensidad de los mismos, situación de los receptores, influencia de la topografía, orografía, etc., a fin de adecuar las medidas correctoras económicamente y técnicamente más viables.

Los modelos de difusión atmosférica aparecen como instrumentos de gran utilidad y en muchas ocasiones como prioritarios en los programas de actuación, cuando se requiere abordar entre otros, los siguientes problemas:

- En las evaluaciones de impacto originados por uno o varios focos de contaminación atmosférica de carácter puntual, lineal o superficial existentes o previstos.
- Optimización de alturas de chimeneas para grandes y medianas instalaciones industriales.
- Capacidad de carga de un centro urbano.
- Planificación urbana e industrial (escala regional, local y nacional).
- Diseño de redes de calidad de aire.
- Predicciones de contaminación potencial, programas de prevención.

En la mayoría de estos modelos las velocidades de cambio en las concentraciones c , de los contaminantes químicos se describen por medio de la ecuación de difusión de la siguiente forma:

$$\begin{array}{ccc} \xleftarrow{\text{ADVECCION EN 3D}} & & \xrightarrow{\text{DIFUSION EN 3D}} \\ \frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial(uc_i)}{\partial x} + \frac{\partial(vc_i)}{\partial y} + \frac{\partial(wc_i)}{\partial z} = R_i + D_i + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c_i}{\partial z} \right) \end{array}$$

Donde:

- c_i Es la concentración del contaminante químico i .
- u, v, w Son los componentes del vector velocidad del viento.
- K_x, K_y, K_z Son los coeficientes de difusión turbulenta.
- R_i Cambio de concentración de c_i debido a reacciones químicas.
- D_i Cambio de concentraciones c_i debido a procesos físicos (reacciones heterogéneas).

La solución en estado estacionario de esta ecuación, en forma extremadamente simplificada, se conoce como el modelo Gaussiano de la columna (o pluma) de humo.

Para fuentes puntuales. Este modelo no toma en cuenta el término de las reacciones químicas R_i y únicamente es válido para contaminantes químicamente inertes. Esquemas de solución analítica para la ecuación de difusión en sistemas no reactivos han sido propuestas por Lin y Hidelman, (1997).

Los modelos Gaussianos no pueden ser usados por oxidantes, los cuales, como hemos visto, reaccionan de acuerdo a mecanismos complejos.

La integración de la ecuación de difusión para contaminantes reactivos es únicamente posible utilizando métodos numéricos. Algunos esquemas simplificados de esta ecuación han sido proyectados para resolver situaciones prácticas.

Los modelos de trayectoria o de Lagrange asumen que un pequeño cubo o caja no está fijo en el espacio y se mueve junto con el viento. Los elementos del modelo Euleriano y de Lagrange fueron conjuntados en el método de partícula en una caja desarrollado por Seinfeld *et al.*, (1972) y Sklarew *et al.*, (1972).

A menos que las concentraciones varíen rápidamente, las velocidades de las reacciones químicas pueden mantenerse constantes sobre intervalos de tiempo [Roth, (1981)], durante el cual todos los cambios en las

concentraciones, incluyendo transporte y difusión turbulenta, son evaluadas numéricamente. El tiempo de computación puede reducirse si se introduce la aproximación de estado estacionario para átomos, radicales y otros contaminantes de corta permanencia [Hesstvedt *et al.*, (1978)].

Algunas características de los modelos más usados las discutiremos en los siguientes subcapítulos.

3.2.1 Modelos de Caja Fija.

Este modelo es de los más sencillos, simulan la región a modelar como una celda simple o caja, dentro de la cual se calcula la variación temporal de las concentraciones de los diferentes contaminantes químicos suponiendo procesos instantáneos de mezclado [EPA, (1989)].

Con los modelos de caja se puede explicar la evolución temporal de los contaminantes de interés. Sin embargo, no se puede conocer el lugar de mayor impacto.

Con el fin de calcular la concentración del contaminante del aire, en la ciudad o región, se establecen las siguientes hipótesis, que simplifican el modelo

La ciudad a modelar es un rectángulo.

La turbulencia atmosférica produce el mezclado completo de los contaminantes hasta la altura de mezclado, y no hay mezclado por encima de esta altura.

Esta turbulencia es bastante fuerte en la dirección contra el viento de modo que la concentración del contaminante es uniforme en el volumen completo de aire que está sobre la ciudad y no a más altura, en el lado en la dirección del viento y en el lado contra el viento. Esta hipótesis es contraria a lo que se observa en la realidad.

El viento sopla en la dirección "X" con velocidad "U". Esta velocidad es constante e independiente del tiempo, lugar o elevación por encima del suelo. También esto es contrario a la observación; la velocidad del viento aumenta con la elevación.

La concentración del contaminante en el aire que entra a la ciudad es constante.

Ningún contaminante sale o entra por la parte superior de la caja, ni por los lados que no sean paralelos a la dirección del viento.

El contaminante en cuestión tiene una duración suficiente en la atmósfera como para suponer que la velocidad de destrucción es cero.

Una de las primeras aplicaciones del modelo de caja en el estudio de la dispersión de los oxidantes fotoquímicos fue realizada en la ciudad de Los Angeles por Hanna, (1973), quien encontró resultados satisfactorios

Sin embargo, posteriormente Venkatram, (1978), comparó los resultados de aplicar un modelo de caja con un campo de medidas experimentales, concluyendo que los modelos de caja son limitados para la modelización de los oxidantes, en contra de los que recomienda Schere y Demerjian, (1978).

1.3.2.2 Modelos Eulerianos o de Celdas Múltiples.

En este modelo el espacio de aire que se encuentra sobre una ciudad o región se divide en celdas múltiples y se emplea un sistema cartesiano de referencia.

Las ecuaciones cinéticas de difusión que describen la variación de la concentración de los contaminantes, a partir de condiciones iniciales se resuelven simultáneamente para cada una de estas celdas considerando la conservación de la masa.

El intercambio de masa entre las celdas está determinado por la advección, el campo de vientos y los procesos de difusión turbulenta.

El término **Advección** se define como el transporte de masa de una región a otra. Meteorológicamente son muy interesantes variables como la temperatura, la humedad, contaminantes, etc. La advección depende de dos factores.

- 1).- La fuerza del viento.
- 2).- El ángulo del viento relativo a las líneas de igual valor a las líneas de la variable que está siendo advectada.

La advección más fuerte ocurre cuando los vientos son orientados perpendicularmente a las isolinéas o líneas que se encuentran a un mismo nivel en concentraciones de contaminantes. No ocurre advección si las líneas de dirección del viento son paralelas a las isolinéas.

El tamaño mínimo de las celdas está limitado por la base de datos y por los recursos computacionales disponibles. En la práctica, para las zonas urbanas se emplea un tamaño de celda entre uno y cinco Km por lado. Los modelos más complejos incorporan las características topográficas de la región a modelar.

Con este modelo se consigue conocer la evolución temporal de los contaminantes dentro de cada una de las celdas.

La concentración de los contaminantes cambia en función del tiempo ya sea por la incorporación de nuevos contaminantes, por el transporte de contaminantes entre una celda y otra, por la difusión o por las reacciones químicas.

Este tipo de modelos presentan algunas desventajas en su aplicación, la primera es que se necesita una base de datos lo más completa posible, la segunda es que se requiere una buena capacidad de cómputo, debido a la cantidad de ecuaciones y a la complejidad inherente de los modelos. Sin embargo, estos modelos representan el único medio para la predicción de la distribución tridimensional de los contaminantes.

Una revisión importante de la aplicación del modelo Euleriano en la simulación del transporte y de la cinética química de los contaminantes fue realizada por Peters *et al.*, (1995).

Estos modelos han sido ampliamente utilizados en la modelización de la dispersión de los oxidantes fotoquímicos, como por ejemplo Keubler *et al.*, (1996); Hanna *et al.*, (1996); Lu *et al.*, (1996).

1.3.2.3 Modelos de Lagrange.

Los modelos de trayectoria describen el transporte de los contaminantes a través de un sistema de coordenadas en movimiento, o sistema Lagrangiano. Con estos modelos se analiza la variación temporal de los contaminantes contenidos en una columna hipotética de aire de dimensiones específicas

La columna de aire se mueve a lo largo de una trayectoria a través de un área de interés. La ecuación de conservación de la masa debe resolverse dentro de la columna tomando en cuenta el número de fuentes y sumideros, las reacciones químicas y el transporte por difusión turbulenta vertical, mientras que el transporte horizontal debido al campo de vientos se elimina por definición [Eschenroeder y Martínez, (1972); Wayne *et al.*, (1973)]. Esto último es una de las principales desventajas de los modelos de trayectoria ya que no producen distribuciones horizontales de las concentraciones de los contaminantes.

Tilden y Seinfeld, (1982), investigaron la sensibilidad de un modelo fotoquímico de trayectoria para el ozono. Encontraron que las proporciones de O_3 , NO_3 y VOC's en la mezcla, tienen muy poca dependencia de los coeficientes de difusión vertical de las velocidades de deposición y de la humedad relativa.

3.2.4 Modelo Gaussiano.

La ecuación de difusión Gaussiana relaciona los niveles de inmisión en un punto con la cantidad de contaminantes vertidos a la atmósfera desde el foco emisor, teniendo en cuenta las condiciones de emisión de los gases y las características climáticas y topográficas del medio receptor.

El modelo calcula los niveles de inmisión en un punto de coordenadas $X(x, y, z)$, donde el origen del sistema de coordenadas se fija en la base de la chimenea, mediante la siguiente expresión:

$$X = \frac{Q K V D}{2 \cdot \pi \cdot u_s \cdot \sigma_y \cdot \sigma_z} \exp \left[-0.5 \left(\frac{y}{\sigma_y} \right)^2 \right]$$

Donde:

Q = caudal de contaminante emitido (masa por unidad de tiempo).

K = coeficiente de escala para convertir las concentraciones calculadas a las unidades deseadas.

V = alcance vertical.

D = periodo de degradación.

u_s = velocidad media del viento (m/s) en la altura de emisión.

σ_y , σ_z = desviación estándar de la distribución de concentración lateral y vertical (Parámetros de dispersión).

y = coordenada transversal a la dirección horizontal del viento.

Se hace necesario indicar que el término que define el alcance vertical, incluye los efectos de la elevación de la fuente, la elevación del receptor, elevación del penacho, mezclas limitadas en la vertical, efectos gravitacionales y la deposición seca de partículas (con diámetros mayores de 0.1 micrómetros).

1.3.3 Modelos comerciales de calidad del aire

Existen una gran variedad de modelos de calidad del aire, algunos son modelos puros o combinaciones de los siguientes modelos:

- Modelos de dispersión de contaminantes.
- Modelos meteorológicos.
- Modelos gaussianos.
- Modelos eulerrianos.
- Modelos lagrangianos.
- Modelos fotoquímicos.
- Modelos de advección y dispersión.
- Modelos de depositación.

Nuestro interés se enfoca sobre los modelos de dispersión atmosférica. De estos existe una gran variedad en el mercado, con diferente grado de sofisticación. Existen, por ejemplo, modelos de dispersión atmosférica con propósitos regulatorios: De penacho gaussiano, lagrangianos, eulerianos. Estos modelos se usan mucho en Europa como en EE.UU. Son aplicados al análisis particular de la dispersión y transformación de contaminantes en áreas o en problemas concretos, debido a sus altos requerimientos de cálculo como de información de entrada.

Los siguientes son modelos comerciales de dispersión para tres dimensiones, usan el modelo euleriano e incluyen las reacciones químicas de los contaminantes y pueden ser usados en las áreas urbanas:

- Calgrid [Yamartino *et al.*, (1992)].
- CIT [McRae and Seinfeld, 1983; Rusell *et al.*, (1988)].
- Drais [Tangerman-Dlugi and Fiedler, 1983; Nestr *et al.*, (1987)].
- Episode [Gronski, *et al.*, (1993)].
- Mars [Moussiopoulos *et al.*, (1995)].
- Match [Persson *et al.*, (1994)].
- UAM [Ames *et al.*, 1985; Chico and Lester, (1992)].

Estos modelos comerciales son desarrollados en su mayoría en el extranjero y son modelos diseñados para ser aplicados en lugares específicos con características propias del lugar, esto hace que sean funcionales a medias al ser aplicados en otro lugar y es necesario depender del fabricante o diseñador para efectuar cambios de adaptabilidad del modelo, con sus respectivos costos y demoras

El modelo computacional SIMCONT, es un modelo con código abierto que nos permite ser adaptado a cualquier lugar en estudio, además esta elaborado en un lenguaje ampliamente conocido (C++) y se tiene el código fuente del programa de este modelo, lo que nos permite poder modificarlo y eficientarlo.



Universidad Nacional Autónoma
de México

CAPITULO 2

MODELO MATEMÁTICO DE REACCIONES QUÍMICAS, PARA LA FORMACIÓN DEL SMOG FOTOQUÍMICO

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



CAPITULO 2

MODELO MATEMATICO DE REACCIONES QUÍMICAS, PARA LA FORMACIÓN DEL SMOG FOTOQUÍMICO.

Una de las mayores dificultades de la modelización de la difusión de los contaminantes atmosféricos es la integración numérica de las ecuaciones de cinética química.

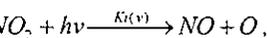
En este capítulo se presenta un método para resolver numéricamente estas ecuaciones.

2.1 Método numérico propuesto

La velocidad de reacción con respecto a un componente A cualquiera, se define como el cambio de concentración de este componente con respecto al tiempo:

$$r_A = \frac{d[A]}{dt}$$

Por ejemplo, en la reacción fotoquímica de disociación del NO_2



entonces que la velocidad de reacción con respecto al NO_2 , viene dada por:

$$r_{NO_2} = \frac{d[NO_2]}{dt} = -k_1[NO_2].$$

Es decir, la velocidad de reacción con respecto al NO_2 es la rapidez con que se consume. El signo menos indica que hay consumo de NO_2 .

De acuerdo con esta definición, la velocidad de reacción con respecto a un componente A cualquiera, la podemos representar por medio de una ecuación diferencial ordinaria.

Para calcular la rapidez de consumo del NO_2 es necesario tener la concentración inicial de este. Es decir, tendremos una ecuación diferencial ordinaria de primer orden, con una condición inicial.

En la notación común abreviada, el problema con condiciones iniciales, conocido como el problema del valor inicial o el problema de Cauchy, puede escribirse de la siguiente manera:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y), \\ y(x_0) = y_0. \end{cases}$$

Para el caso de las ecuaciones diferenciales ordinarias relevantes a la presente tesis, no se puede encontrar las soluciones analíticamente, así que se deben aplicar los métodos numéricos para hallar la solución aproximada.

Existe una gran variedad de métodos numéricos para el problema de valores iniciales [Press *et al.*, (1991)]. Al aplicar cualquier método (o esquema) numérico, se debe de asegurar la estabilidad. Para sistemas de ecuaciones diferenciales de reacciones químicas, se debe de tomar en cuenta también la rigidez del sistema, esta noción se introduce más adelante.

Sean $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$ los nodos; es decir, puntos discretos sobre el eje X .

La distancia $h = x_i - x_{i-1}$, ($i=1, 2, \dots$), se conoce como el paso del método, h es el parámetro que teóricamente tiende a cero:

$$h \rightarrow 0.$$

Sean $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n, \dots$ los valores de la solución exacta (desconocida) del problema del valor inicial. Cualquier método numérico nos permite calcular valores aproximados de la solución en los nodos x_i ($i=0, 1, \dots$). Sean $u_0, u_1, u_2, \dots, u_n, \dots$ estos valores aproximados.

Según la condición inicial, tenemos:

$$u_0 = y_0$$

En el presente trabajo utilizaremos el método de diferencias finitas. Es decir, vamos a sustituir la ecuación diferencial para una función continua $y(x)$ por un sistema de ecuaciones algebraicas para $u_0, u_1, u_2, \dots, u_n$, válidos en los nodos $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$.

Debido a la naturaleza de las ecuaciones diferenciales de las reacciones químicas, utilizamos primeramente el método semi-implícito [Press *et al.*, (1991)] Aquí introducimos este método para el caso de una sola ecuación. Después, presentamos este método para un sistema de las ecuaciones diferenciales ordinarias, donde discutiremos el concepto de la rigidez del sistema.

Sea

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y), \\ y(x_0) = y_0. \end{cases}$$

el problema de valor inicial a resolver.

En los nodos x_0, x_1, \dots la derivada dy/dx se aproxima como

$$\frac{dy}{dx} \approx \frac{u_{n+1} - u_n}{h},$$

mientras que la función $f(x, y)$ se sustituye por

$$\frac{1}{2} [f(x_{n+1}, u_{n+1}) + f(x_n, u_n)].$$

El método semi-implícito se presenta por medio del sistema de las ecuaciones algebraicas no-lineales para u_1, u_2, \dots , como:

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{h} = \frac{1}{2} [f(x_{n+1}, u_{n+1}) + f(x_n, u_n)].$$

A continuación se presenta el método para resolver este sistema no-lineal.

Para una función $f(x)$ que posee " n " derivadas continuas en el punto x_0 podemos usar la fórmula de Taylor, según la cual dice:

$$f(x_0 + a) = f(x_0) + af'(x_0) + \frac{a^2}{2!} f''(x_0) + \dots + \frac{a^n}{n!} f^{(n)}(x_0) + O(a^{n+1}).$$

Ahora, al segundo argumento de la función $f(x_{n+1}, u_{n+1})$, le sumamos y restamos u_n , ordenando tenemos:

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2} [f(x_{n+1}, u_n + (u_{n+1} - u_n)) + f(x_n, u_n)]$$

y aplicando la fórmula de Taylor, tenemos:

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2} [f(x_{n+1}, u_n) + (u_{n+1} - u_n) \frac{\partial f(x_{n+1}, u_n)}{\partial y} + \dots + f(x_n, u_n)];$$

sustituyendo $a = u_{n+1} - u_n$, tenemos:

$$a = \frac{h}{2} [f(x_{n+1}, u_n) + a \frac{\partial f(x_{n+1}, u_n)}{\partial y} + \dots + f(x_n, u_n)]$$

ó

$$a = \frac{h}{2} \frac{[f(x_{n+1}, u_n) + f(x_n, u_n)]}{1 - \frac{h}{2} \frac{\partial f(x_{n+1}, u_n)}{\partial y}}$$

Ahora podemos calcular u_{n+1} en función de valores conocidos:

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2} \frac{[f(x_{n+1}, u_n) + f(x_n, u_n)]}{1 - \frac{h}{2} \frac{\partial f(x_{n+1}, u_n)}{\partial y}}$$

Ahora bien, en el estudio de química atmosférica no estamos tratando con una sola reacción, sino con una serie de reacciones las cuales van a generar un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales, de la siguiente forma general.

$$\frac{dc_i}{dt} = f_i(c_1, c_2, \dots, c_p, t) \quad i = 1, 2, \dots, N;$$

con sus condiciones iniciales:

$$c_i(0) = c_i^0 \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

Donde c_1, c_2, \dots, c_n representan las concentraciones de los contaminantes químicos.

Se debe hacer notar que en este tipo de sistema la variable independiente t , no aparece explícitamente en las funciones $f_i(i = 1, 2, \dots, N)$. A este tipo de sistema se le conoce como sistema autónomo.

Este sistema también lo podemos representar de la siguiente forma:

$$\frac{dc}{dt} = f(c, t),$$

con sus condiciones iniciales:

$$c(t_0) = c_0.$$

Donde c es el arreglo de las concentraciones de los contaminantes químicos, f es el arreglo de las ecuaciones cinéticas de los contaminantes químicos, t es el tiempo de simulación empezando en $t = t_0$, y c_0 es el arreglo de las concentraciones iniciales de los contaminantes químicos en el tiempo $t = t_0$.

La matriz J de las derivadas del arreglo f es una matriz cuadrada con elementos definidos por:

$$J_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial c_j}; \quad i, j = 1, 2, \dots, N.$$

Donde N es el número total de contaminantes químicos. El determinante de esta matriz se conoce como Jacobiano.

Hay dos dificultades que aparecen en la integración numérica de este sistema, una es de menor importancia y se refiere a la no-linealidad de los polinomios de las ecuaciones cinéticas. El problema más serio es que en los mecanismos de reacción atmosféricos hay reacciones cuyas características en las escalas de tiempo (constantes de velocidad) difieren en varios órdenes de magnitud. Estos sistemas se conocen como sistemas rígidos.

En forma más exacta, un sistema rígido se define si se cumplen las siguientes condiciones: [McRae, Goodin y Seinfeld, (1982)].

$$\text{Re}(\lambda_i) < 0; \quad i = 1, 2, \dots, N;$$

$$[\max |\operatorname{Re}(\lambda_i)|] / [\min |\operatorname{Re}(\lambda_i)|] = R \gg 1.$$

Donde R es la relación de rigidez y $\operatorname{Re}(\lambda_i)$ es la parte real de los valores característicos o eigenvalores de la matriz J arriba definida [Seinfeld y Spyros, (1997)]

En la solución de los sistemas rígidos de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales generados por un mecanismo de reacción, los contaminantes con las escalas características de tiempo más pequeñas, por ejemplo los radicales, determinan el máximo paso en tiempo posible para mantener una solución estable. Como este paso en tiempo será muy pequeño se requerirá de un gran esfuerzo de cálculo. Generalmente, este problema se puede subsanar utilizando métodos implícitos o semi-implícitos [Press *et al.*, (1992)].

Como ejemplo consideremos las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$y' = f_1(x, y, z),$$

$$z' = f_2(x, y, z),$$

con las siguientes condiciones iniciales:

$$y(x_0) = y_0,$$

$$z(x_0) = z_0.$$

Entonces, si u_n y v_n son valores aproximados de y_n y z_n respectivamente; utilizando el método semi-implícito, tenemos:

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{h} = \frac{1}{2} [f_1(x_{n+1}, u_{n+1}, v_{n+1}) + f_1(x_n, u_n, v_n)];$$

$$\frac{v_{n+1} - v_n}{h} = \frac{1}{2} [f_2(x_{n+1}, u_{n+1}, v_{n+1}) + f_2(x_n, u_n, v_n)].$$

Sea A el punto $(x_{n+1}, u_{n+1}, v_{n+1})$ y I el punto (x_n, u_n, v_n) ; entonces usando la formula de Taylor obtenemos las siguiente ecuaciones lineales:

$$u_{n+1} - u_n = \frac{h}{2} [f_1(A) + (u_{n+1} - u_n) \frac{\partial f_1(A)}{\partial y} + (v_{n+1} - v_n) \frac{\partial f_1(A)}{\partial z} + \dots + f_1(I)];$$

$$v_{n+1} - v_n = \frac{h}{2} [f_2(A) + (u_{n+1} - u_n) \frac{\partial f_2(A)}{\partial y} + (v_{n+1} - v_n) \frac{\partial f_2(A)}{\partial z} + \dots + f_2(I)];$$

si definimos:

$$a_n = u_{n+1} - u_n,$$

$$b_n = v_{n+1} - v_n,$$

entonces, ignorando todos los términos en las fórmulas de Taylor salvo a los escritos, tenemos:

$$a_n = \frac{h}{2} f_1(A) + \frac{h}{2} a_n \frac{\partial f_1(A)}{\partial y} + \frac{h}{2} b_n \frac{\partial f_1(A)}{\partial z} + \frac{h}{2} f_1(I);$$

$$b_n = \frac{h}{2} f_2(A) + \frac{h}{2} a_n \frac{\partial f_2(A)}{\partial y} + \frac{h}{2} b_n \frac{\partial f_2(A)}{\partial z} + \frac{h}{2} f_2(I).$$

Arreglando estas ecuaciones en forma matricial, tenemos:

$$\begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{h}{2} f_1(A) \\ \frac{h}{2} f_2(A) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{h}{2} f_1(I) \\ \frac{h}{2} f_2(I) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{h}{2} \frac{\partial f_1(A)}{\partial y} + \frac{h}{2} \frac{\partial f_1(A)}{\partial z} \\ \frac{h}{2} \frac{\partial f_2(A)}{\partial y} + \frac{h}{2} \frac{\partial f_2(A)}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix};$$

entonces:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{h}{2} \frac{\partial f_1(A)}{\partial y} & \frac{h}{2} \frac{\partial f_1(A)}{\partial z} \\ \frac{h}{2} \frac{\partial f_2(A)}{\partial y} & \frac{h}{2} \frac{\partial f_2(A)}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{h}{2} f_1(A) + \frac{h}{2} f_1(I) \\ \frac{h}{2} f_2(A) + \frac{h}{2} f_2(I) \end{pmatrix};$$

por lo tanto:

$$\begin{pmatrix} 1 - \frac{h}{2} \frac{\partial f_1(A)}{\partial y} & -\frac{h}{2} \frac{\partial f_1(A)}{\partial z} \\ -\frac{h}{2} \frac{\partial f_2(A)}{\partial y} & 1 - \frac{h}{2} \frac{\partial f_2(A)}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{h}{2} f_1(A) + \frac{h}{2} f_1(I) \\ \frac{h}{2} f_2(A) + \frac{h}{2} f_2(I) \end{pmatrix}.$$

Resolviendo estas ecuaciones lineales, encontramos los valores de a_n y b_n ; por lo tanto los valores de

$$u_{n+1} \text{ y de } v_{n+1}.$$

2.2 Modelación matemática del mecanismo de reacción propuesto.

Las características que se tomaron en cuenta para poder elegir un mecanismo o esquema de reacciones químicas para incorporarlo en el modelo computacional SIMCONT, fueron las siguientes:

• Ser un mecanismo que involucre entre sus reacciones químicas, contaminantes que por su grado de reactividad puedan ser sentidos por los equipos de medición de la Cd. de México, además que estos contaminantes no sean más de 15, de tal manera que nuestro modelo no sea tan complejo en sus cálculos computacionales y no requiera de grandes recursos de cómputo.

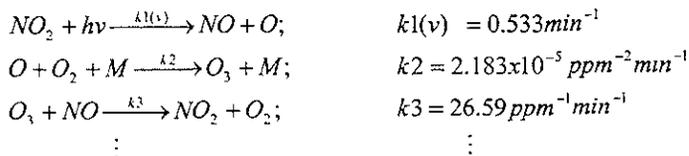
En el CIT¹ se desarrolló un programa en lenguaje Pascal utilizando el método semi-implícito para resolver sistemas rígidos de ecuaciones diferenciales ordinarias. Aprovechamos este software para resolver numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales generadas por cada uno de los siguientes mecanismos de reacciones químicas.

- Ciclo fotoquímico básico [Seinfeld, (1977)].
- Sistema de reacciones químicas NO_x-Aire seco [Seinfeld, (1978)].
- Mecanismo de reacción generalizado de formación de smog fotoquímico [Seinfeld, (1986)].

Los resultados obtenidos nos permitieron concluir que el primer y segundo sistema de reacciones químicas, explican la formación del smog fotoquímico u ozono, pero no explican los niveles o grados de ozono medidos en una atmósfera contaminada. El mecanismo de reacciones generalizado propuesto por Seinfeld, (1986). Cumple con nuestras necesidades planteadas y además explica los niveles de smog fotoquímico medidos en una atmósfera contaminada.

2.2.1 Mecanismo de reacción generalizado de formación de smog fotoquímico.

Este mecanismo de reacciones químicas para la formación de smog fotoquímico, fue propuesto por Seinfeld, (1986). Para este mecanismo, los niveles de ozono detectados en áreas contaminadas se deben a mecanismos de reacción complicados entre los óxidos de nitrógeno y los compuestos orgánicos volátiles en presencia de luz solar:



Las constantes de velocidad ($k_1, k_2 \dots k_{11}$) de las reacciones fotoquímicas de disociación, dependen de la intensidad de luz [Seinfeld, (1977)]

El total de las reacciones de este mecanismo se muestra en la Tabla 2.1

Centro de Investigaciones Teóricas, Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, Universidad Nacional Autónoma de México

El sistema de ecuaciones diferenciales que representan a las reacciones químicas de este mecanismo, se muestran en la Tabla 2.2.

Tabla 2.1 Mecanismo de reacción generalizado de formación del smog fotoquímico.

Reacción	Constante de velocidad	Constante de velocidad (298°K)
$\text{NO}_2 + h\nu \rightarrow \text{NO} + \text{O}$	0.533 min ⁻¹ (supuesto) (Seinfeld)	0.533 min ⁻¹
$\text{O} + \text{O}_3 + \text{M} \rightarrow \text{O}_3 + \text{M}$	$6.0 \times 10^{-24} (T/300) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-2} \text{ s}^{-1}$	$2.183 \times 10^{-25} \text{ ppm}^{-2} \text{ min}^{-1}$
$\text{NO} + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}_2$	$2.2 \times 10^{-12} \exp(-1430/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-2} \text{ s}^{-1}$	$26.59 \text{ ppm}^{-2} \text{ min}^{-1}$
$\text{RH} + \text{OH} \rightarrow \text{RO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$1.68 \times 10^{-11} \exp(-559/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-2} \text{ s}^{-1}$	$3.775 \times 10^{-2} \text{ ppm}^{-2} \text{ min}^{-1}$
$\text{RCHO} + \text{OH} \rightarrow \text{RC(O)O}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$6.9 \times 10^{-12} \exp(256/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-2} \text{ s}^{-1}$	$2.341 \times 10^{-2} \text{ ppm}^{-2} \text{ min}^{-1}$
$\text{RCHO} + h\nu \rightarrow \text{RO}_2 + \text{HO}_2 + \text{CO}$	$1.91 \times 10^{-4} \text{ min}^{-1}$ (supuesto) (Seinfeld)	$1.91 \times 10^{-4} \text{ min}^{-1}$
$\text{HO}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{OH}$	$3.7 \times 10^{-11} \exp(240/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-2} \text{ s}^{-1}$	$1.214 \times 10^{-2} \text{ ppm}^{-2} \text{ min}^{-1}$
$\text{RO}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{RCHO} + \text{HO}_2$	$4.2 \times 10^{-10} \exp(180/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-2} \text{ s}^{-1}$	$1.127 \times 10^{-4} \text{ ppm}^{-2} \text{ min}^{-1}$
$\text{RC(O)O}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{RO}_2 + \text{CO}_2$	$4.2 \times 10^{-10} \exp(180/T) \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-2} \text{ s}^{-1}$	$1.127 \times 10^{-4} \text{ ppm}^{-2} \text{ min}^{-1}$
$\text{OH} + \text{NO}_2 \rightarrow \text{HNO}_3$	$1.1 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-2} \text{ s}^{-1}$	$1.613 \times 10^{-2} \text{ ppm}^{-2} \text{ min}^{-1}$
$\text{RC(O)O}_2 + \text{NO}_2 \rightarrow \text{RC(O)O}_2\text{NO}_2$	$4.7 \times 10^{-14} \text{ cm}^3 \text{ molecula}^{-2} \text{ s}^{-1}$	$6.893 \times 10^{-2} \text{ ppm}^{-2} \text{ min}^{-1}$
$\text{RC(O)O}_2\text{NO}_2 \rightarrow \text{RC(O)O}_2 + \text{NO}_2$	$1.95 \times 10^{-16} \exp(-3543/T) \text{ s}^{-1}$	$2.143 \times 10^{-2} \text{ min}^{-1}$

Tabla 2.2 Ecuaciones diferenciales de los mecanismos de reacción generalizado para la formación de smog fotoquímico.

Las constantes $c_M=79 \times 10^4$ ppm y $c_{O_2}=21 \times 10^4$ son concentraciones del N_2 y O_2 en el aire [Seinfeld, (1977, 1986)]

$$\frac{d[NO]}{dt} = k1[NO_2] - k3[O_3][NO] - k7[NO][HO_2] - k8[NO][RO_2] - k9[NO][RC(O)O_2].$$

$$\frac{d[NO_2]}{dt} = -k1[NO_2] + k3[O_3][NO] + k7[NO][HO_2] + k8[NO][RO_2] + k9[NO][RC(O)O_2] - k10[NO_2][OH] - k11[NO_2][RC(O)O_2] + k12[RC(O)O_2NO_2].$$

$$\frac{d[O_3]}{dt} = k2[O][c_{O_2}][c_M] - k3[O_3][NO].$$

$$\frac{d[O]}{dt} = k1[NO_2] - k2[O][c_{O_2}][c_M].$$

$$\frac{d[RH]}{dt} = -k4[RH][OH].$$

$$\frac{d[OH]}{dt} = -k4[RH][OH] - k5[OH][RCHO] + k7[NO][HO_2] - k10[NO_2][OH].$$

$$\frac{d[RO_2]}{dt} = k4[RH][OH] + k6[RCHO] - k8[NO][RO_2] + k9[NO][RC(O)O_2].$$

$$\frac{d[RCHO]}{dt} = -k5[OH][RCHO] - k6[RCHO] + k8[NO][RO_2].$$

$$\frac{d[RC(O)O_2]}{dt} = k5[OH][RCHO] - k9[NO][RC(O)O_2] - k11[NO_2][RC(O)O_2] + k12[RC(O)O_2].$$

$$\frac{d[HO_2]}{dt} = k6[RCHO] - k7[NO][HO_2] + k8[NO][RO_2].$$

$$\frac{d[RC(O)O_2NO_2]}{dt} = k11[NO_2][RC(O)O_2] - k12[RC(O)O_2NO_2].$$

2.3.1 Organización de CVODE

Los módulos que componen al paquete CVODE se muestran en la Figura 2.1.

El Programa de Usuario tiene las siguientes características esenciales:

- Incluye instrucciones *#include* para acceder a archivos de cabecera de CVODE.
- Asignación y carga de entradas a CVODE.
- Llamada a *CvodeMalloc* para asignar memoria a CVODE.
- Si se selecciona "Newton iteración" se efectuará una llamada de *CVDense*, *CVBand*, *CVDiag* o *CVSpgmr*, y seleccionará el módulo que se haya elegido.
- Un ciclo de llamadas a CVODE para integración.
- Llamadas a *CvodeFree* para liberar toda la memoria de CVODE, asignada con *CvodeMalloc*.
- Congelamiento de la asignación de memoria cuando la integración se ha efectuado (*N_Vfree*).
- El uso de la función *f* definida por $f(t,y)$.
- Jac proporciona una aproximado jacobiano en los casos directos (*CVDense*, *CVBand*).
- Precond y Psolve proporcionan las precondiciones para el caso Krylov (*CVSpgmr*).

El módulo CVODE integrador, nos proporciona estrictamente cual es el tiempo de integración y es completamente independiente del método usado para resolver el sistema lineal.

Un arreglo de módulos de solución es parte del paquete y el bloque integrador, se conecta con cada uno de ellos de acuerdo a la selección del usuario. Existen cuatro bloques para seleccionar CVDENSE, CVBAND, CVDIAG y CVSPGMR.

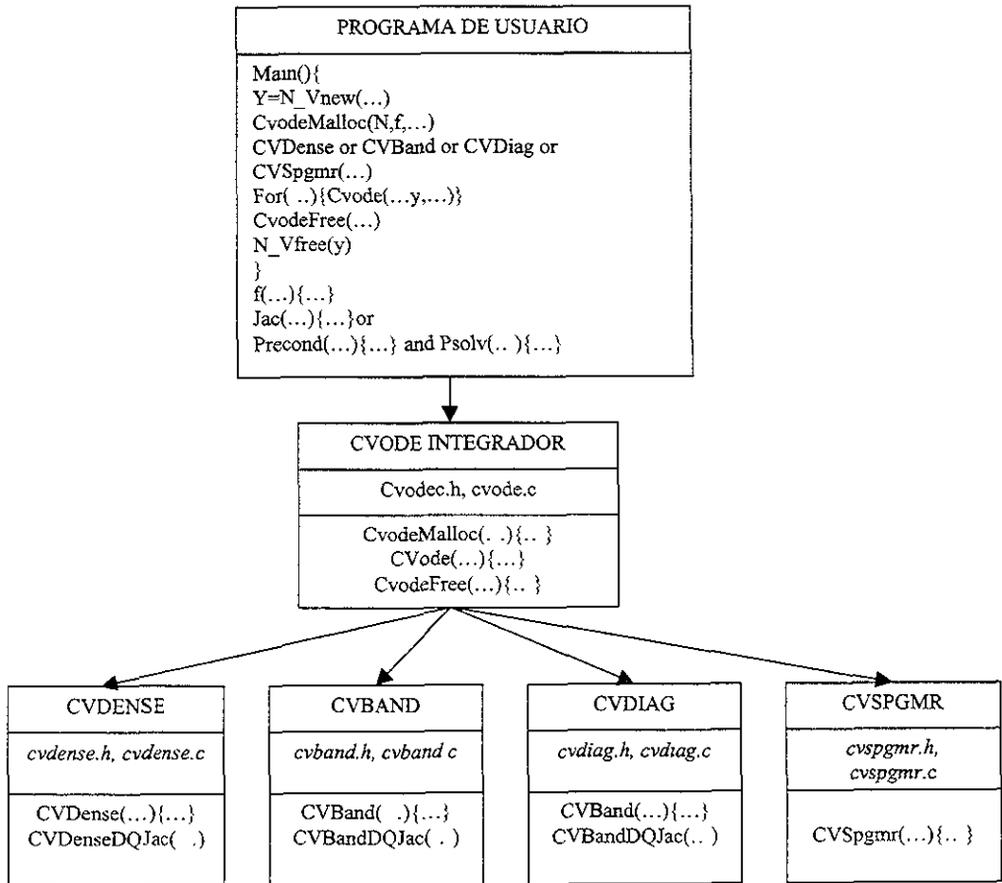


Figura 2.1 Estructura de CVODE

CVODE incluye un módulo VECTOR el cual contienen el KERNEL para las operaciones del vector. Todas las operaciones N-Vectors son hechas por llamadas a este bloque.

Dos pequeños módulos manejan lo referente a la precisión aritmética y al bajo nivel de operaciones matemáticas. El módulo de LLNLTYPS contiene declaraciones para los tipos real y enteros. De tal modo que es muy fácil cambiar de una doble precisión a uno de simple precisión y viceversa. El modulo LLNLMATH contienen macros para operaciones tales como MAX y MIN, funciones de potencia, y rutinas para cálculos.

El paquete CVODE está integrado en el programa original SIMCONT desarrollado en esta tesis.



**Universidad Nacional Autónoma
de México**

CAPITULO 3

MODELO DE CALIDAD DEL AIRE PARA LA CONTAMINACIÓN POR OZONO EN LA CIUDAD DE MÉXICO

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



CAPITULO 3

MODELO DE CALIDAD DEL AIRE PARA LA CONTAMINACIÓN POR OZONO EN LA CIUDAD DE MÉXICO.

El problema de la contaminación del aire debido a la formación del smog fotoquímico, representado por el ozono, es de difícil control ya que por tratarse de un contaminante secundario su concentración en la atmósfera no cambia en las mismas proporciones de cambio de sus precursores. Por lo tanto, el impacto de los programas ambientales desarrollados para su control es de difícil evaluación.

El desarrollo de modelos teóricos de procesos de difusión, transporte y transformación de los contaminantes químicos en la atmósfera, que constituyen los modelos de calidad del aire, son una herramienta valiosa para predecir los cambios en las concentraciones de los distintos contaminantes a lo largo del día o en periodos mayores.

Estos modelos además permiten predecir las variaciones en las concentraciones de los distintos contaminantes como resultado de los cambios en las condiciones iniciales, lo cual permite evaluar la efectividad de los programas de control de la contaminación del aire.

En la simulación se puede hacer la combinación de varias opciones con el fin de establecer las estrategias que nos puedan dar mejores resultados, en cuanto al control de la contaminación se refiere.

En este capítulo se desarrolla el método numérico para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales parciales de difusión-advención, para un conjunto de 11 contaminantes químicos en un dominio tridimensional. Se describe el dominio del problema para aplicar el modelo computacional "SIMCONT" para la simulación del ozono, del óxido nítrico y del dióxido de nitrógeno en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México. Se mencionan algunas técnicas de interpolación de datos que pueden ser usadas para obtener la base de datos inicial de los contaminantes dispersos en la malla del dominio del problema.

3.1 Esquema numérico del modelo de calidad del aire propuesto.

El modelo de calidad del aire propuesto resuelve numéricamente el sistema de las ecuaciones de difusión y advección para un conjunto de N contaminantes químicos, en un dominio Ω tridimensional ($0 < x < L_x$, $0 < y < L_y$, $0 < z < L_z$).

$$\begin{array}{ccc} \text{ADVECCIÓN EN 3D} & & \text{DIFUSIÓN EN 3D} \\ \leftarrow & & \rightarrow \\ \frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial(uc_i)}{\partial x} + \frac{\partial(vc_i)}{\partial y} + \frac{\partial(wc_i)}{\partial z} = R_i + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c_i}{\partial z} \right), \end{array}$$

$i = 1, \dots, N$;

donde:

- c_i Es la concentración de la especie química i .
- u, v, w Son los componentes del vector velocidad del viento.
- K_x, K_y, K_z Son los coeficientes de difusión turbulenta.
- R_i Es el término que representa las reacciones químicas en fase gaseosa.

Para encontrar una solución particular de este sistema de ecuaciones diferenciales parciales no lineales acopladas, se necesitan establecer las condiciones iniciales y de frontera.

Sean $c(x, y, z, t)$ la concentración de la especie i , en un punto de nuestro dominio en el tiempo t , entonces las condiciones iniciales están dadas por:

$$c(x, y, z, 0) = \phi(x, y, z), \quad (x, y, z) \in \Omega.$$

Las condiciones de frontera están dadas como sigue [McRae, Goodin, Seinfeld, (1982)].

En las fronteras $x=0$ y $x=L_x$:

- Flujo de entrada en "x":

$$uc - K_x \frac{\partial c}{\partial x} = uc_m$$

- Flujo de salida en "x":

$$K_x \frac{\partial c}{\partial x} = 0.$$

donde c_m son las concentraciones en la frontera

Las condiciones en la frontera con $y=0$, $y=L_y$, se definen por:

- Flujo de entrada en "y":

$$vc - K_y \frac{\partial c}{\partial y} = uc_m.$$

- Flujo de salida en "y":

$$K_y \frac{\partial c}{\partial y} = 0.$$

Las condiciones en la frontera para $z=0$ y $z=L_z$, serán:

- Para $z=0$ (flujo de entrada en "z"):

$$Q_i = K_z \frac{\partial c_i}{\partial z}.$$

Donde Q_i es el flujo del contaminante i (emisiones en superficie)

- Para $z=L_z$ (Flujo de salida en "z"), suponemos flujo nulo, entonces:

$$K_z \frac{\partial c_i}{\partial z} = 0.$$

En la siguiente Figura 3.1 se observa el flujo de entrada (INFLOW) y el flujo de salida (OUTFLOW), corriente en una celda de la malla propuesta para cada una de las tres dimensiones.

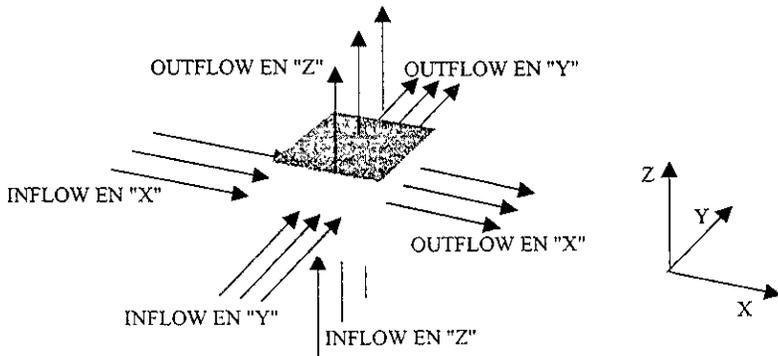


Figura 3.1

El problema tridimensional planteado por la ecuación de difusión puede ser resuelto empleando particiones para reducir el problema a una secuencia de ecuaciones en una dimensión [McRae *et al.*, (1982)]:

$$1. \frac{\partial c_i}{\partial t} = K_x \frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} - \frac{\partial (uc_i)}{\partial x}$$

$$2. \frac{\partial c_i}{\partial t} = K_y \frac{\partial^2 c_i}{\partial y^2} - \frac{\partial (vc_i)}{\partial y}$$

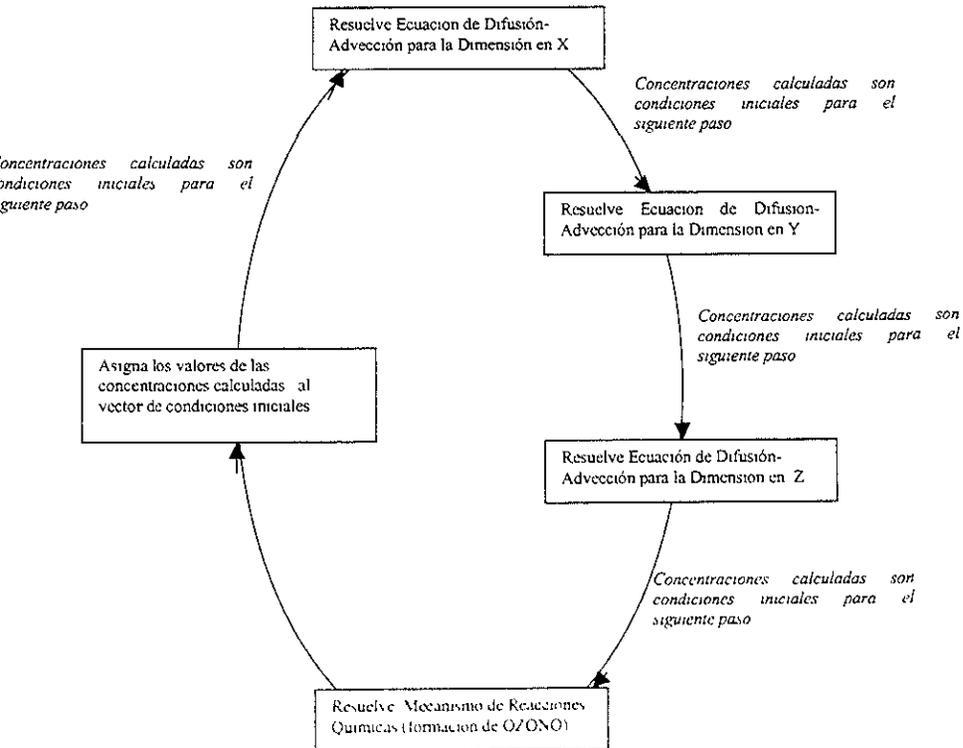
$$3. \frac{\partial c_i}{\partial t} = K_z \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} - \frac{\partial (wc_i)}{\partial z}$$

La primera partición (ecuación de difusión en la dimensión x), se resuelve con las condiciones iniciales y de frontera $x=0$ y $x=Lx$.

Las concentraciones calculadas para cada nodo $(x, y, z) \in \Omega$, serán las concentraciones iniciales para la ecuación de difusión en la dimensión y. Las concentraciones calculadas al resolver esta partición, serán a su vez las concentraciones iniciales para la ecuación de difusión en la dimensión z.

Las concentraciones calculadas en este último paso serán las condiciones iniciales para el mecanismo de reacción químico utilizado; Estas concentraciones serán a su vez las concentraciones iniciales para el siguiente paso en el tiempo (Ver la Figura 3.2).

Figura 3.2 Solución al problema tridimensional de la ecuación de Difusión-Advección



um y Cho, (1997), demostraron que este método de particiones es muy eficiente cuando las sustancias involucradas en el mecanismo químico son muy reactivas.

La forma de resolver el sistema de ecuaciones diferenciales parciales por medio de un método numérico consiste en reemplazar las derivadas parciales por sus aproximaciones en diferencias finitas, convirtiendo el sistema de ecuaciones diferenciales en un sistema de ecuaciones algebraicas

Definamos el valor numérico de la concentración en un nodo (m, n, k) de la malla $\{(mh_x, nh_y, kh_z)\}$, en el tiempo t como

$$c_{m,n,k}^t, \left\{ \begin{array}{l} m=0,1,2,\dots,N_x \\ n=0,1,2,\dots,N_y \\ k=0,1,2,\dots,N_z \end{array} \right\}$$

La expresión numérica de la ecuación de difusión en la dimensión x , para el primer paso en el tiempo $t=1$, estará representada por:

$$c_{m,n,k}^1 - c_{m,n,k}^0 + \left\{ \begin{array}{l} \frac{u_{m,n,k}^1 c_{m,n,k}^1 - u_{m-1,n,k}^1 c_{m-1,n,k}^1}{h_k}, \quad u_{m,n,k}^1 \geq 0 \\ \frac{u_{m+1,n,k}^1 c_{m+1,n,k}^1 - u_{m,n,k}^1 c_{m,n,k}^1}{h_k}, \quad u_{m,n,k}^1 < 0 \end{array} \right\} \\ = \frac{K_v}{2} \frac{c_{m-1,n,k}^1 - 2c_{m,n,k}^1 + c_{m+1,n,k}^1}{h_x^2} + \frac{K_v}{2} \frac{c_{m-1,n,k} - 2c_{m,n,k} + c_{m+1,n,k}}{h_x^2}$$

donde la segunda derivada, $\partial^2 c_i / \partial x^2$, se representa de acuerdo al esquema implícito de Crank Nicolson (ver anexo 4).

Para entender a que tipo de sistema algebraico se transforma este esquema numérico, supongamos la ecuación de difusión en la dimensión x con $u < 0$ y flujo saliente en las fronteras.

Entonces para $m=1,2,\dots,N_x-1$, tenemos:

$$c_{m,n,k}^1 - c_{m,n,k}^0 = \frac{K_v}{2} \frac{c_{m-1,n,k}^1 - 2c_{m,n,k}^1 + c_{m+1,n,k}^1}{h_x^2} + \frac{K_v}{2} \frac{c_{m-1,n,k} - 2c_{m,n,k} + c_{m+1,n,k}}{h_x^2} \\ - \frac{u_{m+1,n,k}^1 c_{m+1,n,k}^1 - u_{m,n,k}^1 c_{m,n,k}^1}{h_k}$$

definimos:

$$K_1 = \frac{K_x \Delta t}{2h_x^2} \quad y \quad K_2 = \frac{\Delta t}{h_x}$$

entonces tenemos:

$$-K_1 c_{m-1,n,k} + (2K_1 - 1)c_{m,n,k} - K_1 c_{m+1,n,k} = K_1 c_{m-1,n,k}^1 + (K_2 u_{m,n,k}^1 - 1 - 2K_1)c_{m,n,k}^1 + (K_1 - K_2 u_{m+1,n,k}^1)c_{m+1,n,k}^1,$$

$$m = 1, 2, 3, \dots, N_x - 1).$$

Este sistema de $N_x - 1$ ecuaciones algebraicas tienen $N_x + 1$ incógnitas (valores de la concentración en el tiempo $t + \Delta t$).

Por lo tanto para resolver el sistema son necesarias dos ecuaciones adicionales, las cuales corresponden a las condiciones de frontera.

Entonces para $m=0$ y $m=N_x$, tenemos las siguientes condiciones de frontera, cuya aproximación numérica la expresaremos utilizando el método de puntos falsos (ver anexo 4).

$$\frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{m=0,n,k,t} = 0 = \frac{c_{1,n,k}^1 - c_{-1,n,k}^1}{2h_x}$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=N_x+1,n,k,t} = 0 = \frac{c_{N_x+1,n,k}^1 - c_{N_x-1,n,k}^1}{2h_x}$$

Para cada n, k se obtiene un sistema tridiagonal de $N_x + 1$ incógnitas, el cual puede ser resuelto mediante el algoritmo de Thomas [Press *et al.*, (1992)]. Este algoritmo se programó y tiene el nombre de PROGON en el modelo computacional SIMCONT

3.2 Descripción del dominio de Modelización.

La Zona Metropolitana de la Cd. de México (ZMCM), contiene dos entidades federativas. El Distrito Federal (DF) y los suburbios del Estado de México que fronterizan con el D.F.

El área urbana mostrada en la Figura 3.3, tiene una extensión cercana a 2396 Km² y comprende ambas secciones del DF y Edo. de México

El modelo SIMCONT se aplicó sobre una pequeña región de 70 Km (oeste-este) por 80 Km (sur-norte) dentro de lo que es la ZMCM, tal y como se muestra en el recuadro interior de la Figura 3.3.

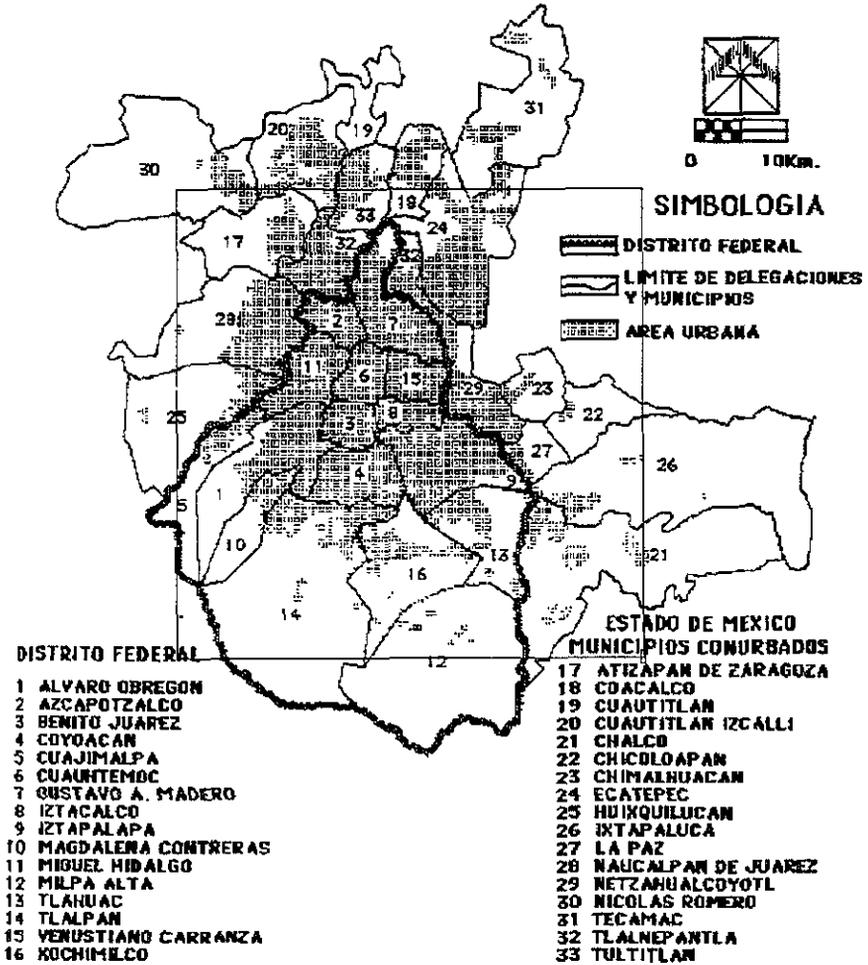


Figura 3.3 Zona Metropolitana de la Ciudad de México.

Utilizamos un modelo Euleriano o de celdas múltiples. El área total de modelización, se dividió en una malla de 14 x 16 celdas, cada una de ellas con un área de 25 Km² (ver Figura 3.4 y Figura 3.5)

El origen de la malla corresponderá a la esquina sudoeste coordenadas $UTM_x^2=450,000$ en la dirección este-este y $UTM_y=2,110,000$ en la dirección sur-norte. En la dirección vertical se consideran 5 capas; por lo tanto en total se tienen 1 120 celdas.

Para cada una de estas celdas se estudia el proceso de formación, transformación, difusión y advección de 11 contaminantes considerados los más dañinos y los que por el momento se pueden obtener datos de acuerdo a las estaciones de medición disponibles.

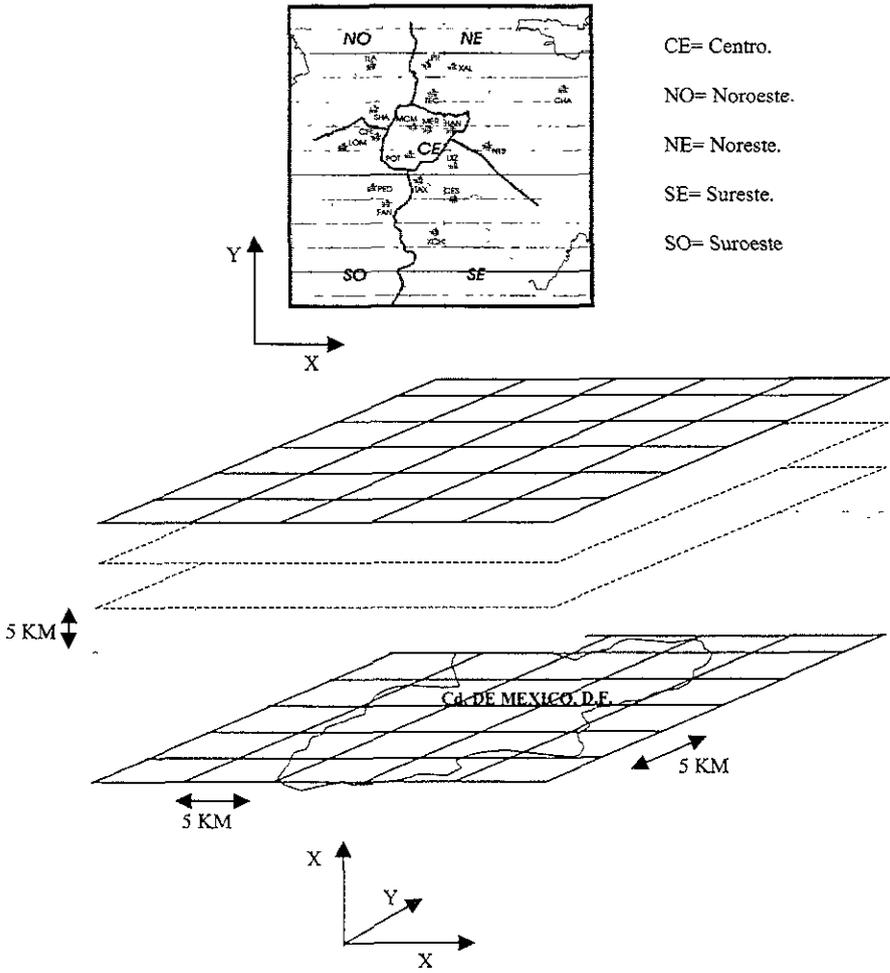


Figura 3.4 Dominio del problema, división de la Cd. de México en múltiples celdas.

Los datos de medidas de concentraciones iniciales, por lo general, se encuentran esparcidos irregularmente en el dominio de modelización y es necesario obtener un campo de concentraciones iniciales extendidos a la malla computacional. Esto se logra utilizando técnicas de interpolación lo cual se explica más adelante.

Aplicar el modelo de calidad del aire en estas celdas, nos permitirá tener un conocimiento de los índices de contaminación de cada uno de los contaminantes en estudio, además de su transformación, difusión y advección en el tiempo, de los contaminantes en dicha celda.

Las ecuaciones cinéticas de difusión que describen la variación de la concentración de los contaminantes, a partir de condiciones iniciales se resuelve simultáneamente para cada una de estas celdas considerando la conservación de la masa.

El intercambio de masa entre las celdas está determinado por la advección, el campo de vientos y los procesos de difusión turbulenta. El tamaño mínimo de las celdas está limitado por la base de datos y por los recursos computacionales disponibles.

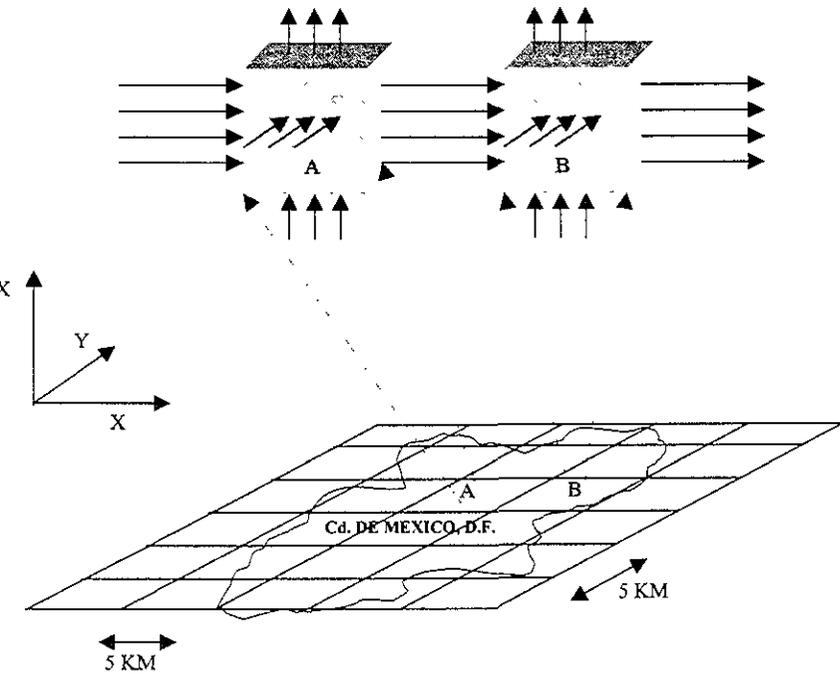


Figura 3.5 Aplicación del modelo Euleriano en el dominio del problema.

El día base de nuestro estudio será el 24 de marzo del 2000, debido a que para este día conocemos los datos de viento en superficie. Estos datos fueron proporcionados por la R.A.M.A. así como las mediciones realizadas este día de O_3 , NO_x , NO_2 y temperatura en las estaciones de monitoreo. Los datos de concentraciones iniciales y temperaturas los tomaremos a las 8:00 A.M. y son los que se muestran en el Anexo No 3.

utilizaremos el mecanismo de reacción propuesto por Seinfeld, (1986), como mecanismo de reacción químico.

La base de datos de las concentraciones iniciales de RH y RCHO para el mecanismo generalizado de formación del smog fotoquímico se prepara tomando en cuenta una baja relación de VOC's/NO_x (0.33) y posteriormente se incrementa a una relación VOC's/NO_x (1.33) y finalmente a VOC's/NO_x (6.66). con esto se espera que el modelo sea consistente y se produzcan mayores concentraciones de ozono, sobre toda el área de modelización.

La base de datos de los flujos de contaminantes se preparó de acuerdo al inventario de emisión (RAMA, 2000).

Se diseñó el programa "SIMCONT" en lenguaje C++ para resolver las ecuaciones de difusión-advección, en base al esquema numérico seleccionado y que se explica en el siguiente capítulo. El paso en tiempo para resolver las ecuaciones de difusión-advección en una dimensión, fue de 10 segundos.

3.3 Interpolación de los datos iniciales.

Un problema que se presenta en la modelización de la dispersión de los contaminantes atmosféricos es la preparación de la base de datos iniciales. Por lo regular se cuenta con datos dispersos en el área de estudio. En el caso de la Cd de México, se tienen varias estaciones de monitoreo y la mayoría se encuentran mal distribuidas, encontrándose algunas aglomeradas en ciertas regiones y otras muy aisladas, esto hace que los datos de contaminantes no se tengan bien definidos en ciertos puntos de la ZMCM.

Por lo tanto es necesario efectuar una interpolación de los datos originales para encontrar el valor en cada nodo de la malla de estudio. Debido a que la interpolación de un conjunto de datos dispersos no tiene una única solución, es importante elegir una técnica de interpolación que nos proporcione resultados realistas.

Varias técnicas de interpolación se encuentran reportadas en la literatura [Goodin *et al.*, (1979, 1980); Kumar y Rusell, (1996)].

En nuestro caso valoramos las técnicas propuestas por el llamado Kriging [Oliver, (1990)], y una técnica basada en la triangulación de Delaunay y diagramas de Voronoi [Eppstein, Aurenhammer, (2000)] .

Estos métodos toman en cuenta el número de estaciones dentro de un radio óptimo para realizar la interpolación. Estas técnicas de interpolación se encuentran disponibles en el software AEDA 0.8 elaboradas en la Tesis "Algoritmos de expansión de datos aplicados a problemas de contaminación atmosférica de la ciudad de México". Tesis elaborada en la Facultad de estudios Superiores Cuautitlán, por Ing. Francisco Iram Calvo Castro, en el año 2001.

3.3.1 Método de triangulación por diagramas de Voronoi.

Un diagrama de Voronoi da un conjunto de puntos en el plano, no es más que la subdivisión del mismo en regiones formadas por los lugares más próximos a cada uno de los puntos. De tal manera que se forman polígonos y cada polígono debe de contener exactamente un punto en su interior. Cada polígono corta la región que está más cerca de su punto contenido que cualquier otro punto

Figura 3.6 muestra un diagrama de Voronoi de una nube de puntos:

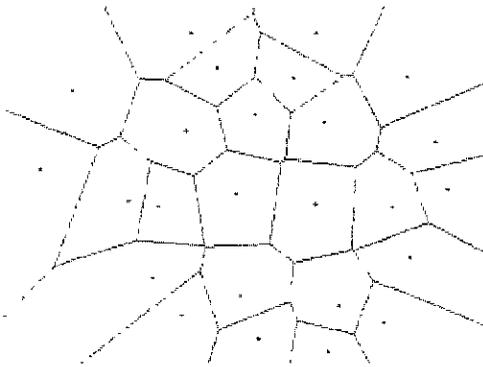


Figura 3.6

El diagrama de Voronoi es el dual de la triangulación de Delaunay. Esto quiere decir que podemos ir del diagrama de Voronoi a la triangulación de Delaunay dibujando las aristas que son perpendiculares a los segmentos de la región y viceversa (Figura 3.7).

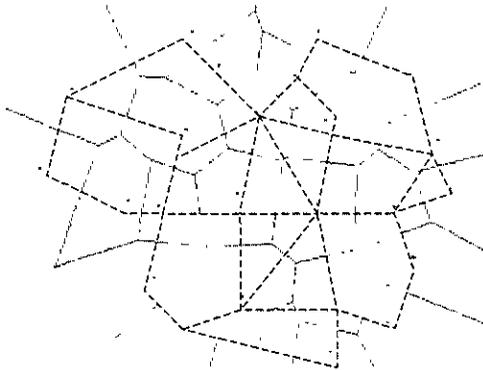


Figura 3.7

Después de que se efectúa la triangulación única de Voronoi, el paso siguiente es localizar los nodos de la malla regular y determinar si se encuentra contenido en un triángulo, para que de esta manera, utilizando ecuaciones conocidas de geometría analítica que describen a un plano en el espacio, podemos obtener los valores en los puntos de la retícula regular que se encuentran sobrepuestos a los triángulos generados.

3.2 Técnicas de Kriging

Las técnicas de Kriging es también llamada "predicción óptima". Es un método de interpolación que predice valores desconocidos de datos observados en ciertas localidades. Este método usa un variograma para expresar la variación espacial, y minimiza el error de los valores predichos que se estiman por la distribución espacial de los valores predichos (Figura 3.8).

Este método supone que la variación espacial de la variable a representar puede ser explicada al menos parcialmente mediante funciones de correlación espacial: la variación espacial de los valores a calcular pueden deducirse de los valores circundantes de acuerdo con unas funciones homogéneas en toda el área. Las funciones pueden deducirse analizando la correlación espacial entre los datos en función de la distancia entre ellos midiendo la semivarianza entre datos separados por distancias diferentes [Oliver y Webster, 1990].

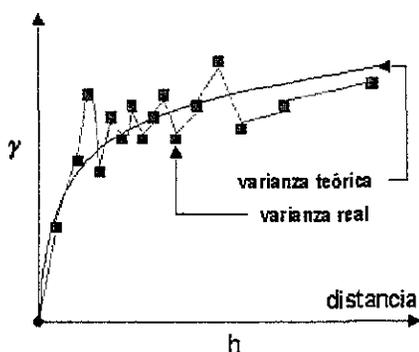


Figura 3.8 Ejemplo de semivariograma donde la varianza real se ajusta a una distribución teórica; ésta es la que se aplica para la estimación de los pesos en la interpolación.

3.4 Influencia del viento en la Dispersión de contaminantes atmosféricos.

El proceso natural de esparcimiento de un contaminante en la cercanía de la fuente donde se emite y que da lugar a concentraciones ambientales menores se denomina *dispersión*, ésta se realiza por medio de fenómenos de transporte (difusión y convección natural) y de dilución. En esencia, los factores responsables de la dispersión son los movimientos de la atmósfera los cuales, por su naturaleza, varían espacialmente y en función del tiempo. De esta manera, el comportamiento de una nube de material contaminante depende de la suma de todos los factores que actúan sobre aquella. [Quadri, Sánchez, (1994)]

Por ejemplo, dada la ocurrencia de viento a la altura en que se emite el contaminante, su dirección promedio indicará la trayectoria de viaje, mientras que su velocidad determinará el tiempo en que se deje sentir la influencia del contaminante en un punto determinado, así como su dilución en la atmósfera. Es claro que entre más intensamente sople el viento, más rápido viajará el contaminante y será también mayor su dispersión.

El viento es un fenómeno altamente variable, aún en periodos cortos y presenta componentes de velocidad en todas las direcciones, de tal forma que en la atmósfera ocurren simultáneamente movimientos verticales y horizontales que dan como resultado la dilución y el transporte de los contaminantes siguiendo la dirección promedio de estos movimientos.

La importancia de la velocidad y de la dirección del viento sobre el proceso de dispersión de los contaminantes del aire destaca la necesidad de un registro sistemático de la información meteorológica que permita precisar los patrones espaciales y temporales de la circulación del viento sobre la ciudad de México. A partir de 1986, la SEDUE (hoy SEDESOL) inició la operación de una red de micrometeorología que registra continuamente, a nivel de superficie, la velocidad y dirección del viento y la temperatura.

Una de las características más notorias del patrón de circulación del aire en el área de estudio es que el viento no sopla en una sola dirección sino que cambia con el transcurso del día y, más aún, a la misma hora puede ser diferente en distintos puntos de la cuenca. La complejidad de estos movimientos es resultado de la conjugación de diversos factores que están relacionados con los cambios en el espacio y en el tiempo de la presión, la temperatura y la densidad del aire de la zona. Entre éstos se encuentran las condiciones de estabilidad atmosférica, la topografía del área, otros componentes naturales y urbanos causantes de inestabilidad, y algunos fenómenos meteorológicos de mayor escala [Quadri, Sánchez, (1994)].

Para efectuar un análisis que explique el comportamiento en las diferentes épocas del año, se requiere información más detallada y sobre un período de estudio mayor que defina el ciclo diario del campo de velocidades del viento en la ZMCM [Quadri, Sánchez, (1994)].

Para el día base que se ha elegido, el efecto de los vientos (transporte), es mínimo en comparación al efecto de la cinética química, ya que para este día son muy moderados, por lo que nuestro estudio se enfoca a las reacciones químicas, que en este caso tienen un papel preponderante.

Lo anterior no es extrapolable a cualquier día, ya que al variar las condiciones del viento el transporte de los contaminantes puede jugar un papel muy importante, razón por la cual el término de advección se toma en cuenta en nuestro modelo.

Probando el modelo de calidad del aire propuesto, para tres relaciones VOC's/NO_x, con intensidad de luz solar constante y variable, obtenemos los resultados que se describen y discuten en el capítulo 5.



**Universidad Nacional Autónoma
de México**

CAPITULO 4

DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA “SIMCONT”

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



CAPITULO 4

DESCRIPCION DEL PROGRAMA "SIMCONT"

Programa SIMCONT.cpp surgió por la necesidad de contar con una herramienta de computo que nos permita resolver el sistema de ecuaciones de difusión advección para un conjunto de N contaminantes químicos, en un dominio Ω tridimensional ($0 < x < L_x$, $0 < y < L_y$, $0 < z < L_z$), para conocer la contaminación por ozono, óxido nítrico y dióxido de nitrógeno, en una determinada hora y en cualquier región de la Zona Metropolitana de la Cd. de México (ZMCM).

En esta sección efectuaremos la descripción del programa SIMCONT. Comenzamos con las características generales que reúne nuestro programa para satisfacer los objetivos planteados, posteriormente se indica mediante un diagrama de flujo, el algoritmo que seguirá nuestro programa para el cálculo de dichos contaminantes. Este algoritmo contiene lo más esencial de las tareas a desarrollar por el programa.

Debido a que el programa es desarrollado en forma modular, se agrega una sección en donde se explica la forma en la que está estructurado SIMCONT, ahí se muestra la interrelación existente entre los diferentes subprogramas o módulos.

Para finalizar, se explica a detalle el funcionamiento del programa, se muestra el código Fuente del programa y se efectúa una descripción de lo que realizan cada uno de los subprogramas de acuerdo al orden de ejecución. Se indican las llamadas a funciones y a módulos para el procesamiento de los datos y entrega de resultados.

4.1 Características del programa

El programa está desarrollado en el lenguaje de programación C++. Cada uno de los módulos (archivos de programa o subprogramas), en los que se divide el programa SIMCONT, contienen una serie de instrucciones para efectuar una función específica.

Existen módulos que se usan para el acceso de datos, para el cálculo de sistema de ecuaciones, para resolver algún método numérico, etc. Todos estos módulos son controlados por un programa principal, el cual invoca a esos módulos o subprogramas, cuando sea necesario.

El Programa presenta las siguientes características.

Los datos son accedidos a través de archivos de datos estructurados matricialmente o vectorialmente.

Cuenta con módulos o subprogramas para resolver un sistema rígido de ecuaciones diferenciales ordinarias de reacciones químicas que contribuyen a la formación del ozono, del óxido nítrico y del dióxido de nitrógeno al realizar la simulación de acuerdo al esquema generalizado de formación del smog fotoquímico propuesto por Seinfeld, (1986).

Incluye módulos o subprogramas para resolver un sistema de ecuaciones diferenciales parciales para la simulación de los contaminantes; al observar el proceso de ADVECCIÓN y DIFUSIÓN, en un modelo Euleriano que tomara en cuenta la relación de flujos en tres dimensiones además de los cambios en temperaturas y vientos.

El programa entrega resultados en formato "*.txt" que nos permiten ser graficados fácilmente en el paquete "SURFER" sólo se tiene que indicar el valor de la relación de VOC's/NOx, el lugar y el período de tiempo en el que deseamos conocer la contaminación.

4.2 Algoritmos del programa.

En esta sección se muestra un diagrama de flujo, en donde se muestran los pasos esenciales que el algoritmo del programa SIMCONT seguirá para efectuar los cálculos de contaminación (Ver Figura 4 1)

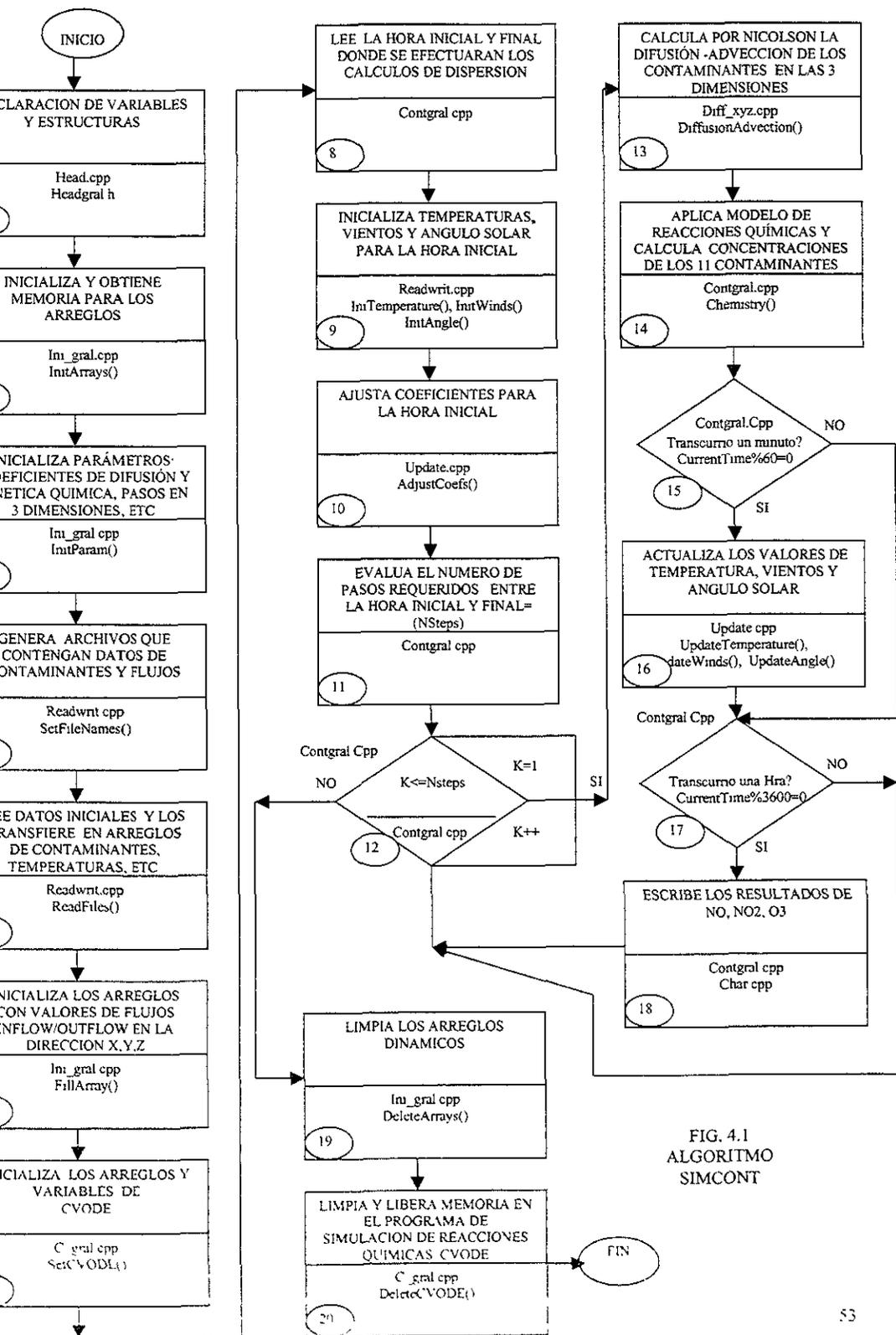
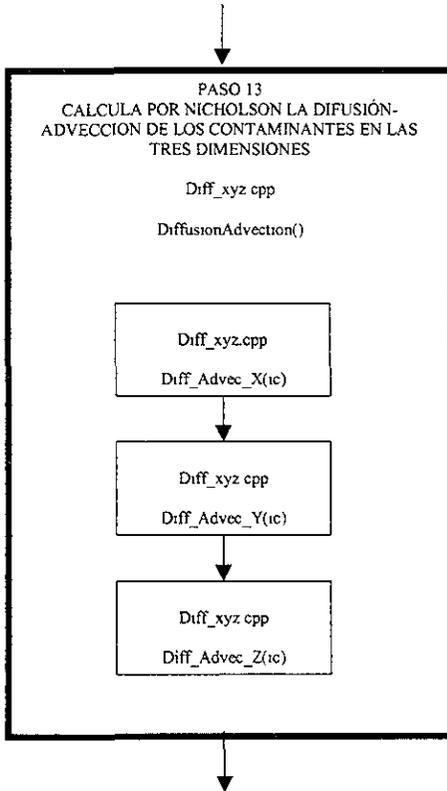


FIG. 4.1
ALGORITMO
SIMCONT

En el paso 13 del algoritmo se aplica el método numérico de Nicholson para resolver numéricamente el sistema de las ecuaciones de difusión-advección, para un conjunto de 11 contaminantes químicos, en un dominio tridimensional.

En este paso se aplica el método por particiones para el cálculo de la ecuación de difusión-advección, de tal manera que se obtienen tres ecuaciones, una para la dimensión "X", otra para la dimensión "Y" y otra para la dimensión "Z".

Figura 4.2 Estructura del paso 13 del algoritmo principal

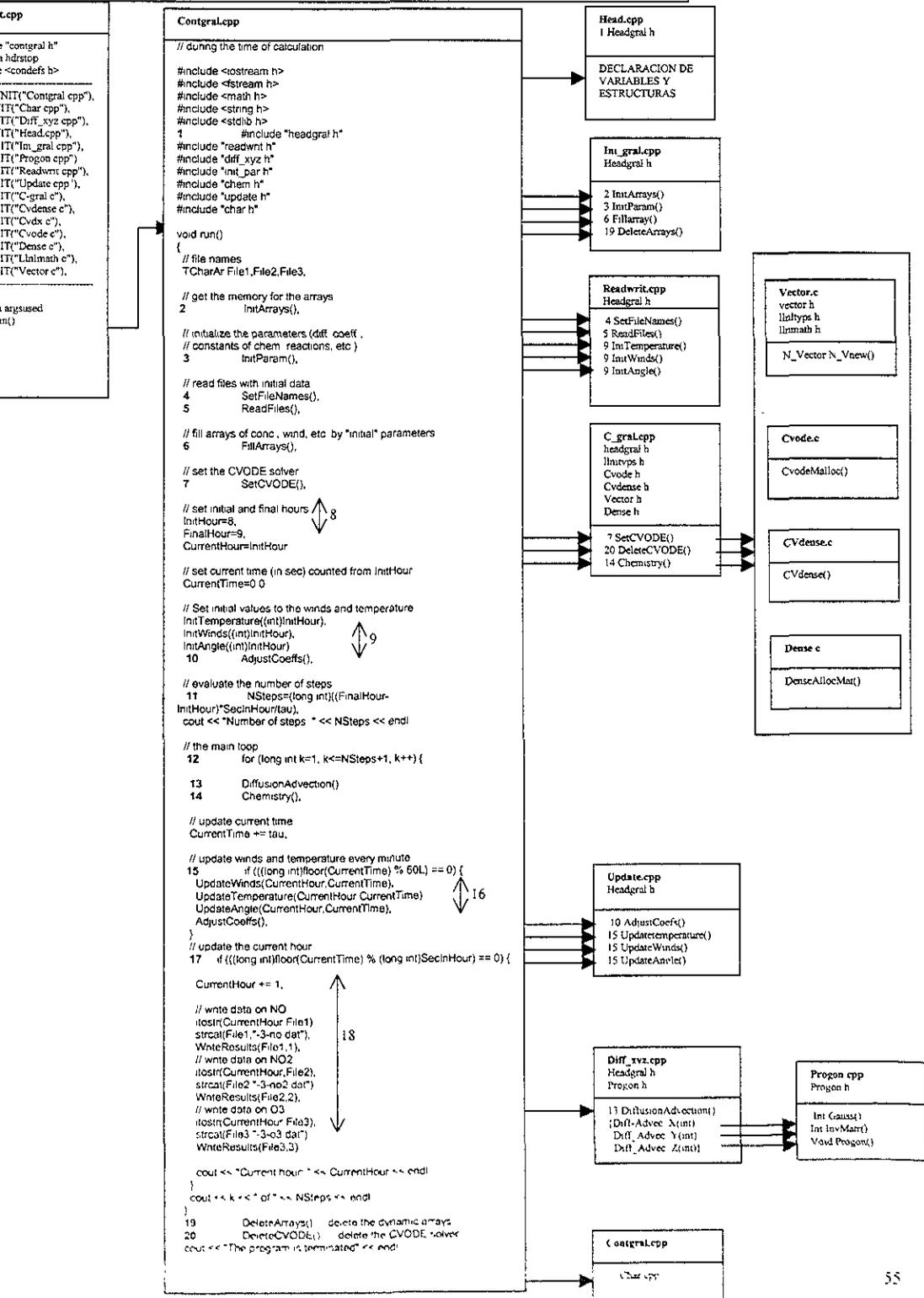


Más adelante en el subcapítulo 4.4, se muestra el código fuente de cada uno de estos bloques y se da una explicación de lo que efectúa cada uno de ellos.

4.3 Estructura del programa

En esta sección se presenta gráficamente la estructura y la interrelación existente entre los diversos programas que conforman al modelo computacional "SIMCONT" (Ver Figura 4.3).

Fig 4.3 ESTRUCTURA DEL PROGRAMA "SIMCONT"



4.4 Descripción del programa.

En esta sección se explica lo que hace cada uno de los módulos o subprogramas que forman al programa MCONT y se muestra el código fuente para cada uno de estos módulos.

Para cada uno de estos subprogramas, se irán explicando conforme a la secuencia de ejecución del algoritmo de la Figura 4.1

Módulo Simcont.cpp

Este programa cuenta con un módulo principal "Simcont.cpp", es principal por ser el que contiene la función `main()`.

Este programa hace uso de la función `run()`, la cual esta definida en el programa "Contgral.cpp".

El código de "Simcont.cpp" nos indica que usará varios módulos o subprogramas durante la ejecución de la función `run()`, los cuales complementan el programa para la entrada, procesamiento y salida de los datos. Los enunciados USEUNIT han sido creados por el compilador Borland C++.

Código de Simcont.cpp

```
#include "contgral.h"
#pragma hdrstop
#include <condefs.h>
```

```
USEUNIT("Contgral.cpp"),
USEUNIT("Char.cpp"),
USEUNIT("Diff_xyz.cpp"),
USEUNIT("Head.cpp"),
USEUNIT("In_gral.cpp"),
USEUNIT("Progon.cpp"),
USEUNIT("Readwnt.cpp"),
USEUNIT("Update.cpp"),
USEUNIT("C-gral.c"),
USEUNIT("Cvdense.c"),
USEUNIT("Cvdx.c"),
USEUNIT("Cvode.c"),
USEUNIT("Dense.c"),
USEUNIT("Linmath.c"),
USEUNIT("Vector.c"),
```

```
#pragma argsused
int main()
```

```
{
    run();
}
```

Módulo Contgral.cpp

El módulo Contgral.cpp incluye archivos de cabecera propios para el uso de funciones de C++ y además también define las interfaces " * h" para hacer uso de las funciones que se encuentran en otros módulos y que se irán llamando conforme a la función `run()` se ejecute

Enseguida se presenta el código fuente del subprograma Contgral.cpp y se presenta enumerado cada una de sus líneas con el objetivo de hacer referencia a este código de programa ya que como se mencionó anteriormente, es en este programa en donde se lleva el control de las llamadas a otros subprogramas

codigo de Contgral.cpp

Este programa maneja la secuencia de los cálculos que se tienen que efectuar

Para el cálculo de contaminantes

```
#include <iostream h>
#include <fstream h>
#include <math h>
#include <string h>
#include <stdio h>
#include "headgral h"
#include "readwnt h"
#include "diff_xyz h"
#include "init_par h"
#include "chem h"
#include "update h"
#include "char h"
```

```
void run()
```

```
// Nombre de los archivos
```

```
TCharAr File1,File2,File3,
```

```
// obtiene memoria para los arreglos
```

```
InitArrays(),
```

```
// Inicializa parámetros Constantes de reacciones quimicas etc
```

```
InitParam(),
```

```
// renombra y Lee los archivos con datos iniciales
```

```
SetFileNames(),
```

```
ReadFiles()
```

```
// inicializa los arreglos con valores de flujos inflow/outflow en X Y Z
```

```
FillArrays(),
```

```
// limpia los ultimos resultados de CVODE
```

```
SetCVODE()
```

```
// Da la hora inicial y final deseada en nuestro cálculo
```

```
InitHour=8,
```

```
FinalHour=9
```

```
CurrentHour=InitHour
```

```
// inicializar en zeros el tiempo transcurrido (en seg) contados a partir
```

```
//de InitHour
```

```
CurrentTime=0.0,
```

```
// inicializa arreglos con valores de temperatura velocidad de vientos
```

```
// ángulo solar, etc para la hora inicial (InitHour)
```

```
InitTemperature((int)InitHour) ,
```

```
InitWinds((int)InitHour),
```

```
InitAngle((int)InitHour);
```

```
AdjustCoeffs(),
```

```
//Evalua el numero de pasos en el tiempo
```

```
NSteps=(long int)((FinalHour-InitHour)*SecInHour/tau),
```

```
cout << "NUMERO DE PASOS." << NSteps << endl,
```

```
// lazo principal de pasos en el tiempo
```

```
for (long int k=1 k<=NSteps+1, k++){
```

```
DiffusionAdvection(),
```

```
Chemistry()
```

```
// actualiza el tiempo transcurrido
```

```
CurrentTime += tau,
```

```
//actualiza temperaturas vientos ángulo solar etc cada minuto
```

```
if (((long int)floor(CurrentTime) % 60L) == 0) {
```

```
UpdateWinds(CurrentHour,CurrentTime),
```

```
UpdateTemperature(CurrentHour,CurrentTime)
```

```
UpdateAngle(CurrentHour,CurrentTime),
```

```
AdjustCoeffs()
```

```
}
```

```
//actualiza el tiempo transcurrido en horas.
```

```

if (((long int)floor(CurrentTime) % (long int)SecInHour) == 0) {
CurrentHour += 1,

// escribe datos de NO
itostr(CurrentHour,File1),
strcat(File1,"-3-no.dat"),
WriteResults(File1,1),

// escribe datos de NO2
itostr(CurrentHour,File2),
strcat(File2,"-3-no2.dat"),
WriteResults(File2,2),

// escribe datos de O3
itostr(CurrentHour,File3),
strcat(File3,"-3-o3.dat"),
WriteResults(File3,3),

cout << "HORAS TRANCURRIDAS " << CurrentHour << endl
}

cout << k << " of " << NSteps << endl,
}

DeleteArrays(), // BORRA LA INFORMACION DE LOS ARREGLOS
DeleteCVODE() // BORRA LA SOLUCION DE CVODE
cout << "FIN DEL PROGRAMA" << endl,
}

```

ando un programa se ejecuta, primero se ejecutan las directivas de cabecera, en este caso el programa `ntgral.cpp` comienza con las directivas del procesador `#INCLUDE`, las cuales establecen la interfaz con diversas librerías con las que cuenta C++, sin embargo, la explicación del programa se basa en los puntos importantes que son necesarios para entender el programa `SIMCONT.cpp`, y que son consideradas en el diagrama de flujo del algoritmo del programa. Por lo tanto, comenzamos en el *renglon 6* del programa `ntgral.cpp`

```
#include "headgral.h"
```

En esto, lo que se está logrando es declarar y definir constantes, variables y estructuras u arreglos que serán usados dentro del programa `SIMCONT.cpp`. Además tenemos, por ejemplo, la definición de `NumChem=11` que es el número de sustancias químicas que se están considerando. N_x , N_y , N_z , los números de nodos en la dimensión X, Y, Z en la que es dividido nuestro dominio del problema, o sea la malla de puntos en la que se dividió la ZMCM. Tenemos también la declaración y dimensionamiento de los arreglos usados, etc.

Contenido de `headgral.h`

Programa donde se definen las variables y estructuras usadas en el programa `SIMCONT`

```

#ifndef _HEADGRAL_
#define _HEADGRAL_

// Constantes
const int NumChem=11 // numero de sustancias quimicas */
const int NumChem 11

// Dimensiones
const int Nx=14 // Numero de nodos a lo largo de la dimension X (1  Nx)*/
const int Ny=16 // Numero de nodos a lo largo de la dimension Y(1  Ny)*/
const int Nz=5 // Numero de nodos a lo largo de la dimension Z (1  Nz)*/

// Arreglos
int Nx 14

```

```

fine Ny 16
fine Nz 5

const int MaxHour=23, //Maximo numero de horas en un cálculo */
fine MaxHour 23
const int SecInHour = 3600; // Número de segundos en una hora*/
//Declaración y dimensionamiento de arreglos
#define huge double Array4D [NumChem+1] [Nx+1] [Ny+1] [Nz+1].
#define huge double Array3D [Nx+1] [Ny+1] [Nz+1].

#define huge double C_inXArray [NumChem+1][2][Ny+1][Nz+1].
#define huge double C_inYArray [NumChem+1][2][Nx+1][Nz+1].
#define huge double C_inZArray [NumChem+1][2][Nx+1][Ny+1].

#define huge double WindsArray [MaxHour+1][Nx+1][Ny+1].
#define huge double TempArray [MaxHour+2][Nx+1][Ny+1].
#define huge double AngleArray [MaxHour+2].

#define char FileNamesArray [NumChem+1][31].

#define huge double FluxArray [NumChem+1][Nx+1][Ny+1].

//Arreglo de datos
//rm Array4D *C, //Concentraciones de contaminantes */
//rm Array3D *WindX, *WindY, *WindZ, *Temp, //vientos y temperaturas*/
//rm WindsArray *WindTimeX, *WindTimeY,
//rm TempArray *TempTime.

//rm AngleArray *Angles, // arreglo del ángulo solar */
//rm double AngleTime, // valor comente del ángulo solar */

//rm long int NSteps,
//rm int NChemSteps, // Número de pasos para la integración del sistema
//reacciones químicas */
//rm double Kxx, Kyy, Kzz; //coef de difusión turbulenta Kx, Ky, Kz */
//rm double hx,hy,hz, //Pasos en metros en la dimension X,Y,Z*/
//rm double tau, //Paso en el tiempo (en seg) en el problema de
//reaccion/difusion*/
//rm double tauChem, //Paso en el tiempo (seg) en el sist de reacc químicas */
//rm double CurrentTime //tiempo transcurrido desde el momento inicial seg*/
//rm int CurrentHour, // Horas transcurridas*/
//rm int InItHour, // Hora inicial (Por ejemplo, 8 - seran las 8 00 am)*/
//rm int FinalHour, // Hora final (por ejemplo, 15 - seran las 15 00 or
//pm no debe ser mayor a 23 !!) */
//rm double k1,k2,k3,k4 k5,k6,k7 k8 k9,k10,k11,k12, // Coef Cineticos */
//rm double c_M, c_O2, //Concentraciones de un cuerpo (ver ec químicas) */
//rm const double T_K, // temperatura en Kelvin */

//rm C_inXArray *C_inX, //Flujo de entrada de una concentración (inflow)
//cada indice corresponde a la concentración, el siguiente indice define el
//derecho o izquierdo de el intervalo, 0- para el lado izquierdo, 1- para el
//derecho */
//rm C_inYArray *C_inY,
//rm C_inZArray *C_inZ,

//rm FluxArray *Qflux; // Flujos desde la superficie de la tierra */
//rm FileNamesArray FileNames; //Arreglo de Concentraciones*/
//rm FileNamesArray FluxNames, //arreglos de flujos*/

```

diff

codigo de Head.cpp

subprograma para declaración de Variables y definición de Constantes,
mas de la declaración de arreglos*/

```

#include "headqr1.h"

//rm int NSteps, //Numero de pasos en el tiempo en el problema adv.diff

//NChemSteps = 50 //Numero de pasos para integrar el sistema de reacciones
//químicas durante un paso de tiempo del problema de adv.diff
//const double T_K = 273.15 //parámetro para convertir a grados Kelvin

//rm double Kxx, Kyy, Kzz; //Coeficientes de difusión turbulenta
//rm double hx, hy, hz; //Pasos en metros en la dimension X, Y, Z

```

```

double tau, //Paso en el tiempo (seg) en el problema adv./diff
double tauChem; //Paso en el tiempo (seg) en el problema de reacc. químicas
double CurrentTime, //Tiempo transcurrido desde el momento inicial (seg)
CurrentHour, // Horas transcurridas
InitHour; // Hora inicial (por ejemplo, las 8 serán las 8:00 am)
FinalHour; //Hora final(por ejemplo, las 15 serán las 15:00, or 3:00 pm,
//pero no debe ser mayor a 23 !!! )

double k1,k2,k3,k4,k5,k6,k7,k8,k9,k10,k11,k12, /* Coef Cineticos*/
double c_M c_O2, //Concentraciones en un cuerpo (ver ec reacc químicas)

Array4D *C //concentraciones
Array3D *WindX, *WindY, *WindZ, *Temper, //arreglos de velocidad de vientos y
//temperaturas usadas en el problema de adv/diff
int nXArray *C_inX, /*Flujo de entrada de una concentración (inflow)
//cualquier índice corresponde a la concentración, el siguiente índice define el
//lado derecho o izquierdo de el intervalo, 0- para el lado izquierdo, 1- para el
//lado derecho */
int nYArray *C_inY,
int nZArray *C_inZ,

int nFluxArray *Qflux, // Flujos desde la superficie terrestre

double AngleTime, // Valor comente del ángulo solar

int nWindsArray *WindTimeX, *WindTimeY, // Arreglo de vientos medidos cada hora
int nTempArray *TempTime, // Arreglo de temperatura medidos cada hora
int nAnglesArray *Angles, //arreglo de ángulos solares medidos cada hora

int nFileNamesArray FileNames; // nombre de archivos con datos de
//concentraciones iniciales
int nFluxNamesArray FluxNames // Nombre de archivos con datos de Flujos
    
```

Los renglones 7,8,9,10,11 y 12 de el programa Contgral.cpp, son directivas para interactuar con diversos subprogramas. Por ejemplo, la primera función llamada desde `run()`, es la que se indica en el renglón 20 de `contgral.cpp`.

```
InitArrays();
```

Este renglón efectúa el paso No 2 del algoritmo, inicializa y obtiene memoria para los arreglos. Esta función se define en el subprograma `Ini_gral.cpp` y es interfazada con el programa `Contgral.cpp`, por medio de la directiva localizada en el renglón 9 (`#include "init_par.h"`).

Código de la función `InitArrays()`.

```

int InitArrays()
{
    if (C = (Array4D *) new Array4D) == NULL) {
        cout << "No hay suficiente memoria para C" << endl;
        exit(1);
    }

    if (WindX = (Array3D *) new Array3D) == NULL) {
        cout << "No hay suficiente memoria para WindX" << endl;
        exit(1);
    }

    if (WindY = (Array3D *) new Array3D) == NULL) {
        cout << "No hay suficiente memoria para WindY" << endl;
        exit(1);
    }

    if (WindZ = (Array3D *) new Array3D) == NULL) {
        cout << "No hay suficiente memoria para WindZ" << endl;
        exit(1);
    }

    if (Temper = (Array3D *) new Array3D) == NULL) {
        cout << "No hay suficiente memoria para Temper" << endl;
        exit(1);
    }
}
    
```

```

(C_inX = (C_inXArray *) new C_inXArray) == NULL) {
out << "No hay suficiente memoria para C_inX" << endl;
exit(1);
}

(C_inY = (C_inYArray *) new C_inYArray) == NULL) {
out << "No hay suficiente memoria para C_inY" << endl;
exit(1);
}

(C_inZ = (C_inZArray *) new C_inZArray) == NULL) {
out << "No hay suficiente memoria para C_inZ" << endl;
exit(1);
}

(Qflux = (FluxArray *) new FluxArray) == NULL) {
out << "No hay suficiente memoria para Qflux" << endl;
exit(1);
}

(WindTimeX = (WindsArray *) new WindsArray) == NULL) {
out << "No hay suficiente memoria para WindTimeX" << endl;
exit(1);
}

(WindTimeY = (WindsArray *) new WindsArray) == NULL) {
out << "No hay suficiente memoria para WindTimeY" << endl;
exit(1);
}

(TempTime = (TempArray *) new TempArray) == NULL) {
out << "No hay suficiente memoria para TempTime" << endl;
exit(1);
}

(Angles = (AngleArray *) new AngleArray) == NULL) {
out << "No hay suficiente memoria para Angles" << endl;
exit(1);
}

```

siguiente paso en el algoritmo (paso No 3), es "Inicializar parámetros", esto se logra mediante la función solicitada en el renglón 23 del programa Contgral.cpp.

```
InitParam();
```

Esta función se desarrolla en el subprograma Ini_gral.cpp el cual se enlaza con el programa Contgral.cpp, cuando se ejecuta el renglón 9. (#include "init_par.h").

La función InitParam() se usa para, para inicializar con valores a diversos parámetros que serán usados durante la ejecución del programa. Es el caso del parámetro "tau" el cual es el paso en el tiempo en segundos para las ecuaciones de difusión-advención. "tauChem" se define como el paso en el tiempo en segundos usada en el esquema de reacciones químicas. También se inicializan los valores de coeficientes de química cinética y de difusión turbulenta de N diferentes contaminantes.

Código de la función InitParam().

```

int InitParam()
{
Pasos en el tiempo
tau=10.0 //seg
tauChem=tau.NChemSteps //seg

Pasos en la dirección X Y Z
dx=5000 //m
}

```

```

ny=5000, // Mts
nz=1000 // Mts
//Coef de difusión turbulenta
Kxx=300 0, // m^2/seg
Kyy=300 0, // m^2/seg
Kzz=1 0, // m^2/seg

//coeficientes de química crística
k1=0.533/60, // depende del ángulo solar
k2=2.183e-5/60,
k3=26.58/60,
k4=3.775e3/60,
k5=2.341e4/60
k6=1.91e-4/60, // depende del ángulo solar
k7=1.214e4/60,
k8=1.127e4/60,
k9=1.127e4/60,
k10=1.613e4/60,
k11=6.893e3/60
k12=2.143e-2/60,

//Concentraciones de un cuerpo (ver ec. químicas)
C_M=79.0e4,
C_O2=21.0e4,

```

El siguiente paso en el algoritmo es el paso 4 "Genera archivos que contienen datos de contaminantes y flujos", Esto se logra mediante la función solicitada en el renglón 26 del programa Contgral.cpp.

```

3 SetFileNames()

```

Esta función se desarrolla en el subprograma ReadWrit.cpp el cual se interfaza con el programa Contgral.cpp, cuando se ejecuta el renglón 7. (`#include "readwrit.h"`).

Esta función `SetFileNames()`, la usa el programa Contgral.cpp, para copiar los archivos de datos (*.dat) correspondientes a los 11 contaminantes y a los flujos de contaminantes orgánicos (VOCs), NO y NO2 que originalmente están en formato de texto.

Código de la función SetFileNames().

```

void SetFileNames()
//
//setea el nombre de los archivos que contienen datos iniciales:
//el numero de archivos deben ser exactamente al numero de contaminantes
strcpy(FileNames[1],"no.dat"), // NO
strcpy(FileNames[2],"no2.dat"), // NO2
strcpy(FileNames[3],"o3.dat"), // O3
strcpy(FileNames[4],"o.dat"), // O
strcpy(FileNames[5],"rh3.dat"), // RH existen 3 versiones rh1.dat, // rh2.dat rh3.dat
strcpy(FileNames[6],"oh.dat"), // OH
strcpy(FileNames[7],"ro2.dat"), // RO2
strcpy(FileNames[8],"rho3.dat"), // RCHO, existen 3 versiones rho1.dat, // rho2.dat, rho3.dat
strcpy(FileNames[9],"rho2.dat"), // RC(O)O2
strcpy(FileNames[10],"ho2.dat"), // HO2
strcpy(FileNames[11],"rho2no2.dat"), // RC(O)O2NO2

strcpy(FluxNames[1],"fluxno.dat"), // flujo de NO
strcpy(FluxNames[2],"fluxno2.dat"), // flujo de NO2
strcpy(FluxNames[3],"fluxvocs.dat"), // flujo de Vocs

```

El siguiente paso en el algoritmo es el paso 5 " Lee archivos de datos iniciales en contaminantes, temperaturas, velocidades de vientos, ángulo solar, flujos etc ", Esto se logra mediante la función solicitada en el renglón 27 del programa Contgral.cpp.

ReadFiles(),

Esta función ReadFiles() la usa el programa Contgral.cpp, para leer los archivos con datos iniciales en concentraciones de contaminantes, temperaturas, ángulos solares, velocidades de vientos y flujos de contaminantes. Estos archivos son leídos uno por uno y son transferidos a los arreglos que serán usados en los métodos numéricos propuestos para el cálculo de contaminantes. Así tenemos, por ejemplo, el archivo de datos de concentraciones iniciales de contaminantes FileNames[icon] (icon es el número de la concentración), es transferido al arreglo (*C)[icon][ix][iy][iz].

Los datos que se leen del archivo FileNames[icon] están dados en forma matricial con ix=1-14, iy=1-16, estos datos son en forma bidimensional para cada uno de los 11 contaminantes (icon=1,...,11). Estos datos son transferidos a un arreglo tridimensional (*C)[icon][ix][iy][iz], el cuarto subíndice "icon" sólo nos indica el número de contaminante. Primero se llena la primera capa de (*C)[icon][ix][iy][1], con los valores de FileNames[icon], y después esta capa (en iz=1) es copiada a las demás capas de (*C)[icon][ix][iy][iz=2,...,5], todo esto se realiza para cada una de las concentraciones (icon=1,...,11)

El archivo de temperaturas temp1.dat, es un conjunto de datos ordenados matricialmente en forma bidimensional ix=1-14, iy=1-16, y se proporcionan 24 matrices de datos, una por cada hora. Estos datos son transferidos a un arreglo de tres dimensiones (*TempTime)[iTemp][ix][iy], en donde el subíndice iTemp es la hora (1,...,24) en la que se tomo esta temperatura.

Observemos que se usa el parámetro T_K para convertir a grados Kelvin.

TempTime[iTemp][ix][iy]=Temper+T_K

Cuando se leen las velocidades del viento del archivo wind.dat, se lee una matriz de datos para el vector X del viento (WindTimeX) y una matriz para el vector Y del viento (WindTimeY), además se lee la hora en la que se tomó esta lectura (iWind). Los datos del archivo wind dat son transferidos a dos arreglos de tres dimensiones (*WindTimeX) [iWind][ix][iy] y (*WindTimeY) [iWind][ix][iy], en donde el subíndice iWind es el tiempo cuando se tomó la lectura (iWind=0,...,23).

En esta función ReadFiles() también se leen los datos correspondientes a los flujos de NO, NO2 y VOCs, para esto se abren los archivos FluxNames[1], FluxNames[2], FluxNames[3], y transfieren sus datos a los arreglos (*Qflux)[1][ix][iy], (*Qflux)[2][ix][iy], (*Qflux)[5][ix][iy], (*Qflux)[8][ix][iy], en donde el tercer subíndice 1,2,5,8 corresponden al número de contaminante, ver la función SetFileNames().

Cada uno de los datos leídos de los archivos FluxNames[], son multiplicados por un factor para convertirlos de "microgramos/m**2/seg" a "ppm*m/seg".

Para la lectura del ángulo solar, se abre un archivo "angle.dat" el cual contiene un ángulo solar cada hora, durante las 24 horas. Estos datos son transferidos a un arreglo (*angles)[Angle].

Código de la función ReadFiles().

void ReadFiles()

ifstream Fin
int ix,iy,iz,iConc,iTemp,iWind,iAngle,hour
double Temper

... --- LEE CONCENTRACIONES INICIALES -----

/* Abre archivos uno por uno y lee datos de concentraciones iniciales para

```

//el llenado de arreglos
for (iConc=1, iConc<=NumChem, iConc++) {
  Fin open(FileNames[iConc]).
  if (!Fin) {
    cout << "Inhabilitado para abrir " << FileNames[iConc] << endl,
    exit(1);
  }

  // lee datos para el mas bajo nivel de la direccion Z(iz=1)
  for (iy=Ny; iy>=1; iy--)
    for (ix=1; ix<=Nx, ix++)
      Fin >> (*C)[iConc][ix][iy][1],

  // llena los otros niveles iz=2.. Nz
  for (iy=1, iy<=Ny, iy++)
    for (ix=1, ix<=Nx, ix++)
      for (iz=2; iz<=Nz, iz++)
        (*C)[iConc][ix][iy][iz]=(*C)[iConc][ix][iy][1],

  Fin close(),
}

```

----- LEE TEMPERATURAS -----

```

// lee archivos de temperaturas
Fin open("temp1.dat"),
if (!Fin) {
  cout << "Inhabilitado para abrir " << "temp1.dat" << endl,
  exit(1),
}

for (iTemp=1, iTemp<=MaxHour+1; iTemp++)
  for (iy=Ny; iy>=1; iy--)
    for (ix=1, ix<=Nx; ix++) {
      // lee datos de temperatura
      Fin >> Temper
      // recalcula a grados kelvin
      (*TempTime)[iTemp][ix][iy]=Temper+T_K,
    }

Fin close(),

```

----- LEE VELOCIDADES DE VIENTOS -----

```

// lee archivo de vientos
Fin open("wind.dat"),
if (!Fin) {
  cout << "Inhabilitado para abrir " << "wind.dat" << endl,
  exit(1),
}

for (iWind=0, iWind<=MaxHour; iWind++) {
  // lee la hora
  Fin >> iour,

  // lee la coordenada X del viento
  for (iy=Ny; iy>=1; iy--)
    for (ix=1, ix<=Nx, ix++)
      Fin >> (*WindTimeX)[iWind][ix][iy],

  // Lee la coordenada Y del viento
  for (iy=Ny; iy>=1; iy--)
    for (ix=1, ix<=Nx, ix++)
      Fin >> (*WindTimeY)[iWind][ix][iy],

Fin close(),
}

```

----- LEE FLUJOS -----

```

double flux, factorNO, factorNO2, factorRH, factorRCHO,

// Factor para recalcular los flujos de "microgrmms/m^2/sec"
// (tal como son dados en los archivos)
// a "ppm/m^3/sec" necesitamos en el programa para flujos de NO, NO2, RH and RCHO
factorNO=30.0e3/31.2
factorNO2=46.0e3/31.2
factorRH=1.0/3.94e-4,

```

factorRCHO=1 0/5 37e-4;

/* primero se setean a cero todos los flujos de las sustancias

```
for (iConc=1, iConc<=NumChem, iConc++) {
    for (iy=Ny, iy>=1, iy--)
        for (ix=1, ix<=Nx, ix++)
            (*Qflux)[iConc][ix][iy]=0.0;
}
```

/* Ahora, setearmos los flujos de las sustancias

/* Lee los flujos de NO

```
Fin open(FluxNames[1]),
f (!Fin) {
    cout << "Inhabilitado para abrir " << FluxNames[1] << endl;
    exit(1);
}
```

```
for (iy=Ny, iy>=1, iy--)
    for (ix=1, ix<=Nx, ix++) {
        Fin >> flux;
        (*Qflux)[1][ix][iy]=flux*factorNO;
    }
}
```

Fin close(),

/* Lee los flujos de NO2

```
Fin open(FluxNames[2]),
f (!Fin) {
    cout << "Inhabilitado para abrir " << FluxNames[2] << endl;
    exit(1);
}
```

```
for (iy=Ny, iy>=1, iy--)
    for (ix=1, ix<=Nx, ix++) {
        Fin >> flux;
        (*Qflux)[2][ix][iy]=flux*factorNO2;
    }
}
```

Fin close(),

/* Lee los flujos de RH y RCHO

```
Fin open(FluxNames[3]),
f (!Fin) {
    cout << "Inhabilitado para abrir " << FluxNames[3] << endl;
    exit(1);
}
```

```
for (iy=Ny, iy>=1, iy--)
    for (ix=1, ix<=Nx, ix++) {
        Fin >> flux;
        (*Qflux)[5][ix][iy]=0.5*flux*factorRH;
        (*Qflux)[8][ix][iy]=0.5*flux*factorRCHO;
    }
}
```

Fin close(),

----- LEE ANGULOS SOLARES -----

```
Fin open("angle.dat");
f (!Fin) {
    cout << "Inhabilitado para abrir " << "ANGLE.dat" << endl;
    exit(1);
}
```

```
for (Angle=0, iAngle<=MaxHour, iAngle++)
    Fin >> hour >> (*Angles)[iAngle];
}
```

Fin close(),

El siguiente paso en el algoritmo es el paso 6 "Inicializa los arreglos con valores de flujos de entrada y salida en la celda en estudio (Inflow/outflow) en la dirección X, Y, Z" (Figura 4.4). Esto se logra mediante la función solicitada en el renglón 30 del programa Contgral.cpp:

FillArrays(),

esta función se desarrolla en el archivo Ini_gral.cpp. Prepara los arreglos del flujo entrante (inflow) y flujo saliente (outflow) en las direcciones X, Y, Z, con los valores iniciales de las concentraciones en las fronteras.

por ejemplo en el caso de la dirección X:

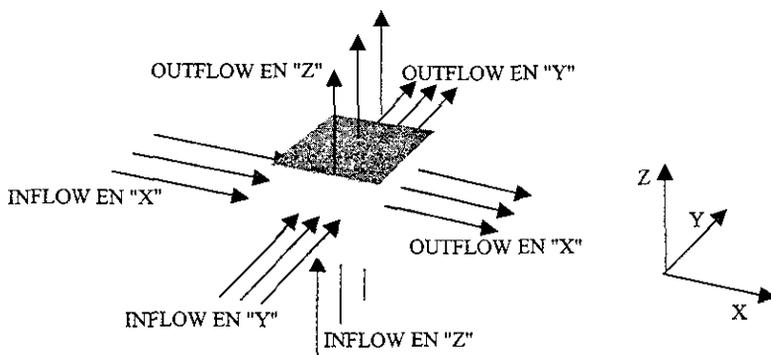


Figura 4.4 Flujo entrante (inflow) y flujo saliente (outflow) en una celda del dominio

al arreglo de inflow en la dirección X, $(*C_inX)[iconc][0][iy][iz]$, se le asignan los valores de las concentraciones de los contaminantes de la capa de la frontera en $X=1$.

al arreglo de Outflow en la dirección X, $(*C_inX)[iconc][1][iy][iz]$, se le asignan los valores de las concentraciones de los contaminantes de la capa de la frontera en $X=Nx$.

```
C_inX[iConc][0][iy][iz]=(*C)[iConc][1][iy][iz], //Inflow//
C_inX[iConc][1][iy][iz]=(*C)[iConc][Nx][iy][iz], //Outflow//
```

de igual manera para la dirección en Y, el flujo entrante (INFLOW), se le asignan al arreglo $*C_inY)[iconc][0][ix][iz]$ los valores de la capa en la frontera con $Y=1$. Y al flujo saliente (OUTFLOW), se le asignan al arreglo $(*C_inY)[iconc][Ny][ix][iz]$, los valores de la capa en la frontera con $Y=Ny$.

```
C_inY[iConc][0][ix][iz]=(*C)[iConc][ix][1][iz], //Inflow//
C_inY[iConc][1][ix][iz]=(*C)[iConc][ix][Ny][iz], //Outflow//
```

para la dirección Z, el flujo desde la superficie terrestre es flujo entrante a nuestro dominio del problema (INFLOW) y en este caso consideramos que no existen corrientes de aire, por lo tanto $*C_inZ)[iconc][0][iy][iz]$ no es usado. Para el flujo saliente en Z (OUTFLOW) se le asigna al arreglo $*C_inZ)[iconc][1][iy][iz]$, el valor de las concentraciones de la capa superior de nuestro dominio en $Z=1$.

```
C_inZ[iConc][1][iy][iz]=(*C)[iConc][ix][iy][1], //Outflow//
```

Código de la Función FillArray().

```

3 FillArray()
{
  int ix,iy,iz,iConc;

  //colocar concentraciones de vientos y temperaturas
  for (ix=1, ix <= Nx; ix++)
    for (iy=1, iy <= Ny, iy++)
      for (iz=1, iz <= Nz, iz++) {
        //Distribucion inicial de vientos en la direccion Z
        (*WindZ)[ix][iy][iz]=0.0;//consideramos no hay viento en la direcc Z
      }

  //setear los arreglos inflow/outflow en la direccion X
  //igual a los valores iniciales de concentraciones
  //por ejm los valores en el t=0)
  for (iy=1, iy <= Ny, iy++)
    for (iz=1, iz <= Nz, iz++)
      for (iConc=1, iConc<=NumChem, iConc++) {
        (*C_inX)[iConc][0][iy][iz]=(*C)[iConc][1][iy][iz];
        (*C_inX)[iConc][1][iy][iz]=(*C)[iConc][Nx][iy][iz];
      }

  //setear los arreglos inflow/outflow, en la direccion Y
  for (ix=1, ix <= Nx, ix++)
    for (iz=1, iz <= Nz, iz++)
      for (iConc=1, iConc<=NumChem, iConc++) {
        (*C_inY)[iConc][0][ix][iz]=(*C)[iConc][ix][1][iz];
        (*C_inY)[iConc][1][ix][iz]=(*C)[iConc][ix][Ny][iz];
      }

  //setear los arreglos inflow/outflow en la direccion Z
  for (ix=1, ix <= Nx, ix++)
    for (iy=1, iy <= Ny, iy++)
      for (iConc=1, iConc<=NumChem, iConc++) {
        // Flujos desde la superficie en la frontera en Z
        (*C_inZ)[iConc][1][ix][iy]=(*C)[iConc][ix][iy][1]
        // Nota C_inZ[iConc][0][ix][iy] no es usada
        // flujo desde la superficie terrestre
        (*Qflux)[iConc][ix][iy]=0.0;
      }
  cout << "OK con la asignacion de arreglos" << endl;
}

```

paso número 7 en el diagrama de flujo del algoritmo, corresponde a la inicialización de las variables y arreglos del programa CVODE. Esto se logra mediante el llamado de la función SetCVODE(), que se encuentra en el programa C-gral.cpp y que es invocada desde la línea 33 del programa Contgral.cpp.

Código de la Función SetCVODE

```

1 SetCVODE()
{
  int k;
  int n = N_VNewI(NumChem, NULL); // Allocate y, abstol vectors */
  abstol = N_VNew(NumChem, NULL);

  atol=RTOL;

  //set absolute vector tolerances */
  for (k=1, k<=NumChem, k++)
    ith(abstol k)=ATOL;
}

```

En el código anterior se usan funciones que se encuentran definidas dentro del paquete CVODE.

El siguiente paso del algoritmo es el No 8. Este paso se ejecuta en el programa Contgral.cpp en las líneas 6 y 37, y su función es leer la hora inicial y final en donde se quiere efectuar el análisis de la evolución y transformación de los contaminantes.

```
5 // Da la hora inicial y final deseada en nuestro cálculo
6 InitHour=8,
7 FinalHour=9,
8 CurrentHour=InitHour;
```

En el paso No 9 del algoritmo, se inicializan los arreglos con valores iniciales de temperaturas, vientos y ángulo solar para el tiempo inicial proporcionado en el paso anterior del algoritmo (paso No 8).

Para lograr lo anterior, el programa Contgral.cpp hace uso de las funciones InitTemperature(), InitWinds() y InitAngle() localizadas en las líneas 46, 47 y 48, del programa Contgral.cpp y las cuales son definidas en el subprograma Readwrit.cpp.

```
4 // inicializa arreglos con valores de temperatura, velocidad de vientos
5 // ángulo solar, etc para la hora inicial (InitHour)
6 InitTemperature((int)InitHour),
7 InitWinds((int)InitHour),
8 InitAngle((int)InitHour),
9 AdjustCoeffs();
```

En la función InitTemperature(), mediante la instrucción (*Temper)[ix][iy][iz]=(*TempTime)[InitHour][ix][iy] asignamos la temperatura medida en la hora inicial al arreglo (*Temper) de dimensión X por Y en todas sus capas en iz=1,2...6.

Código de la Función InitTemperature()

```
void InitTemperature(int InitHour)
//Aquí InitHour esta entre 1 y MaxHour+1

int ix, iy, iz,

// llena el arreglo de temperatura con los datos leídos desde el archivo de
//datos en la hora inicial dada ( InitHour)

for (iz=1; iz<=Nz; iz++)
  for (iy=1; iy<=Ny; iy++)
    for (ix=1; ix<=Nx; ix++)
      (*Temper)[ix][iy][iz]=(*TempTime)[InitHour][ix][iy]
```

Para el caso de la asignación de los valores de velocidad del viento en la dirección X y Y, sucede lo mismo que en el arreglo de temperaturas, se asigna el valor de una capa de dimensión X por Y. A un arreglo de dimensión X, Y, Z. Observemos que para el vector velocidad del viento en la dirección "Z" no se considera flujo de viento

```
void InitWinds(int InitHour)
//Aquí la InitHour esta entre 0 y MaxHour

int ix, iy, iz,

for (iz=1; iz<=Nz; iz++)
  for (iy=1; iy<=Ny; iy++)
    for (ix=1; ix<=Nx; ix++) {
      (*WindX)[ix][iy][iz]=(*WindTimeX)[InitHour][ix][iy]
      (*WindY)[ix][iy][iz]=(*WindTimeY)[InitHour][ix][iy]
      (*WindZ)[ix][iy][iz]=0.0
    }
```

Se actualiza también el ángulo solar de acuerdo a la hora inicial que fue solicitada.

```
void InitAngle(int InitHour)
Aquí la InitHour esta entre 0 y MaxHour
AngleTime=(Angles)[InitHour],
```

En el paso anterior se actualizaron los arreglos de velocidades de vientos, temperaturas y ángulo solar de acuerdo al valor del tiempo inicial. En el siguiente paso del algoritmo (paso No 10) se ajustan los coeficientes de química cinética para los contaminantes de acuerdo a la hora inicial requerida. Mediante el llamado de la función `AdjustCoeffs()` localizada en la línea 49 del programa `Contgral.cpp`. Esta función es definida en el programa `Update.cpp`.

La variable del ángulo solar `AngleTime`, se actualiza de acuerdo a la hora inicial requerida.

`AngleTime=(Angle)[InitHour]` y de acuerdo al ángulo solar medido en ese tiempo inicial, se ajustan los coeficientes de química cinética `K1` y `K6` correspondientes a los contaminantes `NO` y `OH`.

Código de la función `adjustCoeffs()`:

```
void AdjustCoeffs()
double cAngleRad=cos(AngleTime*3.14159/180.0),
if (AngleTime < 89.2) {
k1=1.25*exp(-0.507/cAngleRad)/60.0,
k6=3.33e-3*exp(-0.495/cAngleRad)/60.0,
else {
k1=0.0,
k6=0.0
```

El renglón 52 del programa `Contgral.cpp` es el encargado de efectuar el cálculo del número de pasos requeridos entre la hora inicial y final, necesarios para el cálculo de los contaminantes (Paso No 11 del algoritmo propuesto).

```
NSteps=(long int)((FinalHour-InitHour)*SecinHour/tau),
```

Con la obtención del valor de `Nsteps`, podemos efectuar el cálculo de los contaminantes en el período de tiempo solicitado. Con este dato podremos llamar `Nsteps` veces las funciones que nos apoyaran en el cálculo numérico de la ecuación de difusión-advención y de reacciones químicas. Esto se logra mediante el ciclo `for` indicado en la línea 56 del programa `Contgral.cpp`. Con esta línea se efectúa el paso No 12 del programa de flujo del algoritmo.

Parte del código del programa `Contgral.cpp`, en donde se visualiza el ciclo `for` usado para el cálculo `Nstep` veces, de la ecuación de difusión- advención:

```
6 for (long int k=1, k<=NSteps+1; k++) {
7
8 DiffusionAdvection()
9 Chemistry()
10
11 //actualiza el tiempo transcurrido
```

```

2 CurrentTime += tau;
3
4 //actualiza temperaturas vientos, ángulo solar etc cada minuto
5 if (((long int)floor(CurrentTime) % 60L) == 0) {
6     UpdateWinds(CurrentHour,CurrentTime),
7     UpdateTemperature(CurrentHour,CurrentTime),
8     UpdateAngle(CurrentHour,CurrentTime),
9     AdjustCoeffs(),
10 }
11
12 // actualiza el tiempo transcurrido en horas
13 if (((long int)floor(CurrentTime) % (long int)SecInHour) == 0) {
14     CurrentHour += 1,
15
16     // escribe datos de NO
17     itostr(CurrentHour,File1),
18     strcat(File1,"-3-no.dat")
19     WriteResults(File1,1),
20
21     // escribe datos de NO2
22     itostr(CurrentHour,File2),
23     strcat(File2,"-3-no2.dat"),
24     WriteResults(File2,2),
25
26     // escribe datos de O3
27     itostr(CurrentHour,File3),
28     strcat(File3,"-3-o3.dat"),
29     WriteResults(File3,3),
30
31     cout << "HORAS TRANSCURRIDAS " << CurrentHour << endl,
32 }
33
34 cout << k << " of " << NSteps << endl,
35 }
36

```

El siguiente paso en el algoritmo es el paso No 13. En este, se calcula por el método de Nicolson la difusión-advección de los contaminantes en las tres dimensiones. Para efectuar lo anterior el programa `Contgral.cpp` hace uso de la función `DiffusionAdvection()` localizada en la línea 58. Esta función se define en el archivo `Diff_xyz.cpp`.

Código de la Función `DiffusionAdvection()`:

```

void DiffusionAdvection()
{
    for (int ic=1, ic<=NumChem; ic++) { //lazo para todas las sustancias quimicas
        Diff_Advec_X(ic),
        Diff_Advec_Y(ic),
        Diff_Advec_Z(ic),
    }
}

```

La función `DiffusionAdvection()` se usa para resolver el problema tridimensional planteado por la ecuación de difusión-advección, recordemos que en el capítulo 3 se menciona el método numérico para resolver por particiones al dividirla en una serie de tres ecuaciones en una dimensión (McRae et al., 1982):

$$-1: \frac{\partial c_i}{\partial t} = K_x \frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} - \frac{\partial (uc_i)}{\partial x}$$

$$-2: \frac{\partial c_i}{\partial t} = K_y \frac{\partial^2 c_i}{\partial y^2} - \frac{\partial (vc_i)}{\partial y}$$

$$-3: \frac{\partial c_i}{\partial t} = K_z \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} - \frac{\partial (wc_i)}{\partial z}$$

La función anterior hace un llamado a 3 funciones. Diff_Advec_X(ic), Diff_Advec_Y(ic), Diff_Advec_Z(ic), definidas en el archivo Diff_xyz.cpp, y son las correspondientes a las tres dimensiones en donde se efectuarán los cálculos de los contaminantes, al aplicar el método numérico de Nicolson a la ecuación de difusión- Advección.

La función DiffusionAdvection() hace un llamado consecutivo de estas funciones, la primera partición de la ecuación de difusión en la dimensión X), se resuelve con las condiciones iniciales y de frontera $x=0$ y $x=Lx$, las concentraciones calculadas para cada nodo $(x, y, z) \in \Omega$, serán las concentraciones iniciales para la ecuación de difusión en la dimensión Y. Las concentraciones calculadas al resolver esta partición, serán a su vez las concentraciones iniciales para la ecuación de difusión en la dimensión Z.

Las concentraciones calculadas en este último paso serán las condiciones iniciales para el mecanismo de reacción químico utilizado; Estas concentraciones serán a su vez las concentraciones iniciales para el siguiente paso en el tiempo.

Código de las Funciones Diff_Advec_X(ic) , Diff_Advec_Y(ic) , Diff_Advec_Z(ic):

Diffusion + diffusion en la dirección X, paso en el tiempo tau

```

int Diff_Advec_X(int ic) // ic - El numero de sustancia
{
    int ix, iy, iz;
    double a, b, c, d, x;

    for (iy=1; iy<=Ny; iy++) {
        for (iz=1; iz<=Nz; iz++) {
            //assign coefficients
            double z=2.0*hx/Kxx, //Coeff auxiliar
            double z1=z*hx/tau, //Coeff auxiliar

            //coeff en nodos internos
            for (ix=2; ix<=Nx-1; ix++) {

                if ((*WindX)[ix][iy][iz] >= 0) {
                    a[ix]=1.0+z1*(*WindX)[ix-1][iy][iz];
                    b[ix]=2.0+z1+z1*(*WindX)[ix][iy][iz];
                    c[ix]=1.0
                    d[ix]=(*C)[ic][ix-1][iy][iz]
                            +(2.0-z1)*(*C)[ic][ix][iy][iz]
                            -(*C)[ic][ix+1][iy][iz];
                }
                else {
                    a[ix]=1.0;
                    b[ix]=2.0+z1-z1*(*WindX)[ix][iy][iz];
                    c[ix]=1.0-z1*(*WindX)[ix+1][iy][iz];
                    d[ix]=(*C)[ic][ix-1][iy][iz]
                            +(2.0-z1)*(*C)[ic][ix][iy][iz]
                            -(*C)[ic][ix+1][iy][iz];
                }
            }
        } // for ix

        // coeficientes para nodos en la frontera
        if ((*WindX)[1][iy][iz] >= 0.0) { //inflow
            a[1]=0.0;
            b[1]=(*WindX)[1][iy][iz]+Kxx/hx;
            c[1]=Kxx/hx;
            d[1]=(*WindX)[1][iy][iz]*(*C)_inX[c][0][iy][iz];
        }
        else { //outflow
            double z=hx/Kxx/tau;
            a[1]=0.0;
            b[1]=1.0+z1*(*WindX)[1][iy][iz]+hx/Kxx;
            c[1]=1.0+(*WindX)[2][iy][iz]+hx/Kxx;
            d[1]=1.0-z1*(*C)[ic][1][iy][iz]+(*C)[ic][2][iy][iz];
        }
    }
}

```

```

if ((*WindX)[Nx][iy][iz] >= 0.0) //outflow
double y1=hx*nx/Kxx/tau,
double y2=hx/Kxx
a[Nx]=1.0+y2*(*WindX)[Nx-1][iy][iz],
b[Nx]=1.0+y1+y2*(*WindX)[Nx][iy][iz],
c[Nx]=0.0,
d[Nx]=(*C)[c][Nx-1][iy][iz] + (1.0-y1)*(*C)[c][Nx][iy][iz],
}
else { //inflow
double y1=hx*nx/Kxx/tau,
double y2=hx/Kxx;
a[Nx]=1.0+y2*(*WindX)[Nx-1][iy][iz],
b[Nx]=1.0+y1,
c[Nx]=0.0,
double z1=1.0-y1-y2*(*WindX)[Nx][iy][iz],
double z2=y2*(*WindX)[Nx][iy][iz] * (*C_inX)[c][1][iy][iz] +
(*WindX)[Nx][iy][iz] * (*C_inX)[c][1][iy][iz],
d[Nx]=(*C)[c][Nx-1][iy][iz] + z1*(*C)[c][Nx][iy][iz] + z2,
}

//aplicar "progonka" para solución del sistema tridiagonal
Progon(a,b,c,d,x,Nx),

//reasignar los nuevos valores de concentraciones
for (ix=1, ix<=Nx, ix++){ (*C)[c][ix][iy][iz]=x[ix],
} // for iz

// for iy

vection + diffusion en la dirección Y para el paso en el tiempo tau
d Diff_Advec_Y(int ic)
at ix iy,iz
ect a,b,c,d,x,
or (ix=1, ix<=Nx, ix++){
for (iz=1, iz<=Nz, iz++){
//asignacion de coeficientes
double z=2.0*hy/Kyy, //Coeficiente auxiliar
double z1=z*hy/tau //Coeficiente auxiliar

//coeficientes en nodos internos
for (iy=2, iy<=Ny-1, iy++){
if ((*WindY)[ix][iy][iz] >= 0) {
a[iy]=1.0+z*(*WindY)[ix][iy-1][iz],
b[iy]=2.0+z1+z*(*WindY)[ix][iy][iz],
c[iy]=1.0,
d[iy]=(*C)[c][ix][iy-1][iz]
+(2.0-z1)*(*C)[c][ix][iy][iz]
-(*C)[c][ix][iy+1][iz],
}
else {
a[iy]=1.0,
b[iy]=2.0+z1-z*(*WindY)[ix][iy][iz],
c[iy]=1.0-z*(*WindY)[ix][iy+1][iz],
d[iy]=(*C)[c][ix][iy-1][iz]
+(2.0-z1)*(*C)[c][ix][iy][iz]
-(*C)[c][ix][iy+1][iz]
}
} // for iy

// coeficientes de nodos en la frontera
if ((*WindY)[ix][1][iz] >= 0.0){
a[1]=0.0
b[1]=(*WindY)[ix][1][iz]+Kyy*hy
c[1]=Kyy*hy
d[1]=(*WindY)[ix][1][iz]*(*C_inY)[c][0][iy][iz],
}
else {
double z=hy*hy/Kyy/tau,
a[1]=0.0
b[1]=1.0+z+(*WindY)[ix][1][iz]*hy*Kyy,
c[1]=1.0-(*WindY)[ix][2][iz]*hy*Kyy
d[1]=(1.0-z)*(*C)[c][ix][1][iz]+z1-(*C)[c][ix][2][iz]
}
}

```



```

d[Nz]=(*C)[c][x][y][Nz-1] + (1 0-y1)*(*C)[c][x][y][Nz],
}
else { //inflow
double y1=h*z*h*z/Kzz/tau,
double y2=h*z/Kzz,
a[Nz]=1 0-y2*( *WindZ)[x][y][Nz-1],
b[Nz]=1 0+y1,
c[Nz]=0 0,
double z1=1 0-y1-y2*( *WindZ)[x][y][Nz],
double z2=y2*( *WindZ)[x][y][Nz] * (*C_nZ)[c][1][x][y] +
(*WindZ)[x][y][Nz] * (*C_nZ)[c][1][x][y],
d[Nz]=(*C)[c][x][y][Nz-1] + z1*( *C)[c][x][y][Nz] + z2,
}

//Aplicar "progonka" para solución del sistema tridiagonal
Progon(a,b,c,d,x,Nz),

//reasignar valores de las nuevas concentraciones
for (xz=1, iz=<=Nz, iz++) (*C)[c][x][y][iz]=x[z],

} // for iy
// for ix

```

observemos que durante el cálculo de los contaminantes para cada una de las dimensiones en X, Y y Z, se venen que resolver un sistema lineal tridiagonal para la ecuación de difusión-advención (Ver método numérico planteado en el capítulo 3), mediante el uso de la función PROGON.

Código de la Función PROGON:

```

int Progon(vecl a, vecl b, vecl c, vecl d, vecl Solution, int n)

```

La solución de un sistema

$$\begin{aligned}
 -b[1]*x[1] + c[1]*x[2] &= d[1] \\
 a[2]*x[1] - b[2]*x[2] + c[2]*x[3] &= d[2] \\
 &\vdots \\
 a[n-1]*x[n-2] - b[n-1]*x[n-1] + c[n-1]*x[n] &= d[n-1] \\
 a[n]*x[n-1] - b[n]*x[n] &= d[n]
 \end{aligned}$$

Donde ser a[1]=0 y c[n]=0 !!

```

ct *ksi, *eta;
{
double y,

(n > NEQ-1) {
cout << "Excesivo número de Incognitas" << endl;
exit(1),

```

```

((ksi = (vecl *)malloc(sizeof(vecl))) == NULL) {
cout << "Progon no hay suficiente memoria\n";
exit(2),

```

```

((eta = (vecl *)malloc(sizeof(vecl))) == NULL) {
cout << "Progon no hay suficiente memoria\n";
exit(3),

```

```

[1]=0 0,
[n]=0 0,
(*ksi)[1]=0 0,
*eta[1]=0 0,
olution[n+1]=0 0

for (i=1 i <= n i++) {
y=a[i]-a[i-1])*(*ksi)[i],
(*ksi)[i+1]=c[i]y,
*eta[i+1]=a[i]*( *eta)[i]-d[i]y

```

```

* (p=0 i-- 1 i--

```

```
Solucion[i]=(*ksi)[i+1]*Solucion[i+1]+(*eta)[i+1],
```

```
ee(eta),
ee(ksi),
```

na vez que se aplicó la Función PROGON, se obtiene la solución para la ecuación de difusión-advección para la dimensión X, estos son los nuevos valores de contaminantes calculados y son reasignados a la matriz de contaminantes (*C)[i][x][y][z]=x[z]. Esta matriz será condición inicial para el siguiente cálculo de ecuación de difusión-advección en la dimensión Y, que a su vez nos dará las condiciones iniciales para la ecuación de difusión-advección para la dimensión Z. Y esta nos dará las condiciones iniciales en contaminantes para ser aplicados al modelo reacciones químicas.

siguiente paso en el algoritmo es el paso No 14. Se aplica el modelo numérico para el sistema de ecuaciones de reacciones químicas y recalcula las concentraciones de los contaminantes, usando como condiciones iniciales las calculadas en la función de Difusión-Advección para la dimensión "Z", Para efectuar anterior el programa Contgral.cpp hace uso de la función Chemistry() localizada en la línea 59, observemos que esta función se encuentra dentro del ciclo FOR del número de pasos requeridos para el cálculo de contaminantes entre la hora inicial y la hora final. Esto hace que la función Chemistry se ejecute cada vez que se hace un cálculo de la ecuación de difusión-advección para las tres dimensiones. Esta función se define en el programa C-gral.c.

Código de la Función Chemistry():

```
void Chemistry()
```

```
{ int ix,iz,i,k,
```

```
/*Calcula la concentración de todos los nodos */
```

```
for (ix=1, ix<=Nx, ix++) {
  for (iy=1, iy<=Ny, iy++) {
    for (iz=1, iz<=Nz, iz++) {
```

```
      /* asigna las concentraciones iniciales */
```

```
      for (k=1, k<=NumChem, k++) {
        lth(y,k)=(*C)[k][ix][iy][iz],
```

```
      /* no se dan las concentraciones que sean muy pequeñas? */
```

```
      if (lth(y,k) < 1.0e-10) lth(y,k)=1.0e-10,
```

```
/*establecer el tiempo inicial: en nuestro sistema autonomo este puede ser 0! */
```

```
t0=0.0,
```

```
/*establecer tout - el tiempo para las salidas de CVODE. Este puede ser
```

```
establecido igual al paso en el tiempo "tau" del problema de adveccion/difusion
```

```
/*tau is defined in ini-gral.cpp) */
```

```
tout=tau
```

```
/* llamar CVodeMalloc para inicializar CVODE.
```

```
NumChem is the problem size = number of equations
```

```
f is the user's right hand side function in y'=f(t,y)
```

```
t0 is the initial time
```

```
y is the initial dependent variable vector
```

```
BDF specifies the Backward Differentiation Formula
```

```
NEWTON specifies a Newton iteration
```

```
SV specifies scalar relative and vector absolute tolerances
```

```
&reltol is a pointer to the scalar relative tolerance
```

```
abstol is the absolute tolerance vector
```

```
FALSE indicates there are no optional inputs in iopt and ropt
```

```
iopt is an array used to communicate optional integer input and
```

```
output
```

```
ropt is an array used to communicate optional real input and
```

```

output
                                A pointer to CVODE problem memory is returned and stored in
cvoide_mem
*/
cvoide_mem = CVOdeMalloc(NumChem, f, t0, y, BDF, NEWTON, SV,
                        &retol, abstol,
                        NULL, NULL, FALSE, .iopt, .ropt, NULL),
if (cvoide_mem == NULL) {
    printf("CVOdeMalloc Fallo\n"),
    exit(1),
}
CVDense(cvoide_mem, Jac, NULL),
/* llama a CVODE solver */
flag = CVOde(cvoide_mem, tout, y, &t, NORMAL),
if ((flag != SUCCESS) {
    printf("CVOde failed\n")
    exit(1),
}
/* asigna los valores calculados */
for (k=1, k<=NumChem; k++)
    (*C)[k][x][y][z]= tth(y,k) > 0.0 ? tth(y,k) 0.0,
/* libera memoria del problema CVODE */
CVOdeFree(cvoide_mem),
} /* for iz */
} /* for iy */
/* for ix */

```

En la función Chemistry(), se hace uso de funciones como CvoideFree(), CVDense(), Cvoide(), etc., que son definidas en el software CVODE.

Cada vez que se aplicó la función Chemistry() , se obtienen nuevos valores de concentración de contaminantes, las cuales serán condiciones iniciales para el siguiente ciclo For del paso en el tiempo, al calcular la ecuación de Difusión-advección para la dimensión "X". Pero antes de entrar nuevamente a este ciclo FOR, se actualiza el tiempo transcurrido mediante la línea 62 en el programa Contgral.cpp

```

// actualiza el tiempo transcurrido
CurrentTime += tau,

```

En los pasos 15, 16, 17 y 18 del Diagrama de Flujo del algoritmo, también se ejecutan antes de iniciar otro ciclo For del paso en el tiempo. El paso 15 de nuestro algoritmo es un if en donde se nos cuestiona si el tiempo transcurrido es múltiplo de minutos, en caso afirmativo se cumple el paso 16 del algoritmo el cual nos indica que se tienen que actualizar los valores de los arreglos de vientos, temperaturas y ángulo solar. En caso negativo se cumple el paso 17 el cual es otra pregunta para saber si el tiempo transcurrido es múltiplo de horas, en caso positivo se ejecuta el paso 18 y escribe los resultados de los contaminantes NO, NO₂, NO₃. En caso negativo entonces inicia un nuevo ciclo for del paso en el tiempo(paso 12 del algoritmo).

En todos estos pasos 15, 16, 17 y 18 del Diagrama de Flujo del algoritmo, se ejecutan mediante el código registrado en las líneas 65 – 93 del programa Contgral.cpp

```

//actualiza temperaturas, vientos, ángulo solar etc cada minuto
if (((long int)floor(CurrentTime) % 60) == 0) {
    UpdateWinds(CurrentHour, CurrentTime),
    UpdateTemperature(CurrentHour, CurrentTime),
    UpdateAngle(CurrentHour, CurrentTime),
    AdjustCoeffs()
}

```

```

}

// actualiza el tiempo transcurrido en horas
if (((long int)floor(CurrentTime) % (long int)SecInHour) == 0) {

    CurrentHour += 1;

    // escribe datos de NO
    itostr(CurrentHour,File1),
    strcat(File1,"-3-no2.dat"),
    WriteResults(File1,1),

    // escribe datos de NO2
    itostr(CurrentHour,File2),
    strcat(File2,"-3-no2.dat"),
    WriteResults(File2,2),

    // escribe datos de O3
    itostr(CurrentHour,File3),
    strcat(File3,"-3-o3.dat"),
    WriteResults(File3,3),

    cout << "HORAS TRANSCURRIDAS " << CurrentHour << endl,
}

cout << k << " of " << NSteps << endl

```

paso 16 del algoritmo se ejecuta en las líneas 66-69 del programa Contgral.cpp. Como podemos observar, estas son funciones de actualización de valores de temperatura, viento y ángulo solar. Estas funciones se encuentran definidas en el programa Update.cpp.

Fragmento del programa Update.cpp:

```

UpdateWinds(int CurrentHour, double time)
// time - número de segundos pasados desde el tiempo inicial hasta el tiempo
// presente o actual

int ix,iy,iz,
double t1;

(CurrentHour-InitHour)*3600 0; // número de segundos pasados desde el
// tiempo inicial hasta la hora corriente o actual

for (iz=1, iz<=Nz; iz++)
    for (iy=1, iy<=Ny, iy++)
        for (ix=1, ix<=Nx, ix++) {
            // linear interpolation
            ("WindX")[ix][iy][iz]=("WindTimeX) [CurrentHour][ix][iy] +
                (("WindTimeX) [CurrentHour+1][ix][iy] -
                ("WindTimeX) [CurrentHour][ix][iy])/3600 0*(time-t1),
            ("WindY")[ix][iy][iz]=("WindTimeY) [CurrentHour][ix][iy] +
                (("WindTimeY) [CurrentHour+1][ix][iy] -
                ("WindTimeY) [CurrentHour][ix][iy])/3600 0*(time-t1),
        }

```

```

UpdateTemperature(int CurrentHour, double time)
// time - número de segundos pasados desde el tiempo inicial hasta el tiempo
// presente o actual

int ix,iy,iz,
double t1;

(CurrentHour-InitHour)*3600 0 // número de segundos pasados desde el
// tiempo inicial hasta la hora corriente o actual

for (iz=1, iz<=Nz; iz++)
    for (iy=1, iy<=Ny, iy++)
        for (ix=1, ix<=Nx, ix++) {
            // linear interpolation
            ("Temp")[ix][iy][iz]=("TempTime) [CurrentHour][ix][iy] +
                (("TempTime) [CurrentHour+1][ix][iy] -
                ("TempTime) [CurrentHour][ix][iy])/3600 0*(time-t1)
        }

```

```
double UpdateAngle(int CurrentHour, double time)
// time - número de segundos pasados desde el tiempo inicial hasta el tiempo
// corriente o actual
```

```
double t1,
// t1 = (CurrentHour-InitHour)*3600.0, //número de segundos pasados desde el
// tiempo inicial hasta la hora corriente o actual
// Interpolación lineal
// AngleTime = (*Angles)[CurrentHour]+(((*Angles)[CurrentHour+1]-
// (*Angles)[CurrentHour])/3600.0)*(time-t1),
```

```
// Calcula los coef que dependen del ángulo solar
// AdjustCoeffs()
```

```
double cAngleRad=cos(AngleTime*3.14159/180.0),
```

```
// (AngleTime < 89.2) {
// x1=1.25*exp(-0.507/cAngleRad)/60.0,
// x6=3.33e-3*exp(-0.495/cAngleRad)/60.0,
```

```
se {
// x1=0.0,
// x6=0.0,
```

El paso 18 del algoritmo se encuentra definido en las líneas 75-95 del programa Contgral.cpp. En este paso del algoritmo se actualiza el tiempo transcurrido en horas mediante la instrucción del renglón 75 y efectúa el llamado de la función WriteResults() para la impresión de los resultados en contaminantes NO, NO₂, y NO₃. Esta función escribe los datos a un archivo en formato *.txt listo para ser leído por "SURFER", este archivo contiene tres columnas de datos: "X", "Y", y "Concentr". La primera y segunda columna corresponden a las coordenadas dadas en Km relativas a la esquina inferior izquierda del mapa presentado en el capítulo 3. La tercera columna, "Concentr" corresponde al número de contaminante de acuerdo al asignado en el archivo readwrit.cpp y Chem.cpp.

El nombre del archivo de resultados *.txt, se forma de la concatenación de cadenas de caracteres en donde la primera cadena es el valor de la hora en la que se calculó esa concentración, así tenemos por ejemplo: 1-3-no.txt, el "11" nos indica la hora de cálculo, el "3" nos indica que el cálculo de las concentraciones se efectuó para el caso 3 de relaciones de VOC's/NOx, y la cadena "no" nos indica el contaminante calculado

Código de la Función WriteResults().

```
// WriteResults(char *FileName, int Substance)
```

```
int ix,iy,
// double x,y,
//
//
// stream FOut(FileName),
// ({FOut) {
// cout << "Inhabilitado para abrir " << FileName << endl,
// exit(1)
//
// Out << "x y Conc" << endl
// for (ix=1; ix<=Nx; ix++)
// for (iy=1; iy<=Ny; iy++) {
// x=(ix-1)*X/1000.0 // X coordenada, km
// y=(iy-1)*Y/1000.0 // Y coordenada, km
// FOut << x << " " << y << " " << (C)[Substance][ix][iy][1]
// << endl,
// }
// Out.close()
```

paso 12 del algoritmo correspondiente al ciclo **for** del paso en el tiempo. Se continuará ejecutando de acuerdo al número de pasos calculados a partir de la hora inicial y final solicitados en las líneas 36 y 37 de `Contgral` (Ver instrucción 52 del código de programa `Contgral.cpp`).

```
NSteps=(long int)((FinalHour-InitHour)*SecInHour/tau);
```

no cumplirse el paso 12 del algoritmo, es decir, cuando se han cumplido el total de cálculos en el número de pasos (`Nsteps`) solicitados, se ejecutara el paso 19 del algoritmo.

El paso 19 especificado en la instrucción 98 `DeleteArrays()` del programa `Contgral.cpp`, es una función que encarga de borrar la información de los arreglos usados para una posterior aplicación del programa `MCONT`. La función `DeleteArrays()` se encuentra definida en el programa `Ini_gral.cpp`.

Código de la Función DeleteArrays():

```
DeleteArrays()
{
  delete Angles,
  delete TempTime,
  delete WindTimeY,
  delete WindTimeX,
  delete Qflux,
  delete C_inZ,
  delete C_inY,
  delete C_inX,
  delete Temper,
  delete WindX,
  delete WindY,
  delete WindZ,
  delete C,
}
```

El paso final del algoritmo es el 20, este último paso se ejecuta mediante la instrucción 99 del código del programa `Contgral.cpp`

```
DeleteCVMODE(), // BORRA LA SOLUCION DE CVMODE
```

La función `DeleteCVMODE()` se encuentra definida en el programa `C-gral.cpp` y se encarga de liberar la memoria usada por `CVMODE` en el cálculo del sistema rígido de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales originado por la modelación del esquema generalizado de reacciones químicas de Seinfeld.

ESTA PAGINA NO SE HA
IMPRESO EN SU TOTALIDAD

CAPITULO 5

ANÁLISIS DE RESULTADOS.

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos al ensayar el modelo computacional "SIMCONT" con diferentes casos de concentraciones en contaminantes orgánicos o VOC's, con el objetivo de efectuar una validación de este al comparar los resultados con los obtenidos por Seinfeld, (1986).

En este desarrollo se analizan los resultados de los principales contaminantes representativos del modelo básico de reacciones químicas de Seinfeld. Estos contaminantes son el ozono (O_3), Dióxido de Nitrógeno (NO_2) y Oxido de Nitrógeno (NO), por lo tanto presentamos las gráficas de las condiciones iniciales de estos contaminantes en las Figuras 5.2, 5.3 y 5.4. También se presentan los gráficos de los flujos de NO, NO_2 y VOC's. (Ver Figuras 5.5, 5.6 y 5.7). Las condiciones iniciales se valorizan a las 8:00 hrs del día en estudio y son los valores con los que se ensaya el programa con distintas relaciones o niveles de contaminantes orgánicos VOC's.

El modelo se ensaya para los siguientes casos de relación de contaminantes orgánicos VOC's/NOx: baja, media y alta, con intensidad de luz variable de acuerdo al ángulo solar. Esto es debido a que no hay datos disponibles medidos de la concentración de VOC's.

El modelo también se ensaya con la relación intermedia de VOC's/NOx (caso 2), con intensidad de luz constante, esto es para comparar los resultados con los obtenidos para la relación con intensidad de luz variable

Los resultados que obtenemos del programa "SIMCONT" esta en formato "*.TXT" el cual es compatible para ser graficado en el Software "SURFER" que por su facilidad de uso y su estilo en la entrega de resultados a través de gráficas de contornos y de superficie hacen que los resultados sean fácilmente interpretadas.

SURFER, es un software comercial de Golden Software que corre en ambiente Windows, es de amplio y eficiente uso en la graficación en tercera dimensión para superficies y contornos, a partir de un archivo de datos XYZ. Sus comandos de uso son de fácil entendimiento y fácil manejo.

El comando DATA del menú GRID usa el archivo XYZ para producir un archivo tipo *.GRID el cual puede ser usado por el comando CONTOUR para producir un mapa de contornos, o bien usar el comando SURFACE para producir un Dibujo de una superficie.

FIGURA 5.2 CONCENTRACIÓN INICIAL DE O_3

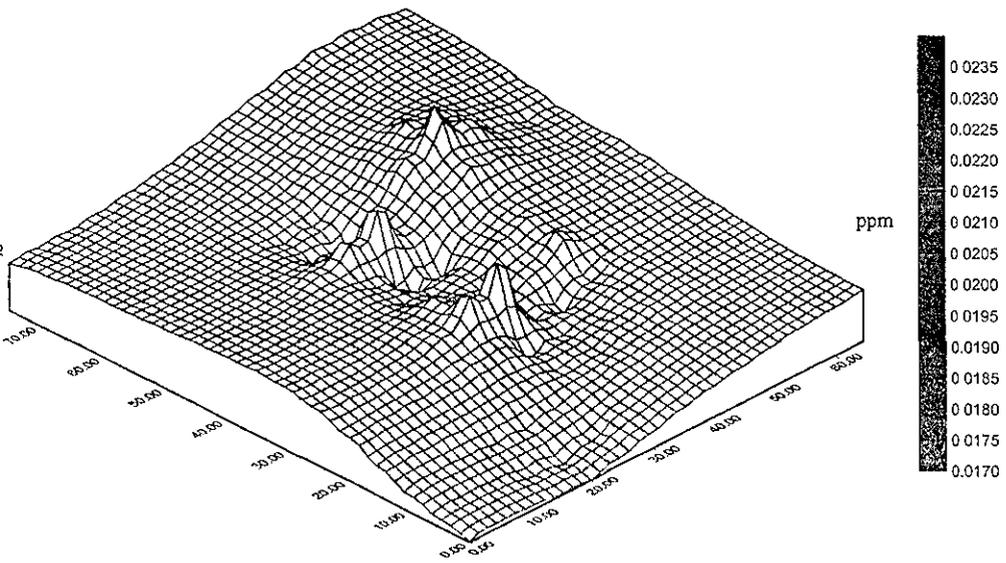
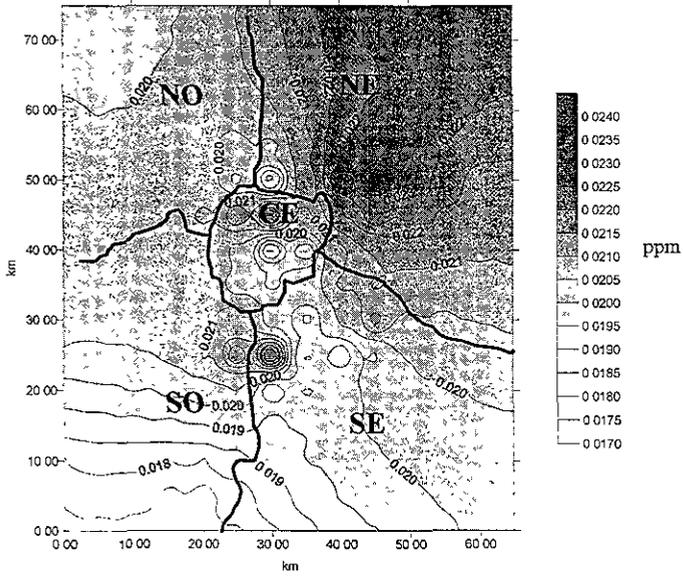


FIGURA 5.3 CONCENTRACIÓN INICIAL DE NO

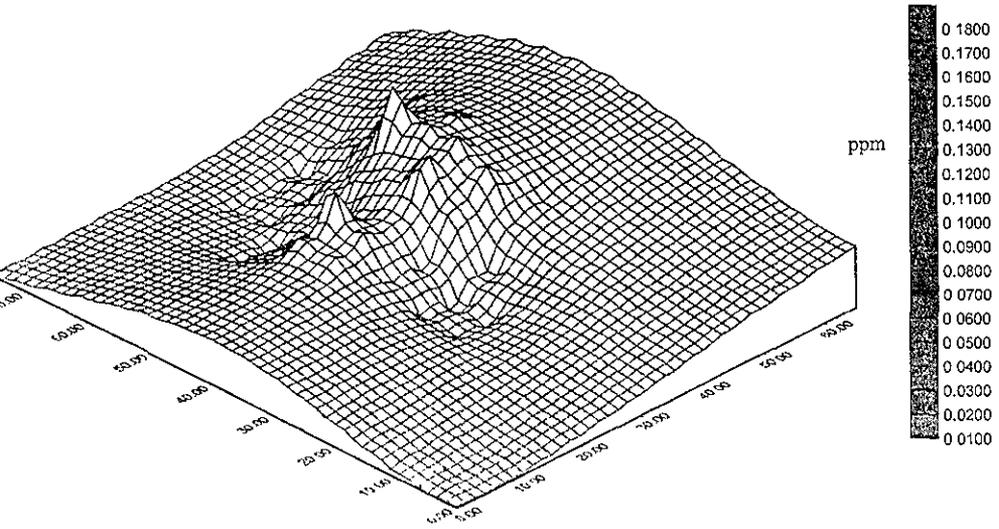
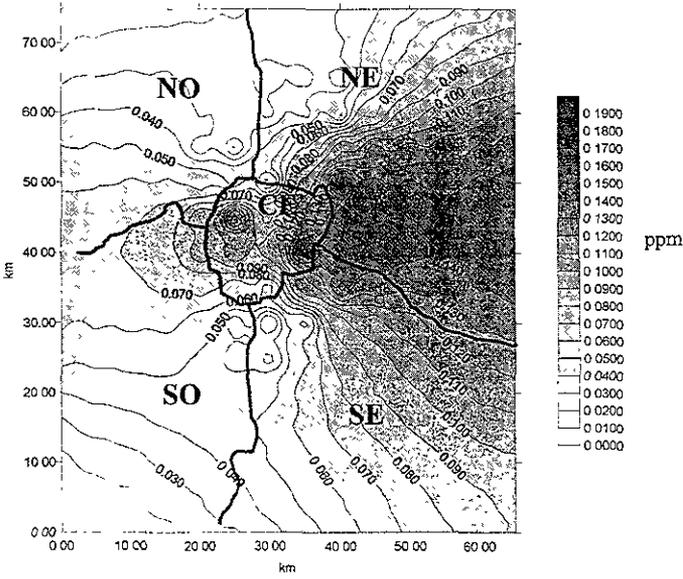


FIGURA 5.4 CONCENTRACIÓN INICIAL DE NO₂

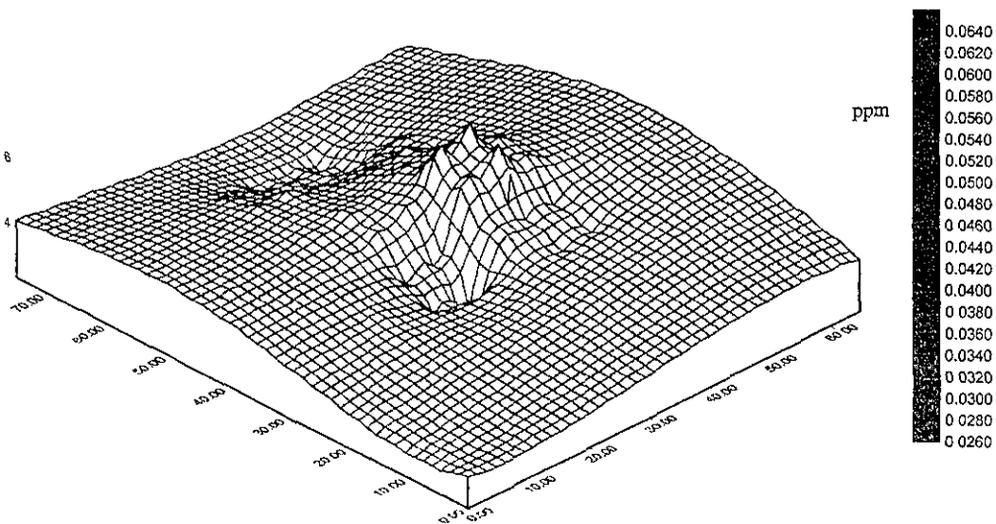
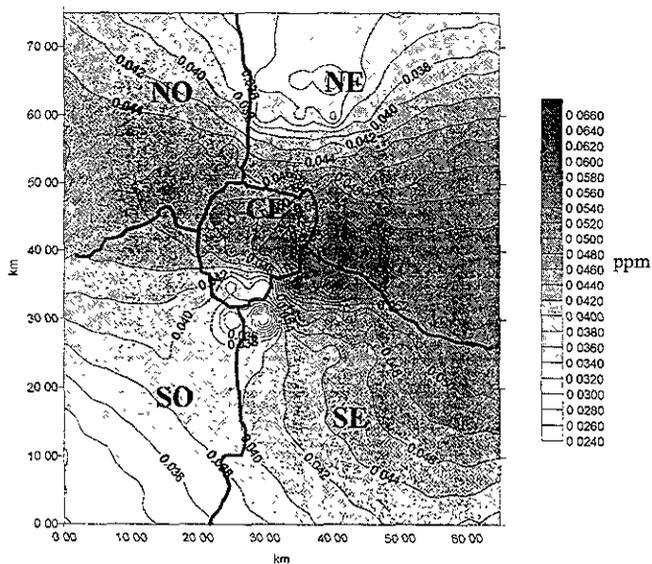


FIGURA 5.5 FLUJOS DE NO

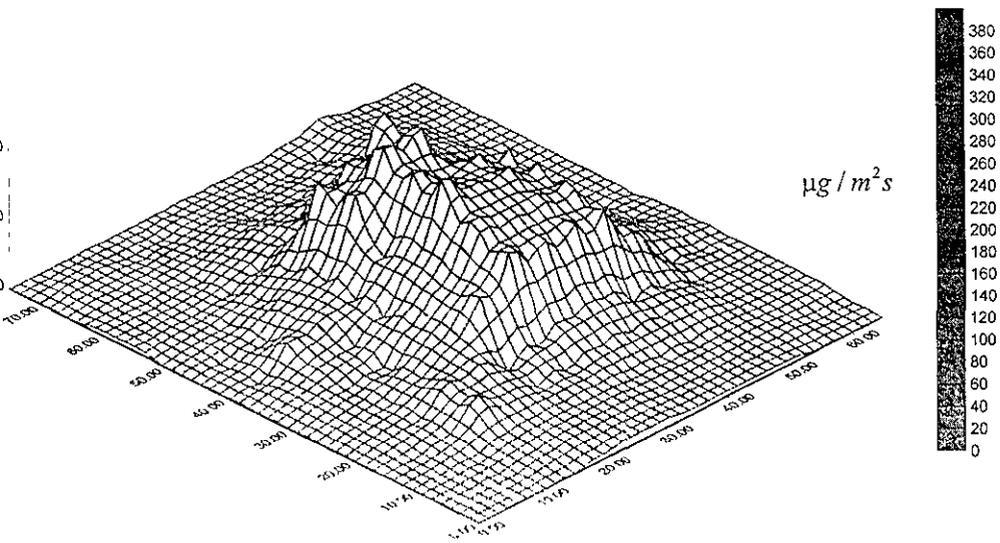
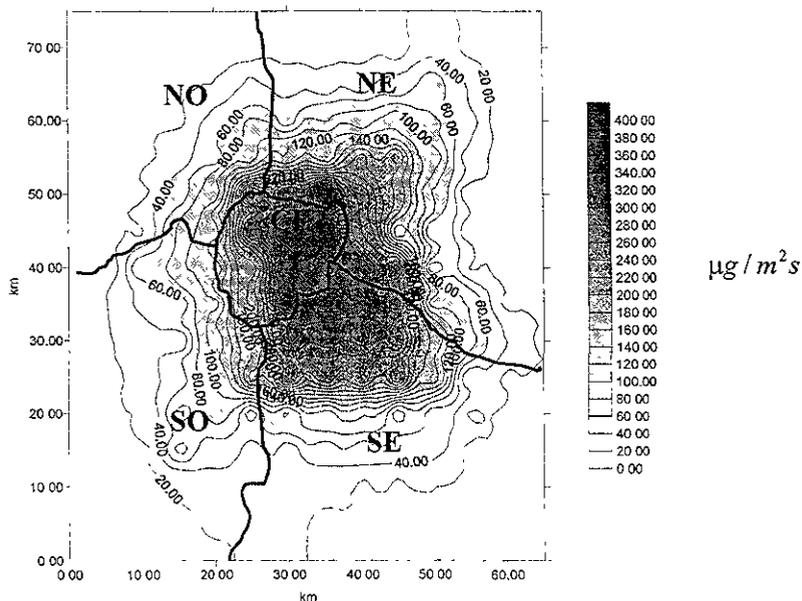


FIGURA 5.6 FLUJOS DE NO2

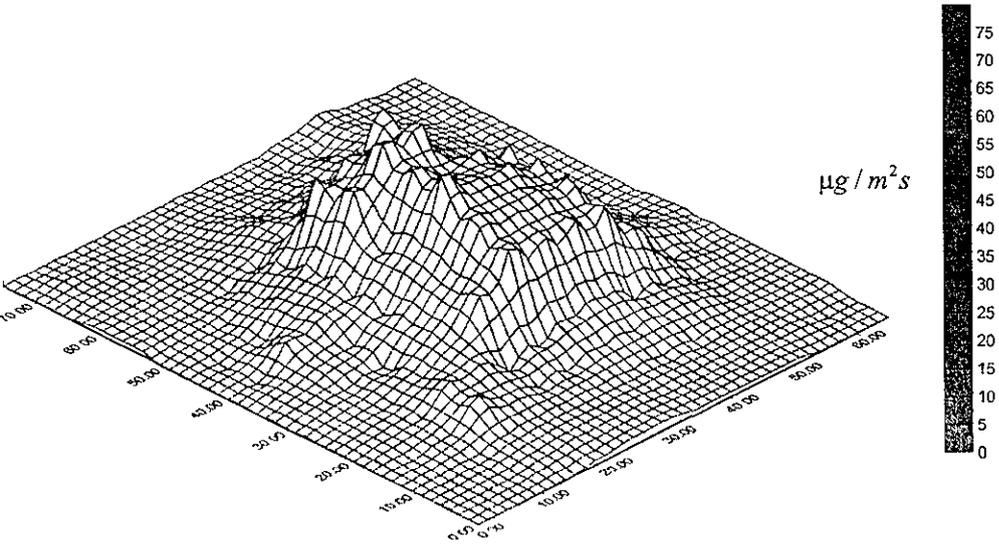
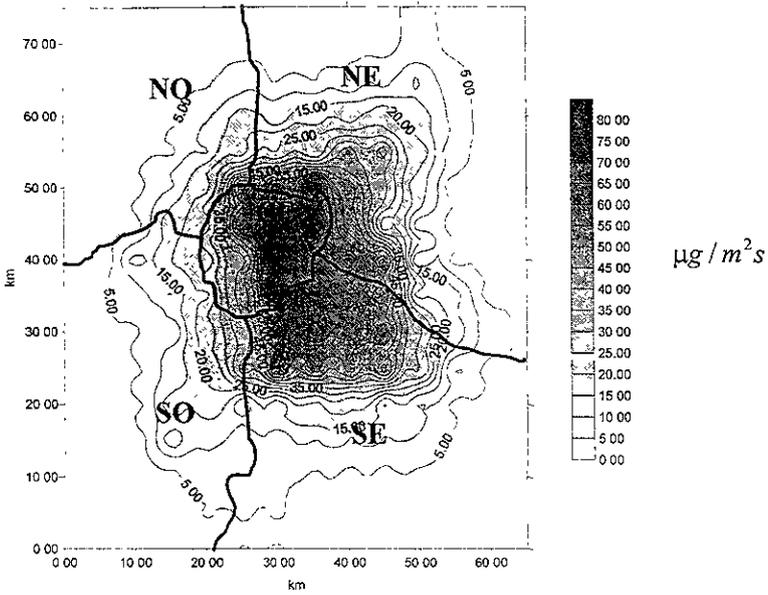
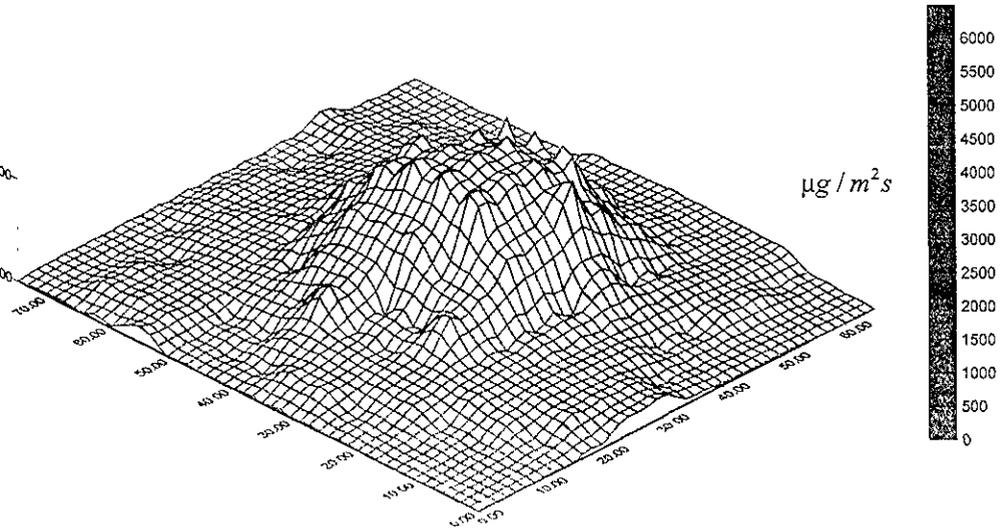
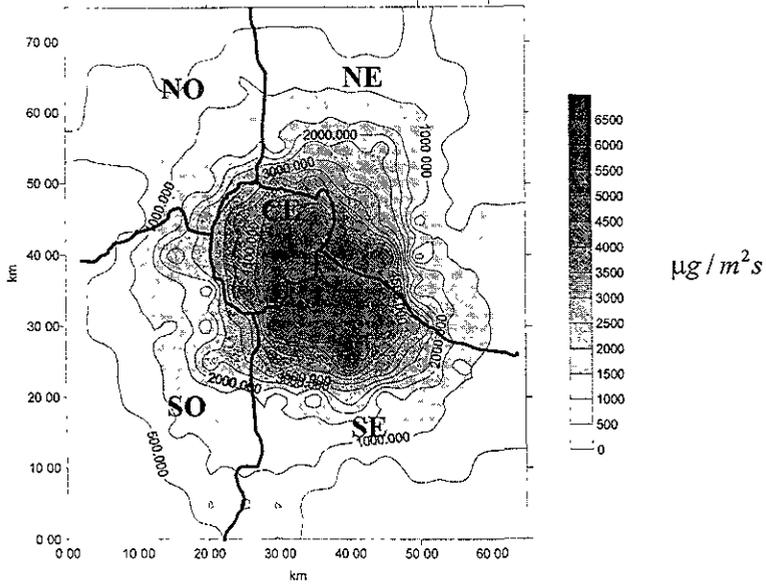
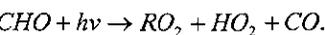
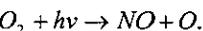


FIGURA 5.7 FLUJOS DE VOC's



5.2. Resultados en casos con intensidad de luz variable.

cambio de la intensidad de la luz solar, durante el día, tiene una influencia definitiva en la velocidad de las reacciones fotoquímicas, por lo que resulta importante introducir esta variable en el modelo de calidad del aire. Las reacciones que dependen de la intensidad de la luz solar en el mecanismo generalizado de formación del smog fotoquímico de Seinfeld son:



Las constantes de velocidad para estas reacciones las calculamos cada hora, de las 8 a las 18 horas (lapso del que suponemos se lleva a cabo la mayor parte de la fase activa de formación del smog fotoquímico), acuerdo a las siguientes expresiones, Velasco y Várela (1996):

$$K(NO_2) = 1.25x \exp(-0.507 \sec^{-1} \theta) \text{min}^{-1}.$$

$$K(RCHO) = 3.33E - 03x \exp(-0.495 \sec^{-1} \theta) \text{min}^{-1}.$$

Los ángulos cenitales para nuestro día de estudio (Información proporcionada del Instituto de Astronomía de UNAM), así como las constantes de velocidad calculadas en función de estos, se muestran en la Tabla 5.1.

Estas constantes son calculadas en el programa SIMCONT cuando se ensayan condiciones con intensidad de luz variable.

Tabla 5.1 Constantes de velocidad de reacciones químicas para el NO_2 y RCHO.

HORA	ANGULO CENITAL GRADOS	K(NO_2) 1/min	K(RCHO) 1/min
8	73.8166	0.20272	0.000564
9	60	0.45346	0.001237
10	46.7	0.59683	0.001618
11	34.55	0.67542	0.001826
12	25.3166	0.71339	0.001926
13	22.85	0.72106	0.001946
14	28.96666	0.70023	0.001891
15	39.8833	0.64560	0.001747
16	52.6666	0.54180	0.001472
17	66.25	0.35497	0.000974
18	80.1833	0.06389	0.000183

2.1 Caso 1, relación VOC's/NOx = 0.33.

Para este caso se ensaya el modelo con las condiciones iniciales anteriormente vistas junto con una relación de VOC's/NOx baja en comparación con los otros casos que veremos más adelante (Ver Figura 5.8 y 5.9).

Los resultados obtenidos en el modelo computacional "SIMCONT", muestran la evolución de los contaminantes O₃, NO, NO₂ para las 9:00 a las 18:00 horas (Ver las figuras 5.10, 5.11 y 5.12).

La difusión-advención de los contaminantes junto con las reacciones químicas ocurrentes se puede explicar de la siguiente manera:

A las 9:00 hrs observamos que tenemos una concentración inicial de VOC's muy baja que nos permitirá efectuar una rápida oxidación de NO pero no lo suficiente ya que se observa un decremento de los niveles de ozono que es usado para la oxidación del NO, sobre todo en las zonas en donde existe una gran cantidad del precursor NO. Se observa que los niveles de la concentración del NO empiezan a disminuir mientras que las del NO₂ se incrementan debido a la oxidación del NO.

A las 12:00 hrs y 15:00 hrs se observa un incremento en los niveles de ozono, debido a la disociación del NO₂ por la luz solar, los VOC's continúan oxidando a los NO, originando que los niveles de concentración de los NO disminuyan y aumenten las concentraciones de NO₂.

A las 18:00 hrs observamos que la rampa de incrementos en los niveles de ozono, ya no fueron tan altos debido a que el nivel del NO decreció a tal grado que en la mayoría de las zonas de estudio se observó una concentración muy baja (menor a los 0.025 ppm) y por consiguiente el nivel de incrementos del NO₂ siguió incrementando pero en menos proporción. Originando menos incrementos en los niveles de ozono al ocurrir la disociación del NO₂.

2.2 Caso 2, relación VOC's/NOx = 1.66.

Para este caso se ensayó el modelo con una relación de VOC's/NOx, un poco más reactiva en comparación con el caso anterior (Ver Figuras 5.13 y 5.14).

Los resultados obtenidos del modelo computacional "SIMCONT", muestran la evolución de los contaminantes O₃, NO, NO₂ para las 9:00 a las 18:00 horas (Ver las Figuras 5.15, 5.16 y 5.17).

En las gráficas de las 9:00 hrs, observamos que rápidamente se acumula Ozono en todas las zonas, existe una mayor acumulación en donde no se tienen precursores primarios (NO) y un menor incremento en aquellas zonas en donde se tiene una gran cantidad de NO, veamos por ejemplo la zona noreste inicialmente teníamos un promedio de 0.022 ppm e incremento a 0.030 ppm en esta zona tenemos inicialmente una gran cantidad de NO y observamos un incremento de 0.008 ppm. Para la zona noroeste inicialmente se tenía 0.020 ppm e incremento a 0.036 ppm, sufriendo un incremento de 0.016 ppm el doble que el de la zona noreste. Esto quiere decir que existe un mayor incremento en las zonas donde existe una menor concentración de NO, comprobándose que existe un mínimo gasto de Ozono para la oxidación de NO para aquellas zonas ricas en NO. Si comparamos esta gráfica con la del caso anterior para la misma hora observamos que para el caso 1 se tiene una disminución de ozono en todas las zonas y posteriormente en las horas siguientes se observó un incremento, a diferencia de este caso desde la primera hora se observa un incremento. La conclusión que podemos obtener de esto es que en este caso tenemos una

cantidad más grande de VOC's que hacen más reactiva y por consiguiente más rápida la oxidación de NO en menos consumo de Ozono.

Al analizar las gráficas de NO y NO₂ para las 9:00 hrs, comprobamos lo anteriormente dicho en el análisis del Ozono. Se observa como los niveles de NO se decrecientan al oxidarse en su mayoría por los VOC's y una pequeña parte por ozono. Observamos un incremento de concentraciones de NO₂ debido a la oxidación del NO.

Para las 12.00 hrs el comportamiento del ozono sigue concentrándose y se observan mayores incrementos en la parte media de la franja noreste-sureste desplazándose hacia el centro. Observemos que esta zona es precisamente el lugar en donde tenemos el mayor índice de precursores NO_x. El comportamiento del NO sigue decrecientandose muy rápidamente mientras que el NO₂ también empieza una curva de decremento. Al analizar esto concluimos que el NO sigue oxidándose y ha llegado a un nivel en donde los niveles son casi nulos. Esto hace que ya no exista más NO para la formación de NO₂ por lo que este contaminante también empezará su decremento al disociarse con la luz solar para la formación de ozono.

Para las 15 hrs el ozono sigue incrementándose, sin embargo, su rampa de incrementos es menor debido al consumo del NO₂ el cual ya se encuentra en pocas cantidades llegando casi a la desaparición debido a que ya no existen precursores primarios NO para alimentar la formación del NO₂.

Para las 18 hrs se observa un mínimo incremento de la concentración de ozono, originado por la disociación total de las últimas concentraciones de NO₂, la cual llega a límites nulos debido a que el NO precursor del NO₂ se encuentra totalmente extinguido de las zonas en estudio.

2.3 Caso 3, relación VOC's/NO_x = 6.66.

En este caso se ensaya el modelo con una de las relaciones más reactivas de VOC's/NO_x. La distribución de las concentraciones iniciales de los VOC's para este caso se muestran en las Figuras 5.18 y 5.19.

Los resultados obtenidos del modelo computacional "SIMCONT", muestran la evolución de los contaminantes O₃, NO, NO₂ para las 9:00 a las 18.00 horas (Ver las Figuras 5.20 a 5.22).

Al ensayar con una mayor concentración de VOC's se generó una atmósfera muchos más reactiva que en los casos anteriores. Esto hace que no exista consumo inicial de ozono para oxidación del NO y por consiguiente un rápido incremento de ozono con un rápido decremento de los niveles de NO debido a la oxidación de este con los VOC's, y un rápido incremento de NO₂ para un posterior y rápido decremento de NO₂.

Al observar las gráficas de las 9.00 hrs como existe un gran incremento de ozono y de NO₂ y un rápido decremento de NO.

Para las 12:00 hrs ya no observamos niveles de NO en casi todas las zonas, mientras que para el NO₂ se observa un gran decremento debido a la disociación de este para la formación de Ozono, el cual podemos observar sigue incrementando pero a una rampa de incremento más baja que el de las 9:00 hrs.

Las 15:00 hrs casi no se incrementaron las concentraciones de ozono y esto es explicable si observamos que la gráfica de las concentraciones de NO y NO₂ son nulas en todas las zonas en estudio, esto nos indica que todo el NO₂ se ha disociado y que en breve ya no existirá más para seguir incrementando los niveles de ozono.

Las 18:00 se confirma lo anteriormente expresado, la disociación de NO₂ fue total, debido a que no hubo más NO que contribuyera en la formación de este, en la gráfica de ozono se observa una estabilidad y zonas más definidas de las concentraciones de ozono, se observan ligeros decrementos en la zona central de la banda noreste -sudeste con desplazamiento hacia el centro, lugar en donde se habían observado los más altos índices de ozono.

FIGURA 5.8 CONCENTRACIÓN INICIAL DE RCHO CASO 1

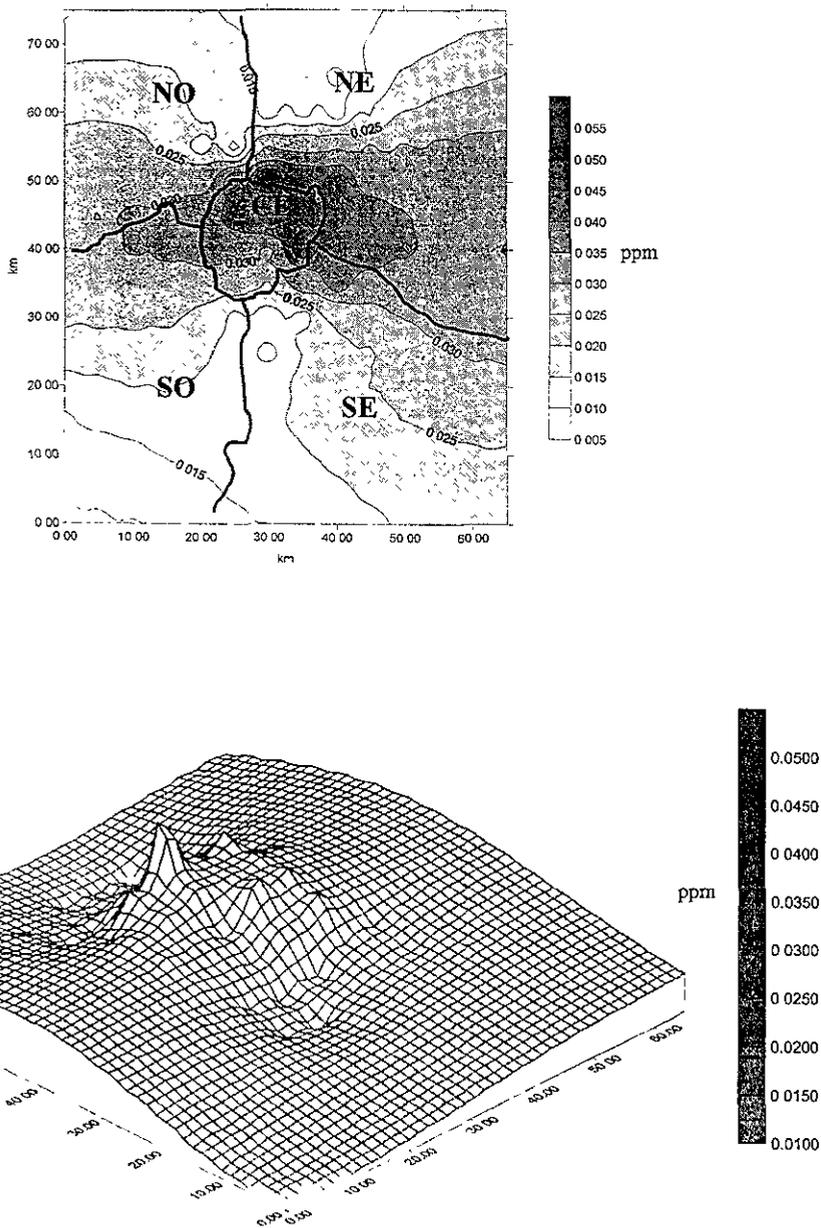
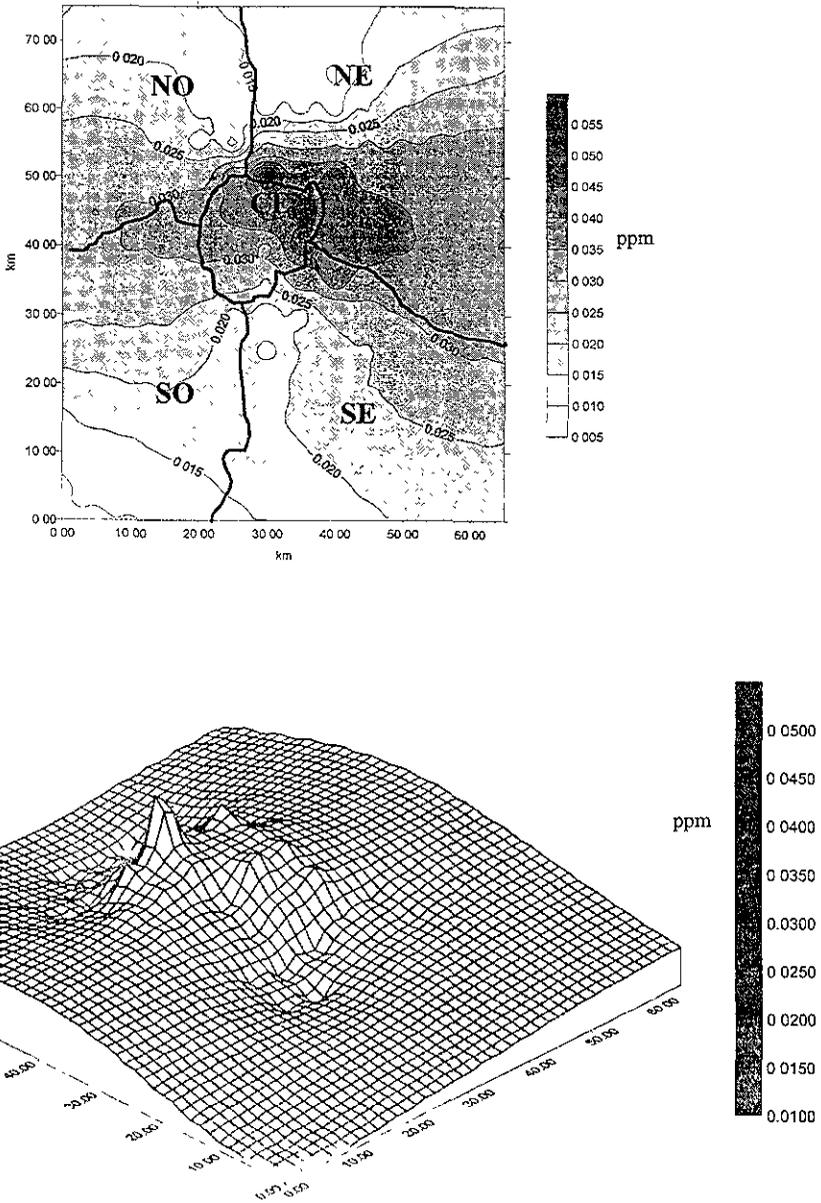


FIGURA 5.9 CONCENTRACIÓN INICIAL DE RH CASO 1



CONCENTRACIÓN DE OZONO O_3
CASO 1

FIGURA 5.10A

9:00 HRS

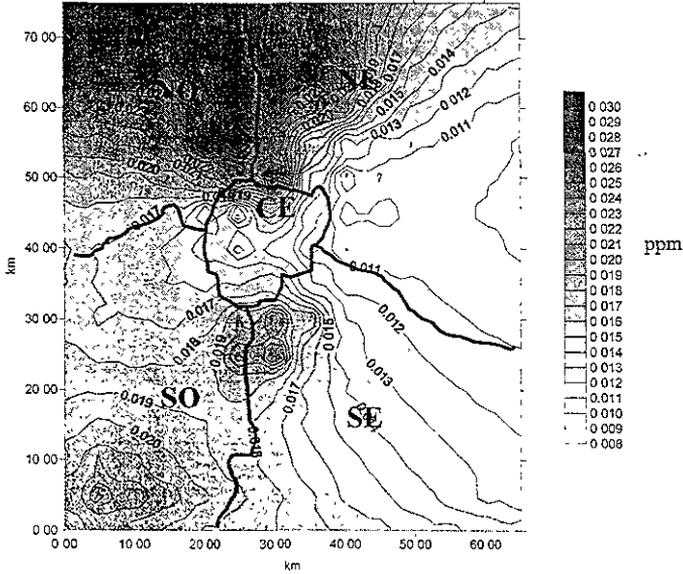
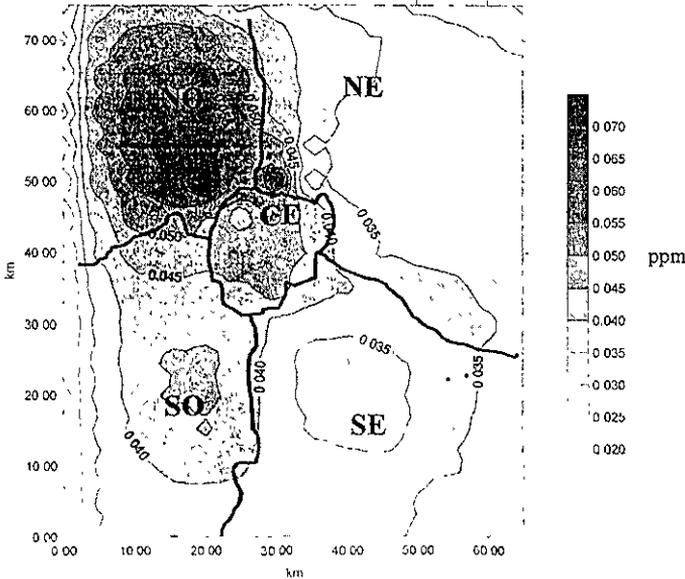


FIGURA 5.10B

12:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE OZONO O_3
CASO 1

FIGURA 5.10C

15:00 HRS

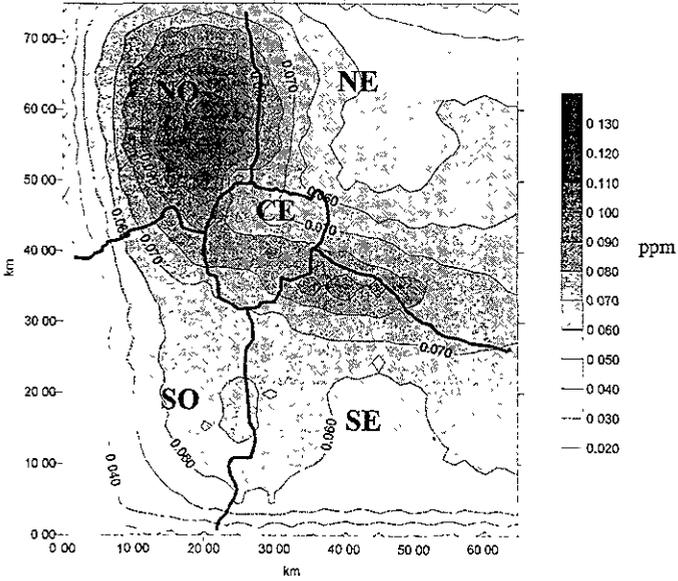
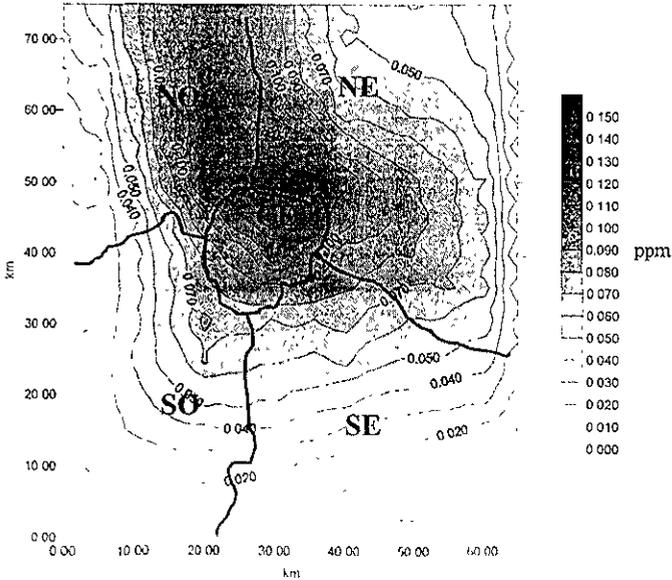


FIGURA 5.10D

18:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO CASO 1

FIGURA 5.11A

9:00 HRS

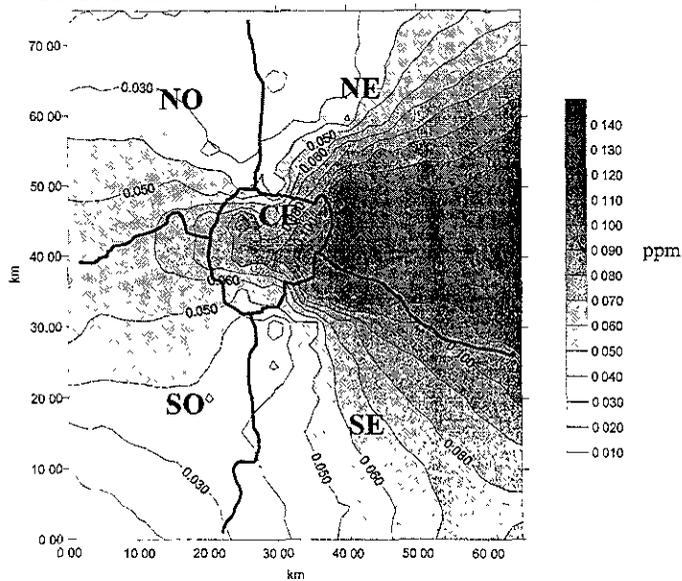
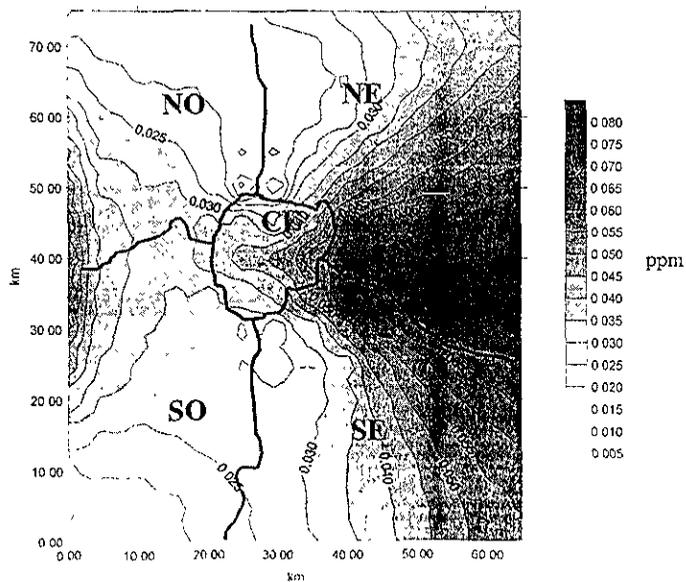


FIGURA 5.11B

12:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO
CASO 1

FIGURA 5.11C

15:00 HRS

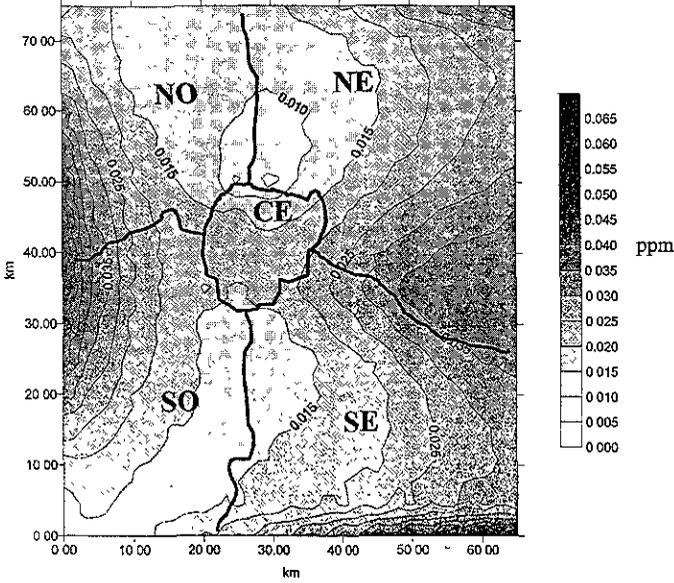
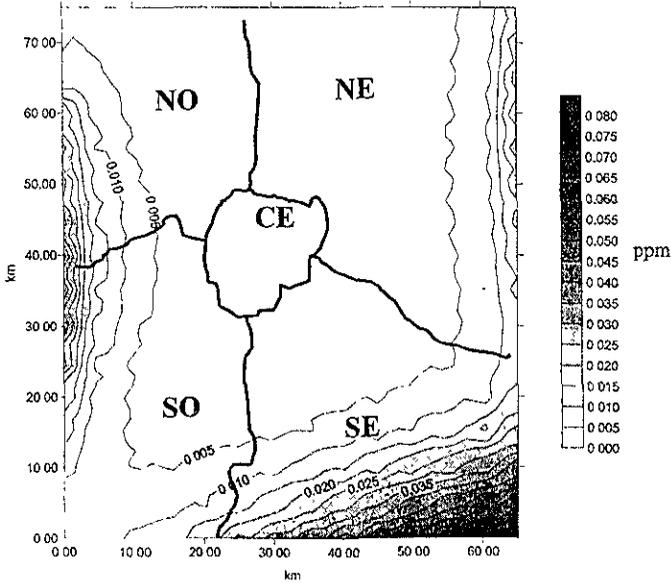


FIGURA 5.11D

18:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO_2
CASO 1

FIGURA 5.12A

9:00 HRS

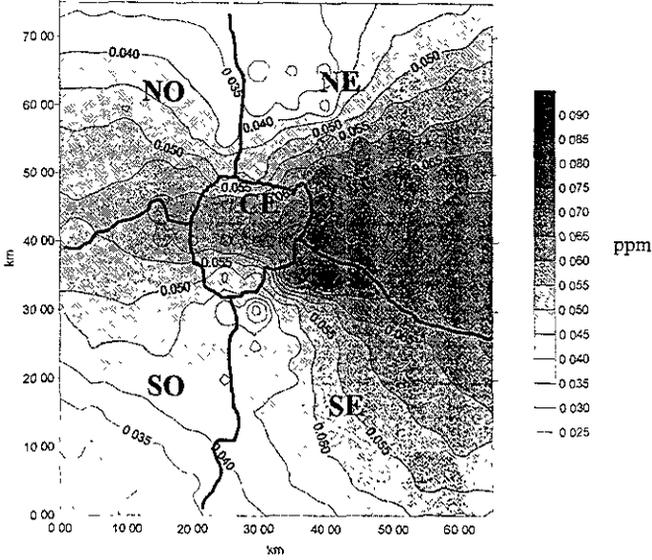
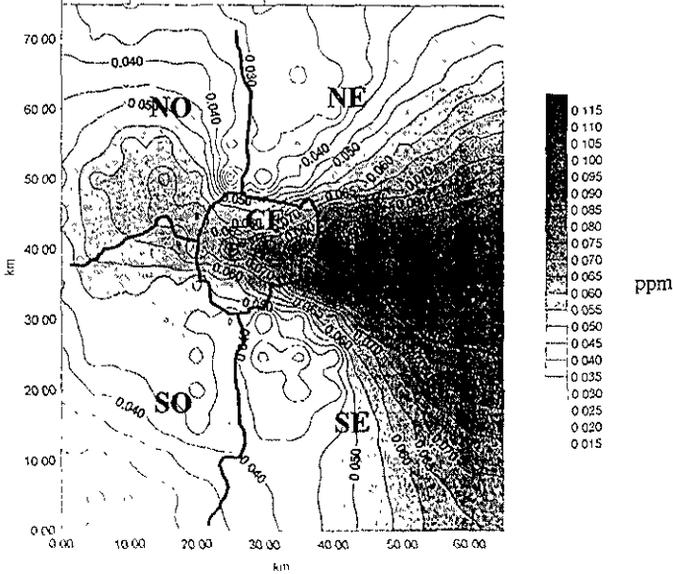


FIGURA 5.12B

12:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO_2
CASO 1

FIGURA 5.12C

15:00 HRS

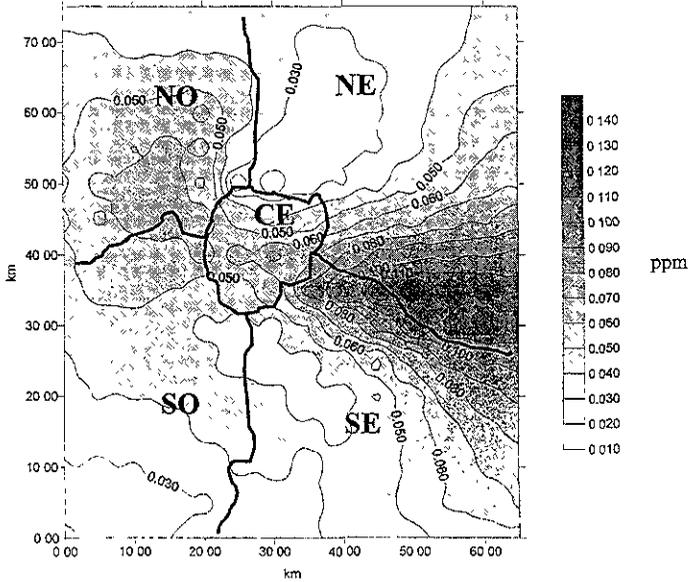


FIGURA 5.12D

18:00 HRS

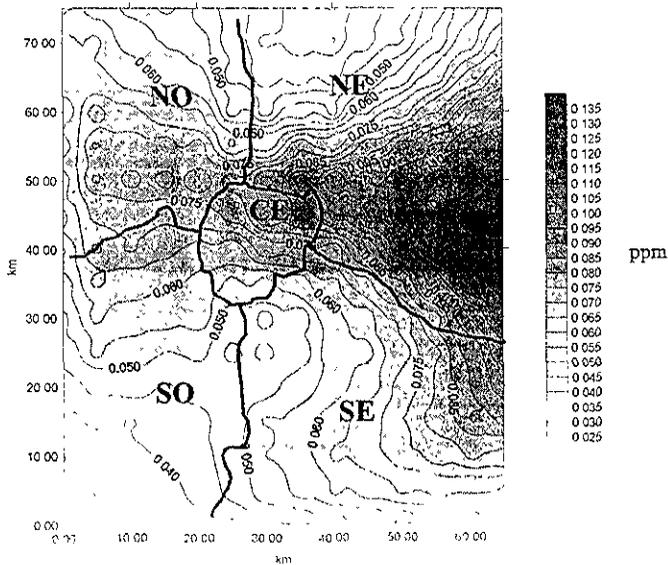


FIGURA 5.13A CONCENTRACIÓN INICIAL DE RCHO CASO 2

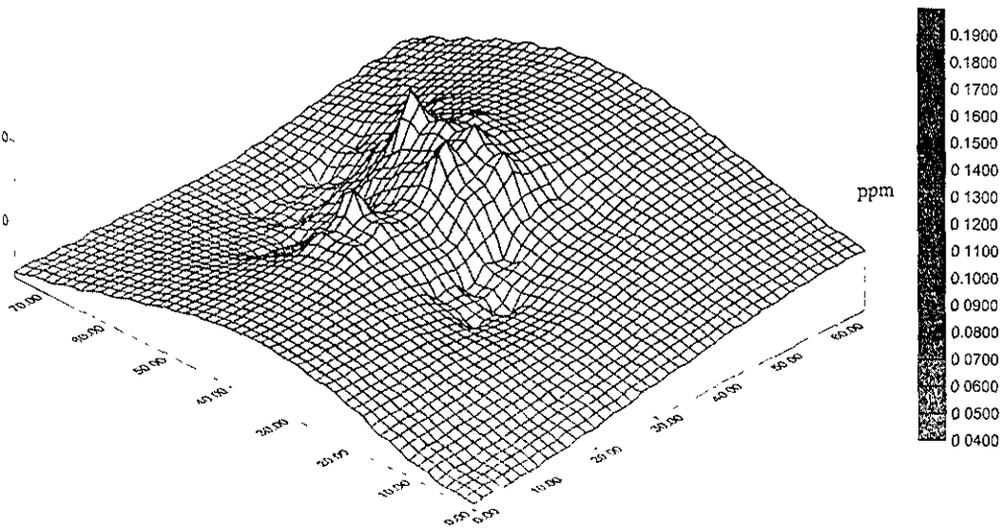
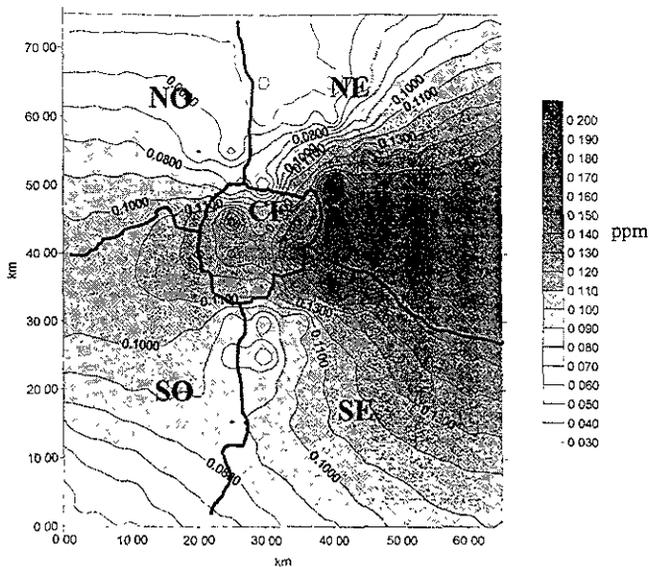
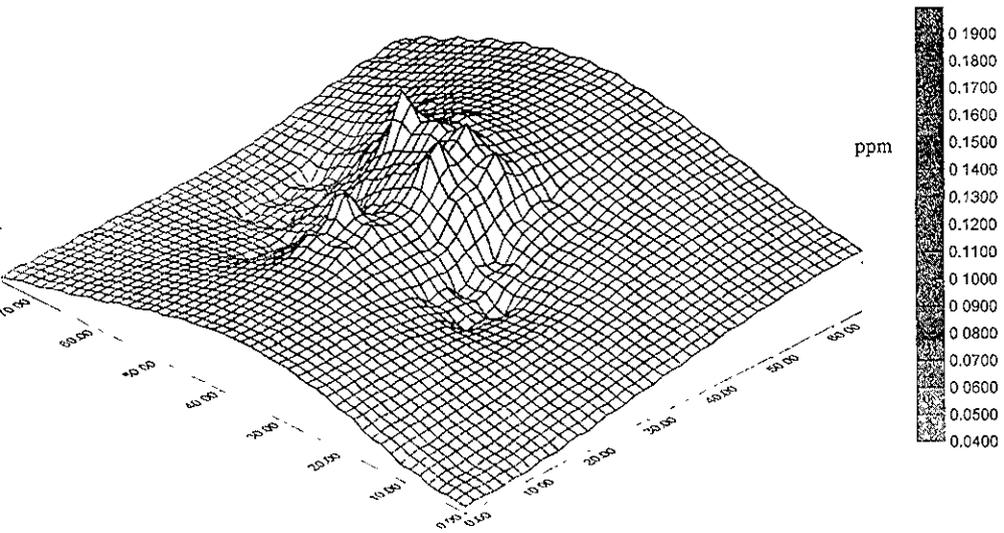
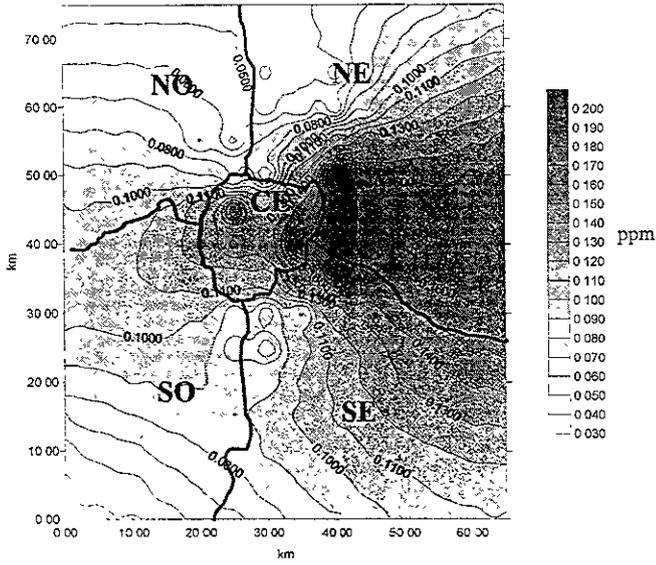


FIGURA 5.14 CONCENTRACIÓN INICIAL DE RH CASO 2



CONCENTRACIÓN DE O_3
CASO 2

FIGURA 5.15A

9:00 HRS

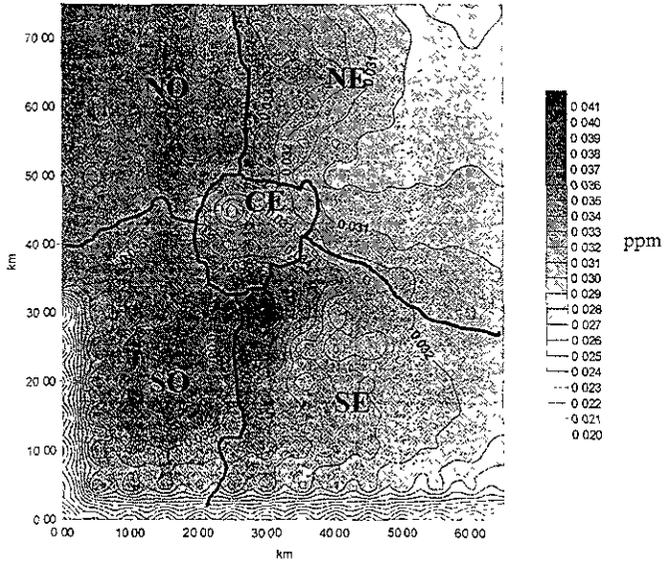
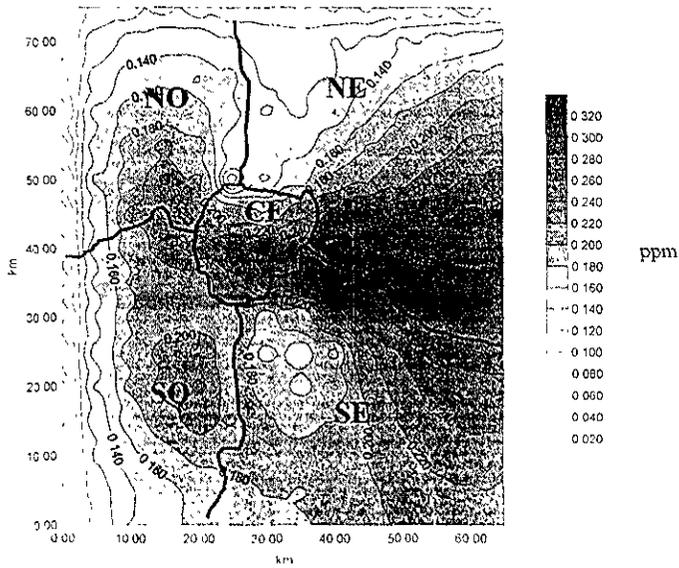


FIGURA 5.15B

12:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE O_3
CASO 2

FIGURA 5.15C

15:00 HRS

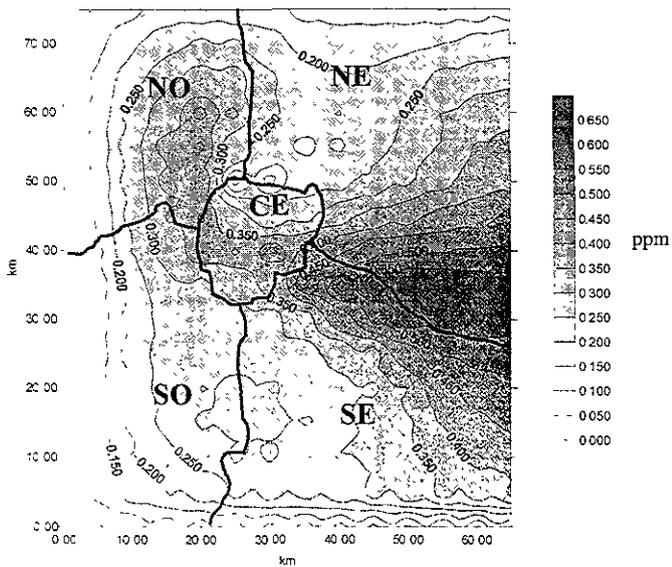
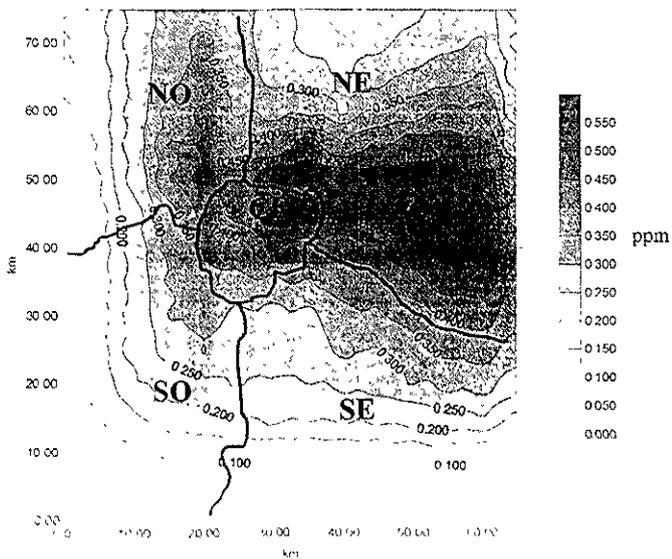


FIGURA 5.15D

18:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO
CASO 2

FIGURA 5.16A

9:00 HRS

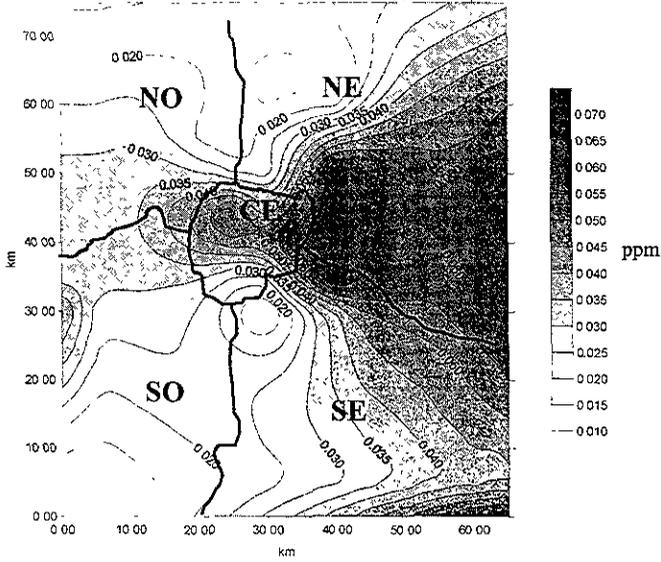
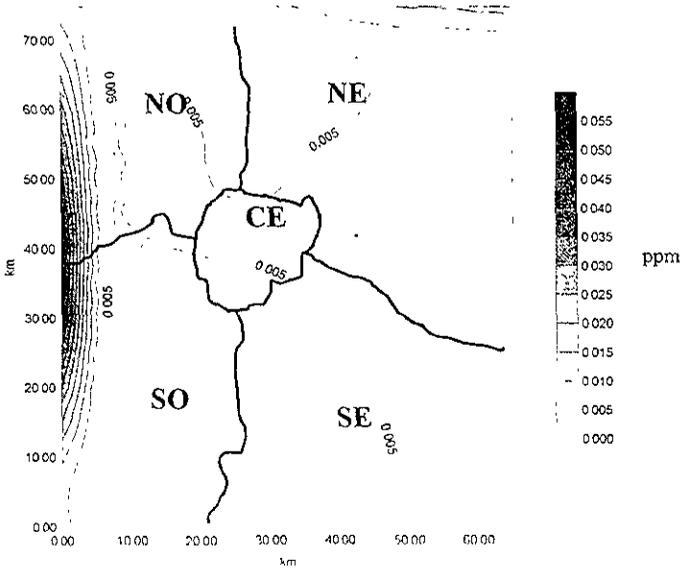


FIGURA 5.16B

12:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO
CASO 2

FIGURA 5.16C

15:00 HRS

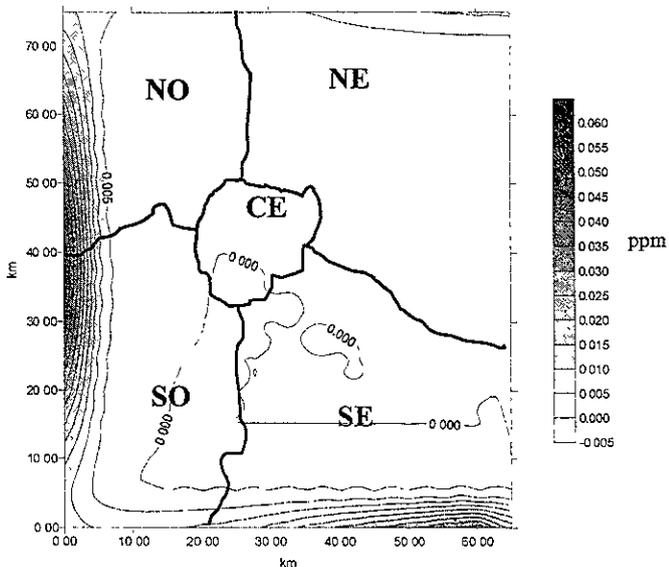
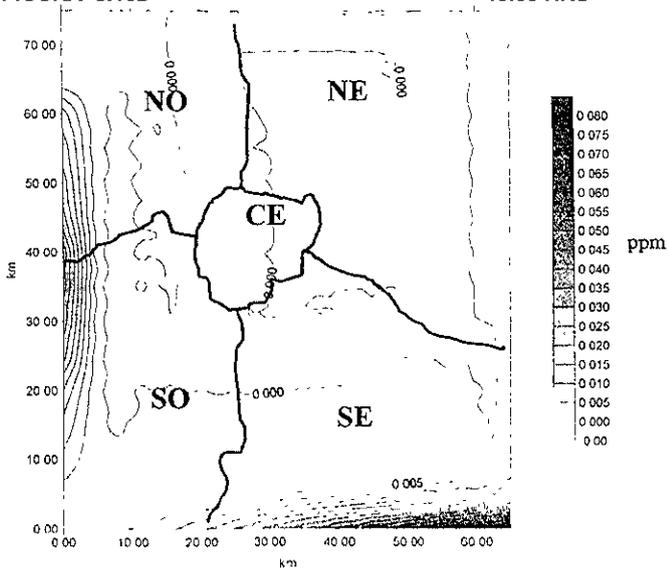


FIGURA 5.16D

18:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO_2
CASO 2

FIGURA 5.17A

9:00 HRS

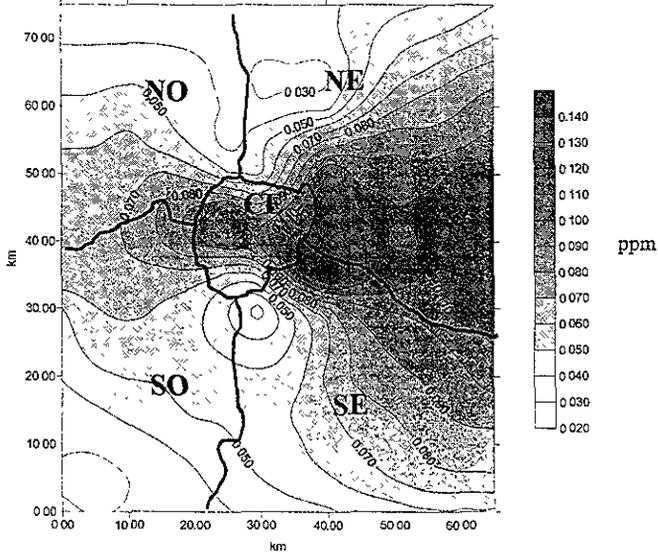
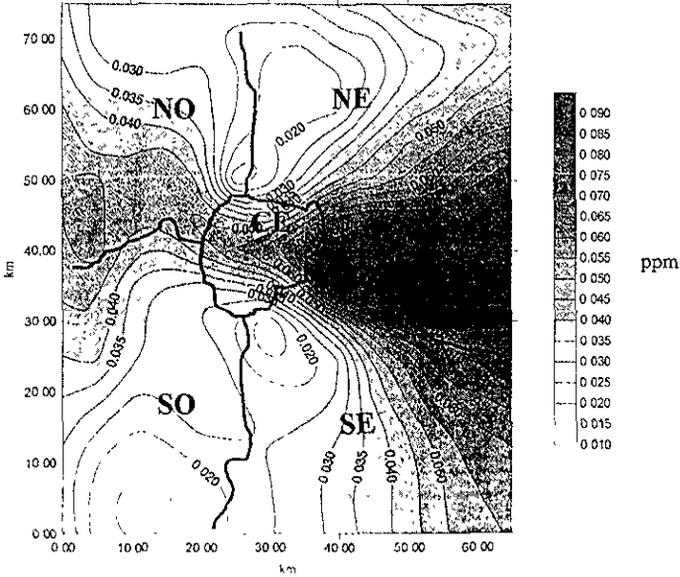


FIGURA 5.17B

12:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO_2
CASO 2

FIGURA 5.17C

15:00 HRS

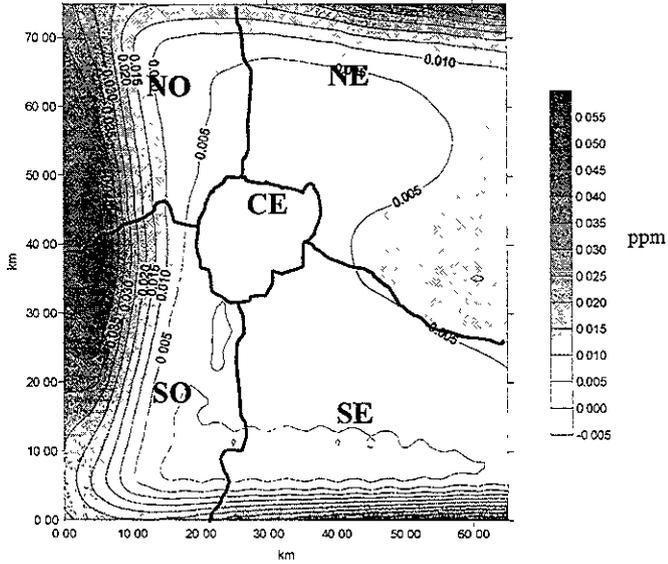


FIGURA 5.17D

18:00 HRS

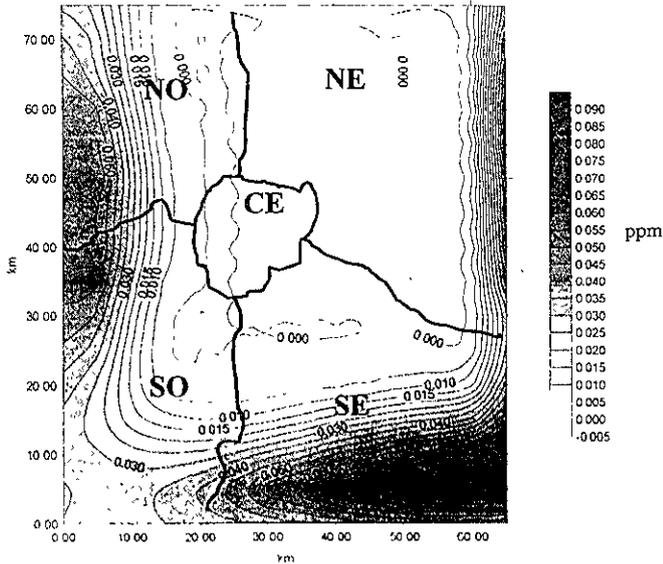


FIGURA 5.18 CONCENTRACIÓN INICIAL DE RCHO CASO 3

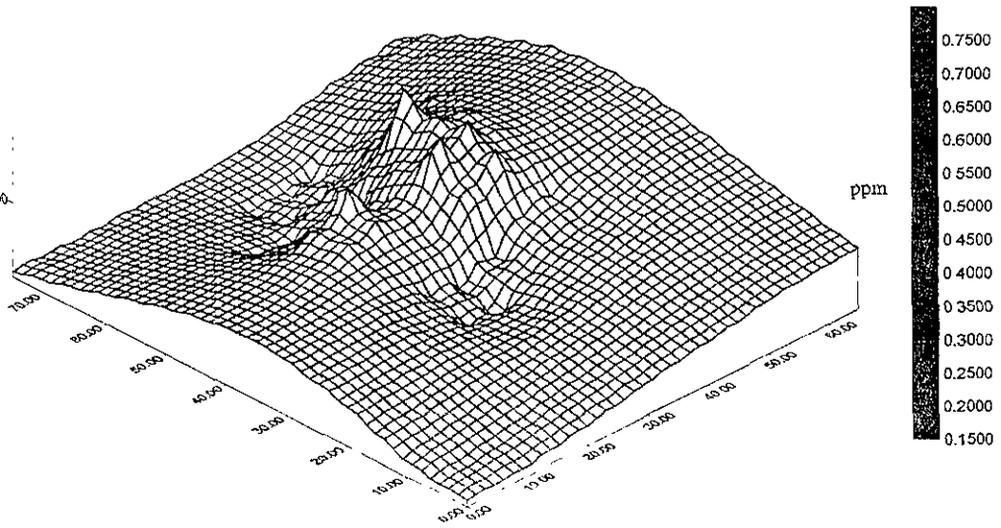
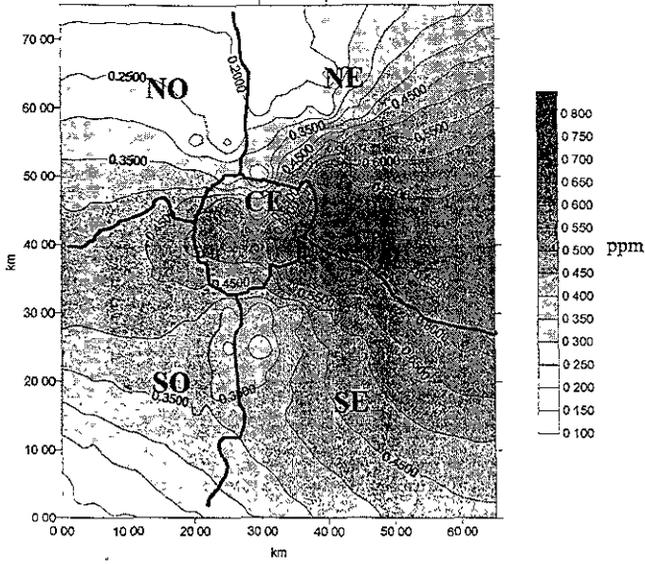
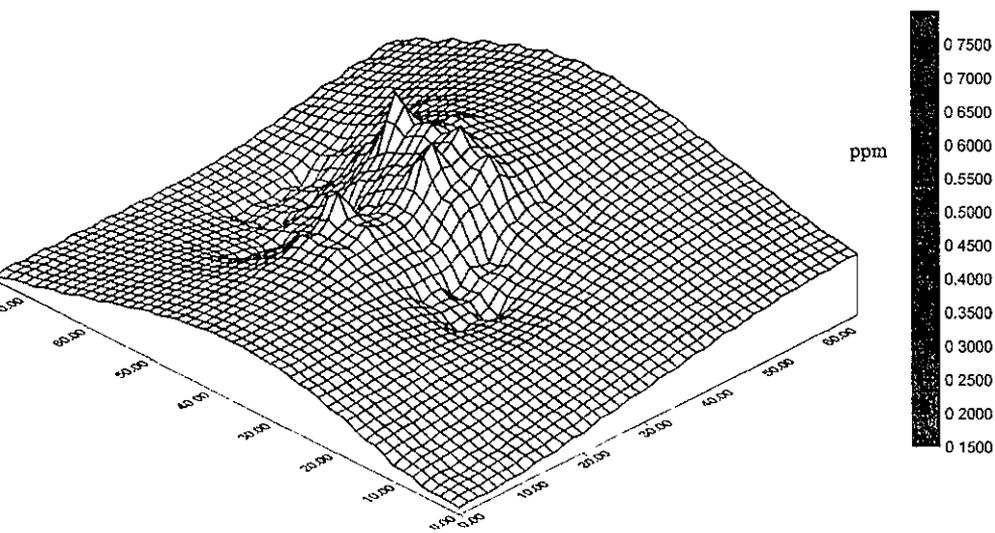
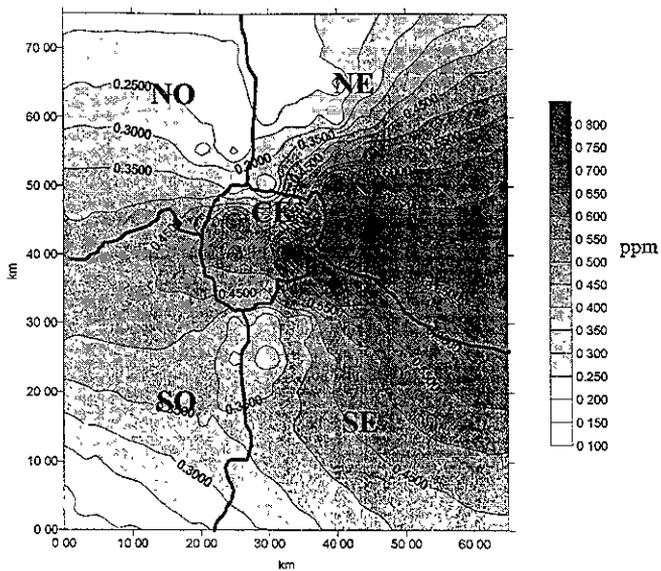


FIGURA 5.19 CONCENTRACIÓN INICIAL DE RH CASO 3



CONCENTRACIÓN DE OZONO O_3 CASO 3

FIGURA 5.20A

9:00 HRS

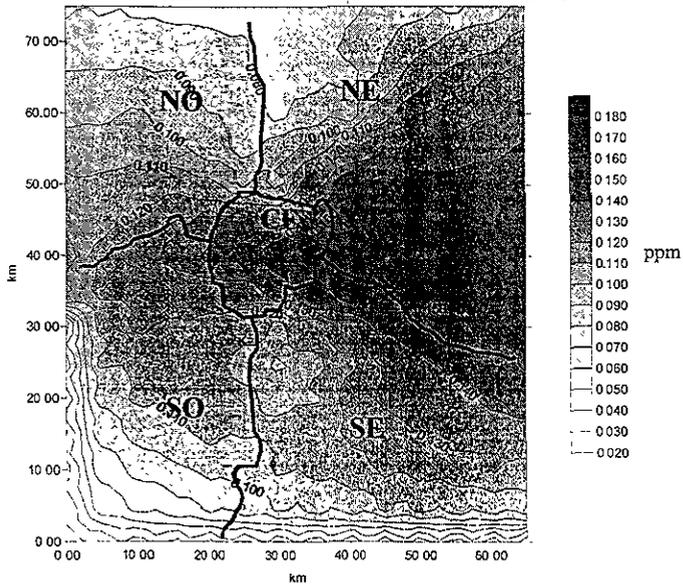
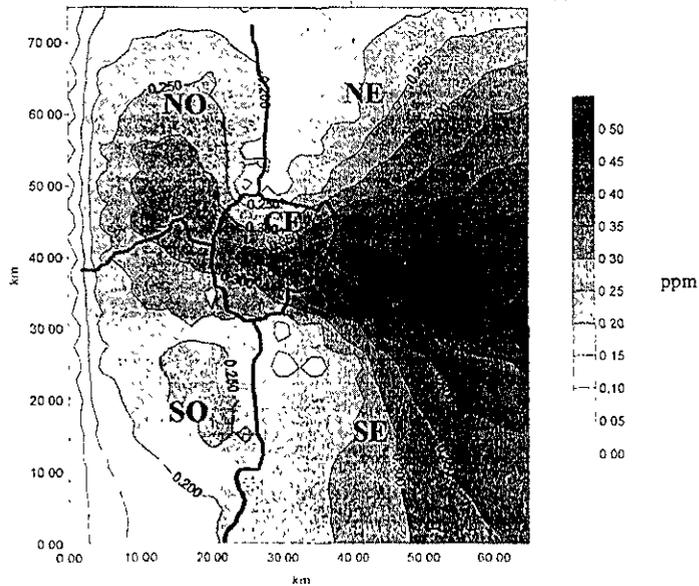


FIGURA 5.20B

12:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE OZONO O_3
CASO 3

FIGURA 5.20C

15:00 HRS

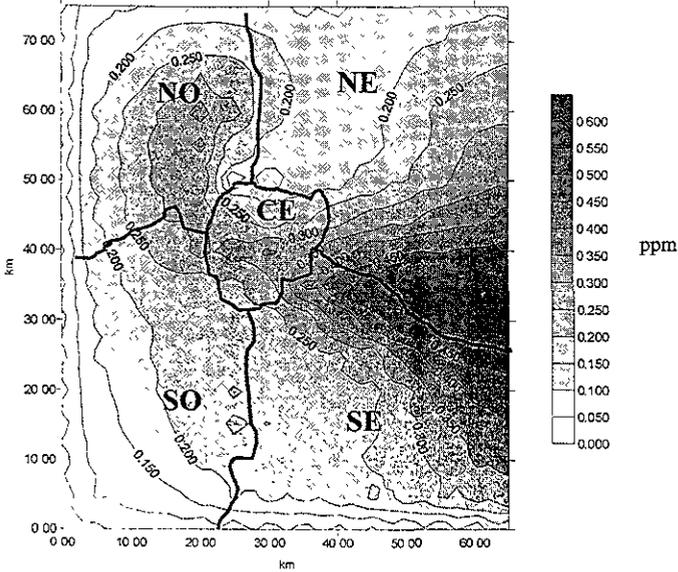
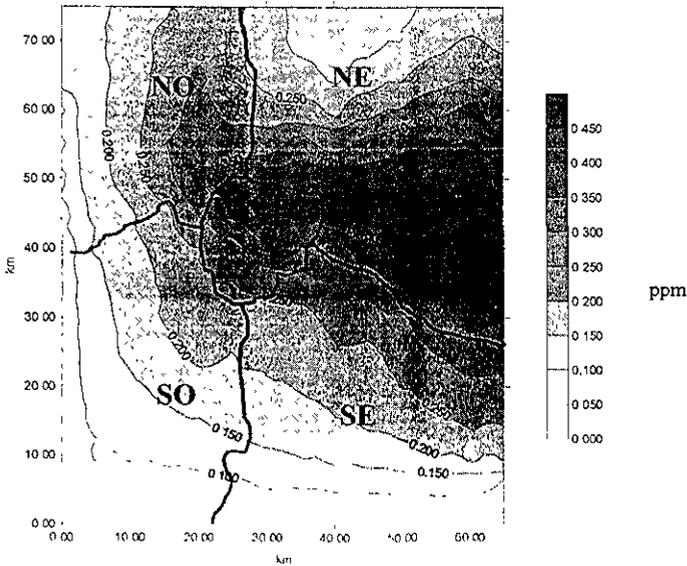


FIGURA 5.20D

18:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO
CASO 3

FIGURA 5.21A

9:00 HRS

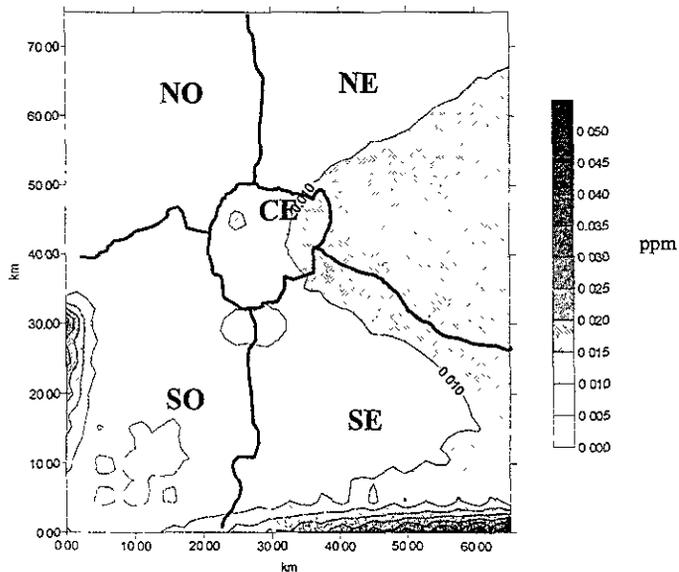
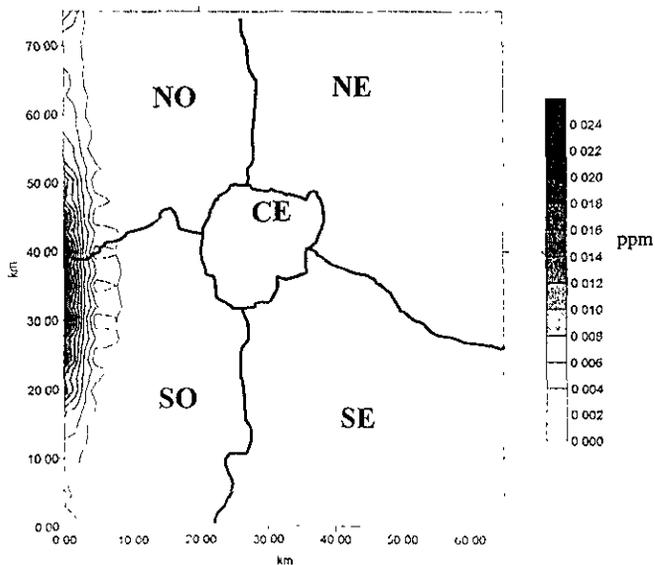


FIGURA 5.21B

12:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO
CASO 3

FIGURA 5.21C

15:00 HRS

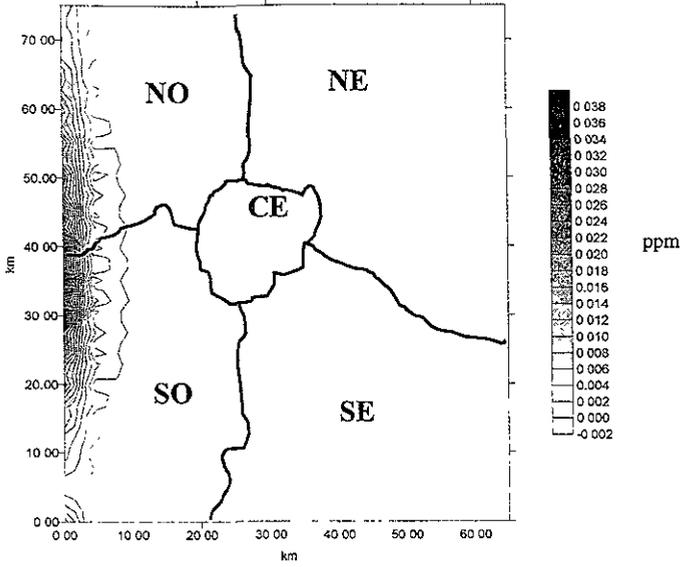
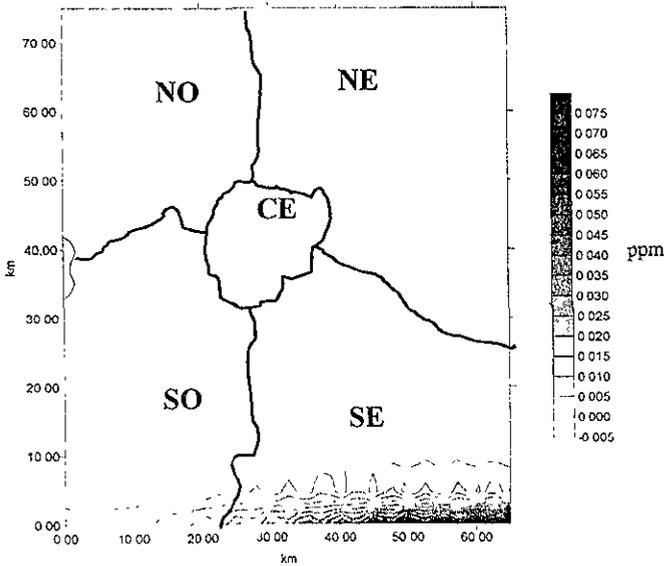
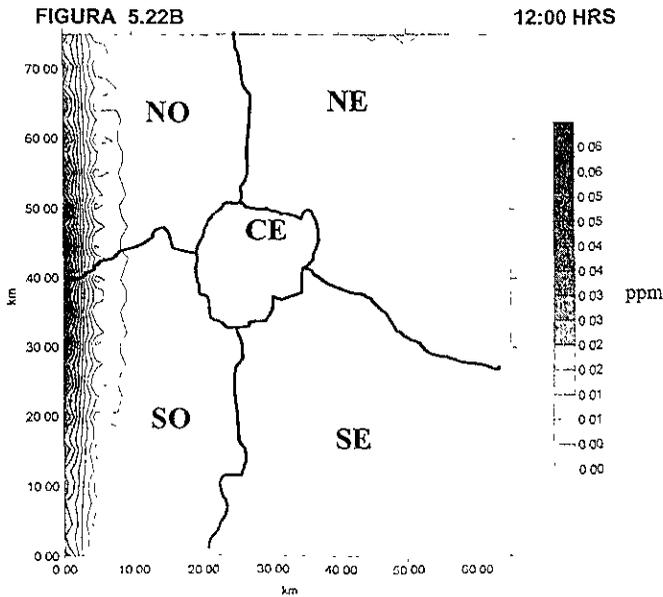
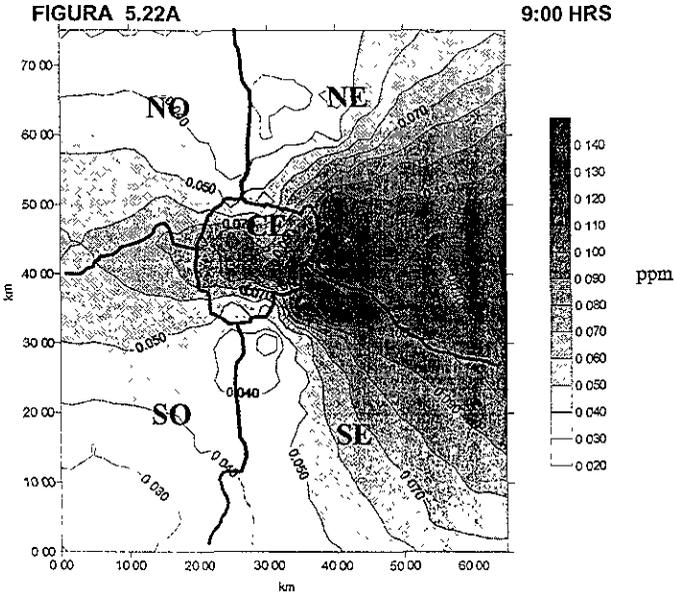


FIGURA 5.21D

18:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO_2
CASO 3



CONCENTRACIÓN DE NO_2
CASO 3

FIGURA 5.22C

15:00 HRS

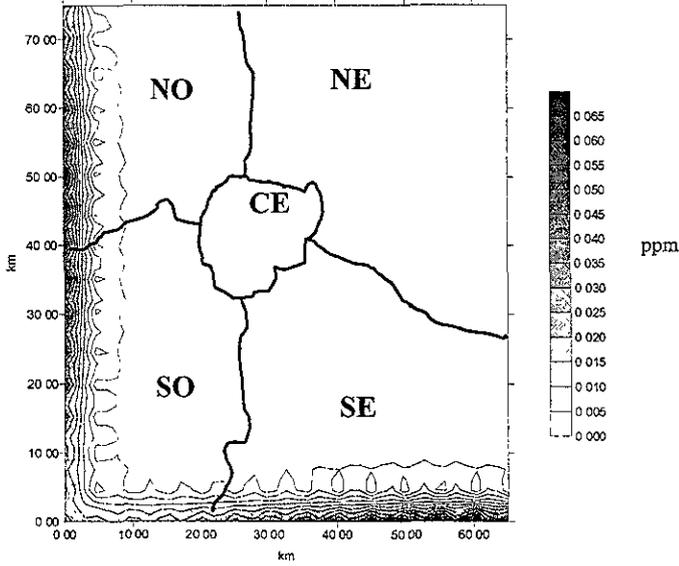
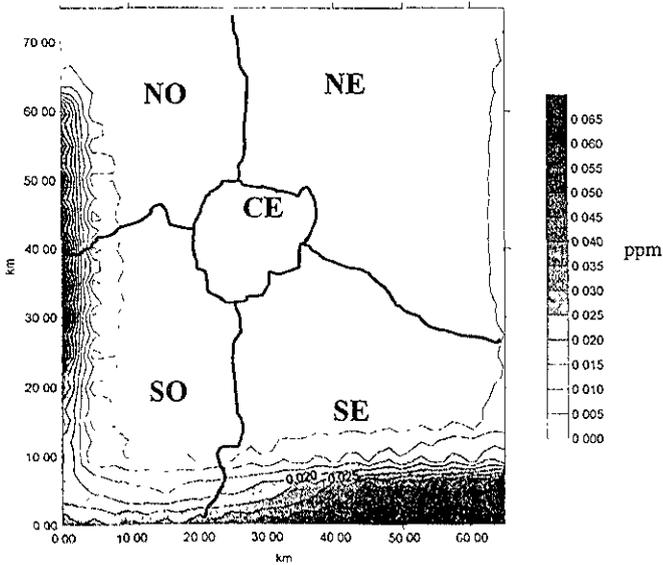


FIGURA 5.22D

18:00 HRS



5.3. Resultados en casos con intensidad de luz constante.

En esta sección se presentan los resultados que se obtuvieron del modelo "SIMCONT" al proporcionarle las mismas condiciones que se dieron en el caso 2 del subcapítulo 5.2.2, con las mismas condiciones iniciales y la misma relación de VOC's/NO_x=1.66, pero en este caso con intensidad de luz constante.

Las constantes de velocidad de las reacciones, que usamos aquí son valores promedio reportados por Seinfeld, (1986). Mostrados en la Tabla 1.1 del capítulo 1.

Se elige el caso 2 por ser la concentración media de VOC's con la que ensayamos en los casos anteriores, con el objetivo de observar la importancia que tiene el cambio de intensidad de luz solar, durante el día, en la velocidad de las reacciones fotoquímicas.

Los resultados obtenidos, muestran la evolución de los contaminantes O₃, NO, NO₂ para las 9:00 a las 18:00 horas (Ver las Figuras 5.23 a 5.25).

El análisis que efectuamos con estas condiciones son las siguientes:

A las 9:00 hrs observamos un pequeño decremento de ozono en las zonas en donde existen precursores de NO y un incremento de concentración de ozono en los lugares donde tenemos muy poca concentración de NO. Lo anterior nos indica que existe un pequeño consumo de ozono para oxidación de NO y esto se valida al observar las gráficas de NO_x en donde se observa una mínima disminución en las concentraciones de NO y un aumento en las concentraciones de NO₂.

Si comparamos estas gráficas con las del caso 2 con intensidad de luz variable, observamos que a las 9:00 hrs, para el caso con intensidad solar constante, se tienen menos incrementos en las concentraciones de ozono y NO₂, con menos consumo de NO. Mientras que para el caso con intensidad de luz variable se tienen un mayor incremento en las concentraciones de Ozono y NO₃ y un mayor consumo de NO. Lo anterior nos conduce a confirmar que la intensidad de luz hace más reactiva nuestra atmósfera al disociar más rápido los VOC's permitiendo efectuar una rápida oxidación de los NO para formación de NO₂ y a su vez una disociación del NO₂ para la formación de Ozono.

En las gráficas de las 12:00 hrs observamos que existe un incremento en las concentraciones de Ozono y de NO₂, con un consumo de NO. Las mayores concentraciones de Ozono se empiezan a formar precisamente en el lugar en donde se tienen las mayores concentraciones de precursores (NO).

Si analizamos los resultados para el caso 2 con intensidad de luz variable, observa que las concentraciones de ozono y NO₂ son mucho mayores y existe un mayor consumo de NO, estos nos permite confirmar que para un caso de intensidad de luz variable es mucho más reactiva la atmósfera permitiendo una mayor concentración de ozono.

A las 15:00 hrs se siguen incrementando los niveles de ozono y de NO₂ con su respectivo consumo de NO. Los niveles máximos de ozono 0.095 ppm se localizan precisamente en los lugares en donde tenemos las mayores concentraciones de NO. Para el caso 2 con intensidad de luz variable observamos que para la misma hora (15:00hrs) se tienen concentraciones máximas de 0.650 ppm para la misma zona.

El consumo de NO a sido constante y todavía se tienen concentraciones de 0.030 ppm, mientras que para el caso de intensidad de luz variable ya no se tienen concentraciones de NO, lo que nos indica que se ha

CONCENTRACIÓN DE OZONO O_3
CASO 2 INTENSIDAD DE LUZ CTE

FIGURA 5.23A

9:00 HRS

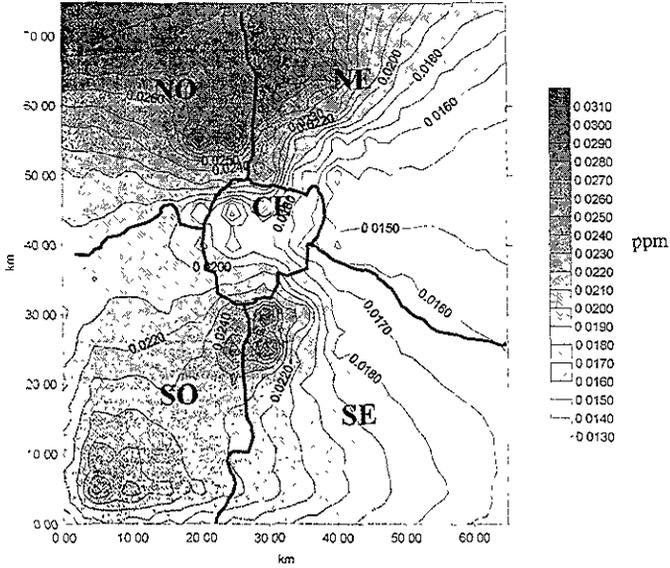
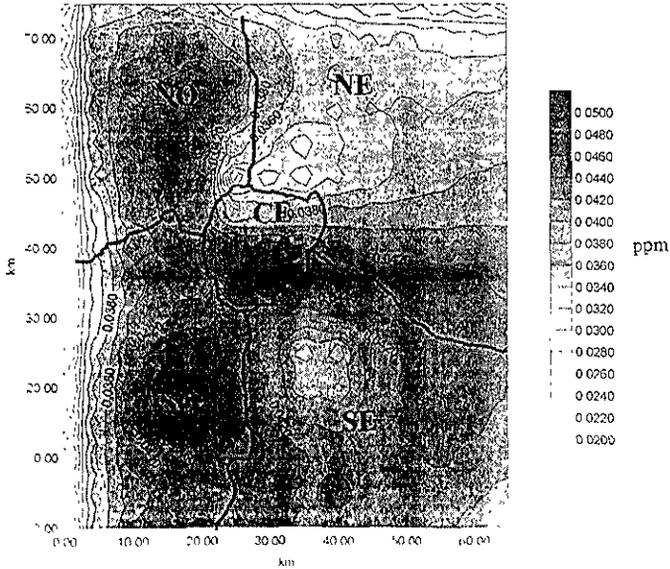


FIGURA 5.23B

12:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE OZONO O_3 CASO 2 INTENSIDAD DE LUZ CTE

FIGURA 5.23C

15:00 HRS

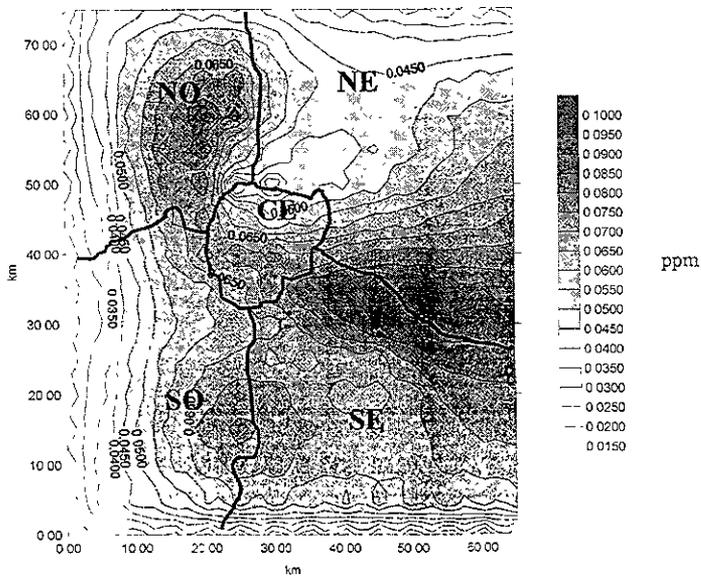
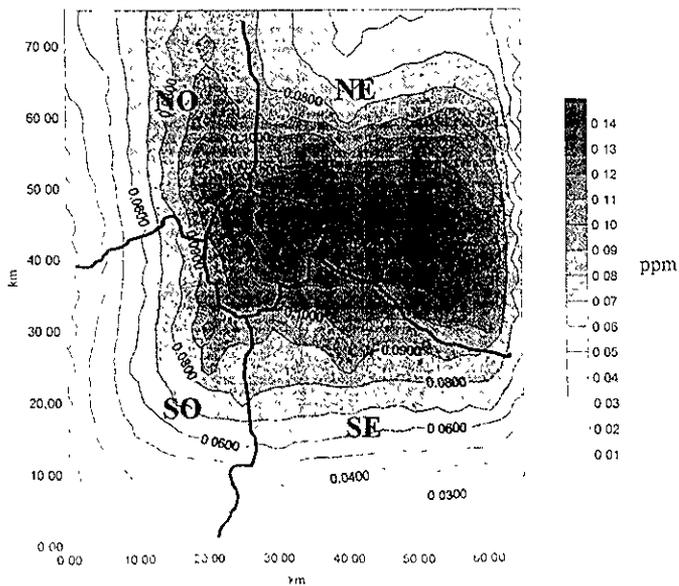


FIGURA 5.23D

18:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO
CASO 2 INTENSIDAD DE LUZ CTE

FIGURA 5.24A

9:00 HRS

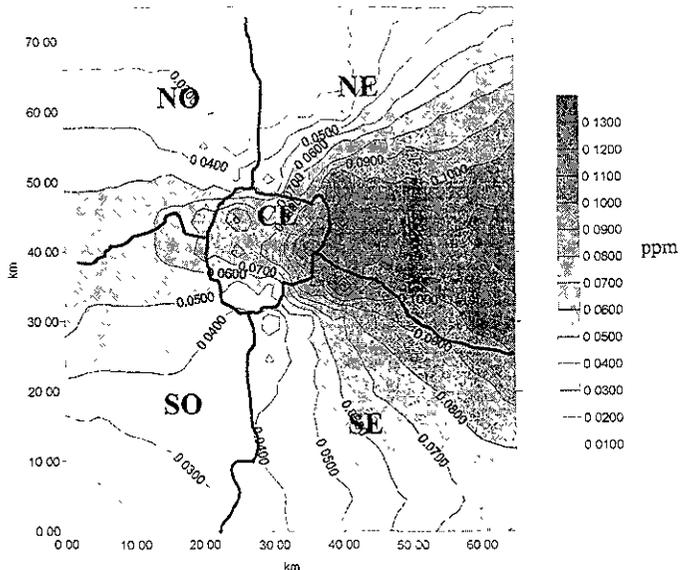
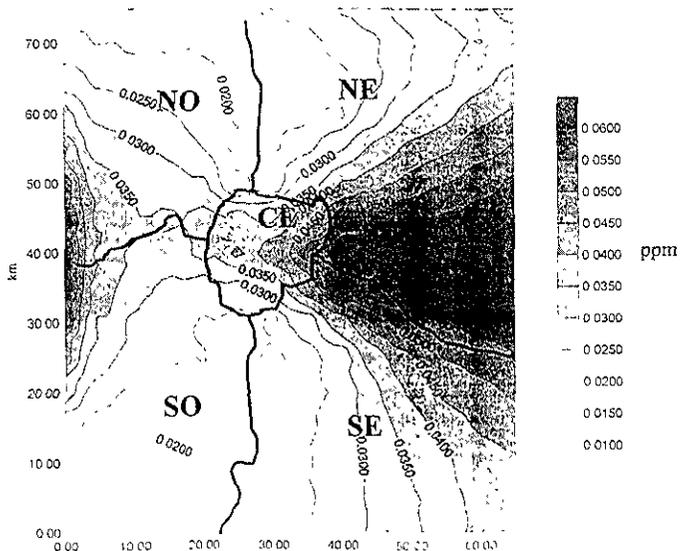


FIGURA 5.24B

12:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO
CASO 2 INTENSIDAD DE LUZ CTE

FIGURA 5.24C

15:00 HRS

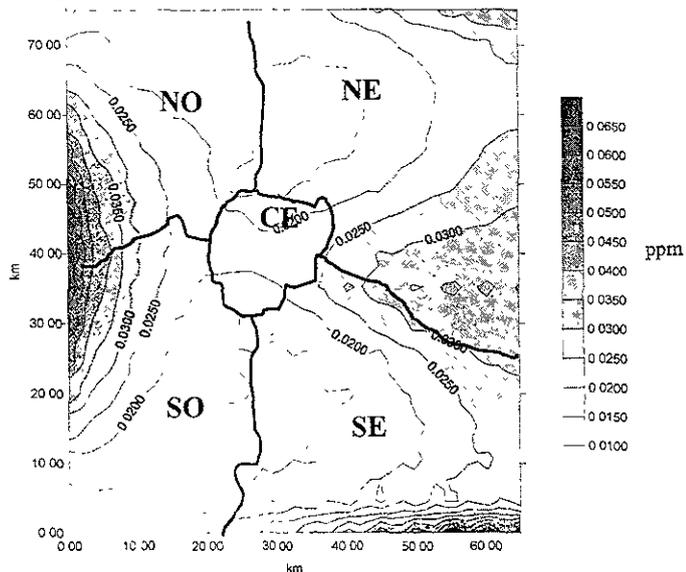
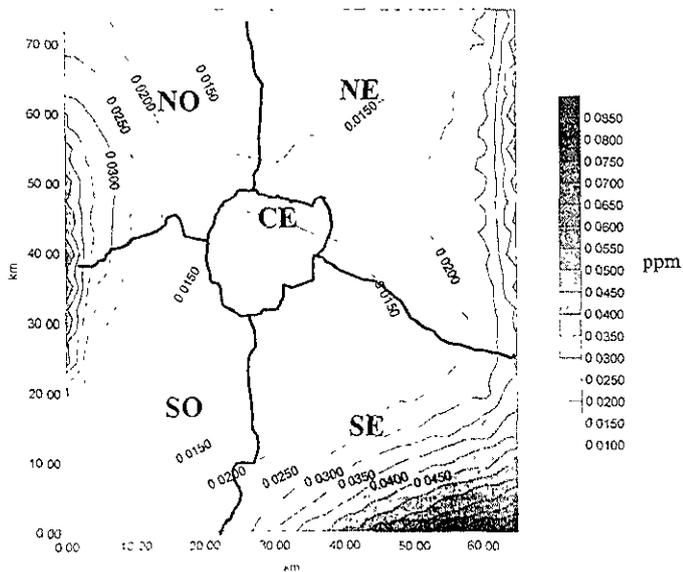


FIGURA 5.24D

18:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO_2
CASO 2 INTENSIDAD DE LUZ CTE

FIGURA 5.25A

9:00 HRS

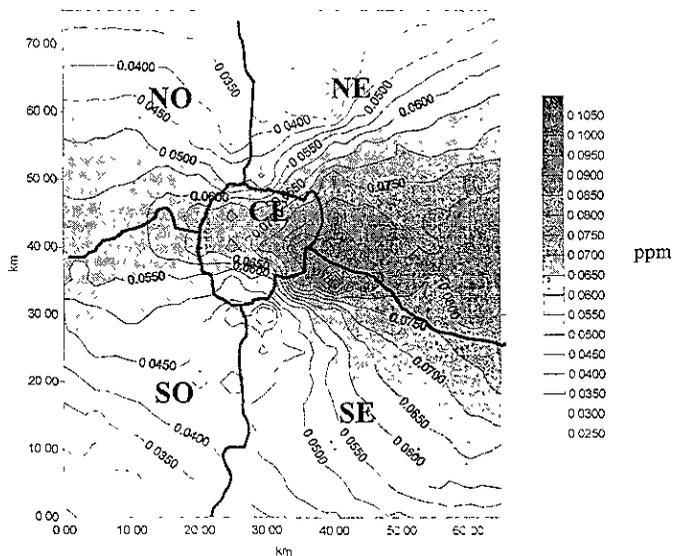
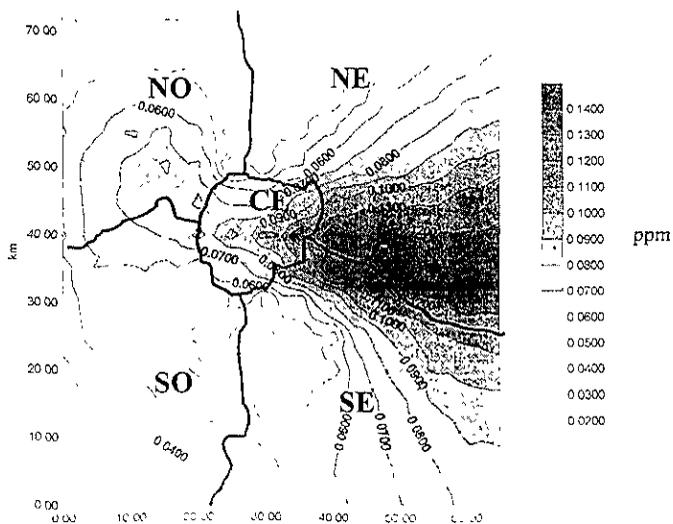


FIGURA 5.25B

12:00 HRS



CONCENTRACIÓN DE NO_2 CASO 1

FIGURA 5.25C

15:00 HRS

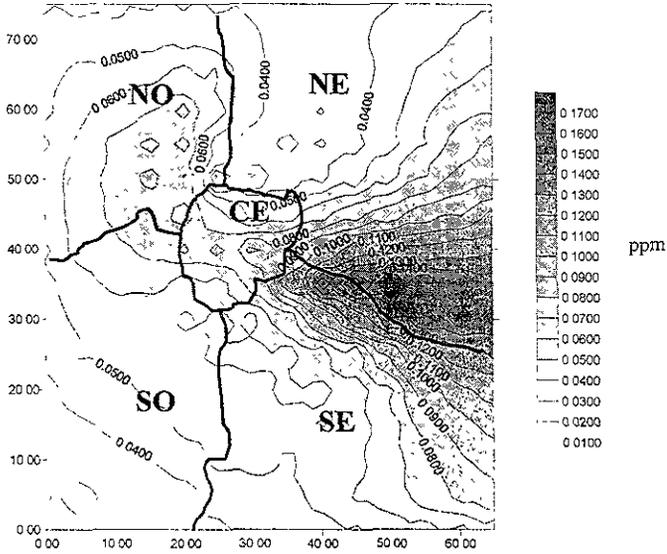
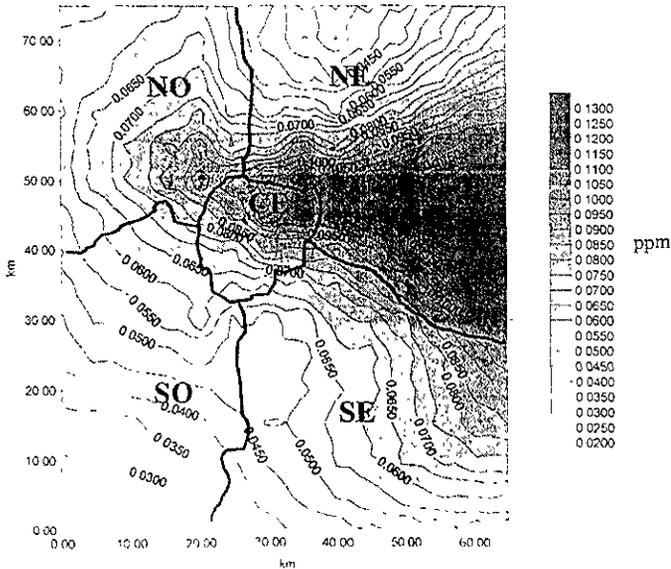


FIGURA 5.25D

18:00 HRS





**Universidad Nacional Autónoma
de México**

CONCLUSIONES

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



CONCLUSIONES:

investigar diversos modelos computacionales aplicados en problemas de contaminación ambiental y al desarrollar y ensayar la herramienta computacional "SIMCONT", en problemas de contaminación ambiental de la Cd. de México, se obtienen las siguientes conclusiones:

- En el análisis de los modelos computacionales enfocados en contaminación ambiental, se deduce lo siguiente:

En la actualidad existen una gran cantidad de modelos computacionales enfocados en los problemas de contaminación ambiental, por ejemplo existen los meteorológicos, encargados de simular los parámetros meteorológicos que afectan la dispersión de los contaminantes, así también existen los modelos Gaussianos en donde la difusión atmosférica es aproximada suponiendo que el campo de concentración dentro de una pluma mantiene una distribución horizontal o vertical. Podemos seguir mencionando una gran cantidad de modelos formulados en problemas de contaminación atmosférica, pero concluimos que la mayoría basa su estudio en la teoría del transporte de masa, energía y momentum el cual constituye el modelo básico para la dispersión o también llamado modelo de difusión Turbulenta, la cual es formulada en base a la ecuación de Difusión o de Fick.

Se determina que si bien es cierto que cualquier simulación matemática de un fenómeno tan complejo como es la difusión atmosférica no es nunca exacto, no es menos cierto que los resultados de un modelo son el instrumento más válido en la decisión de la planificación y en la adopción de medidas correctoras ya que con ellos se identifica y se disciernen aquellas zonas con mayor y menor incidencia de la contaminación atmosférica procedente de una instalación o instalaciones determinadas.

La aplicación de un modelo de difusión tiene como objeto la integración entre aquellos elementos que inciden en la calidad del aire, como son los condicionantes atmosféricos, localización de los focos e intensidad de los mismos, situación de los receptores, influencia de la topografía, orografía, etc., a fin de adecuar las medidas correctoras económicamente y técnicamente más viables.

Se deduce que los modelos de difusión atmosférica aparecen como instrumentos de gran utilidad y en muchas ocasiones como prioritarios en los programas de actuación, cuando se requiere abordar entre otros, los siguientes problemas:

En las Evaluaciones de Impacto originados por uno o varios focos de contaminación atmosférica de carácter puntual, lineal o superficial existentes o previstos.

Optimización de alturas de chimeneas para grandes y medianas instalaciones industriales.

Capacidad de carga de un centro urbano.

Planificación urbana e industrial (escala regional, local y nacional).

Diseño de redes de calidad de aire

Predicciones de Contaminación Potencial Programas de Prevención.

Se concluye que la fiabilidad de un modelo está directamente relacionada con el banco de datos iniciales que se posea

Efectuar un nuevo desarrollo para resolver un sistema rígido de ecuaciones diferenciales no lineales, con el objetivo de efectuar una valoración de los existentes y del aquí presentado.

Se propone efectuar una complementación de este modelo computacional mediante la integración de aquellos elementos que inciden en la calidad del aire, como por ejemplo la Topografía de la región en estudio. Las condiciones atmosféricas de la época del año, ser un modelo inteligente que aprenda de sucesos anteriores, etc.



**Universidad Nacional Autónoma
de México**

ANEXO 1

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



ANEXO 1 SISTEMA DE MONITOREO ATMOSFERICO DE LA ZONA METROPOLITANA DE LA CIUDAD DE MEXICO.

A.1.1 Sistema de Monitoreo Atmosférico de la Zona Metropolitana de la Ciudad de México.

El Sistema de Monitoreo Ambiental de la Zona Metropolitana de la Ciudad de México fue diseñado y se opera mediante la observación del comportamiento aerométrico de los contaminantes atmosféricos. Esto permite evaluar la calidad del aire por parcelas específicas, las cuales pueden ser definidas territorialmente de acuerdo a las condiciones meteorológicas prevaletientes.

Para lograr estos objetivos, el Sistema se compone de tres subsistemas:

Red Automática de Monitoreo Atmosférico.

Red Manual de Monitoreo Atmosférico.

Red Meteorológica.

Estos subsistemas en forma conjunta, proporcionan una amplia cobertura territorial, e identifican los tipos de contaminantes de las diferentes zonas urbano industriales. Los subsistemas se ubican de forma tal, que facilitan y cubren las necesidades para tener un conocimiento claro, preciso y continuo de la calidad del aire de la Zona Metropolitana de la Ciudad de México.

La información generada por este Sistema de Monitoreo, permite evaluar el comportamiento de los contaminantes atmosféricos. Dada la confiabilidad de los datos obtenidos, es posible definir políticas y estrategias de prevención y control de la contaminación, al igual que evaluar la eficacia de los programas implantados.

A.1.2 Red Automática de Monitoreo Atmosférico.

La Red Automática de Monitoreo Atmosférico (R.A.M.A.) está integrada por 32 estaciones de monitoreo, de las cuales 21 se localizan en el Distrito Federal y 11 en el Estado de México. Estas estaciones están distribuidas estratégicamente y cuentan con el equipo necesario para efectuar las mediciones (Figura A1.2 y Tabla A1.2)

Los equipos de medición son analizadores de parámetros de gases específicos como el ozono, óxidos de nitrógeno, monóxido y dióxido de nitrógeno, dióxido de azufre, monóxido de carbono y partículas suspendidas fracción respirable (PM-10).

Cada uno de los instrumentos de medición en las estaciones envía de manera continua la información vía módem a una computadora central, por lo que la comunicación entre el sistema central de control y el resto de la red se mantiene ininterrumpida durante las 24 hrs del día, los 365 días del año

sto demuestra la confiabilidad en la obtención de los datos y la certeza de obtener informes sobre el comportamiento de los contaminantes, de ser necesario cada minuto.

A.1.3 Red Manual de Monitoreo Atmosférico.

La Red Manual de Monitoreo Atmosférico se constituye como complemento a la información de R.A.M.A., en virtud de que su principal objetivo es el monitoreo de partículas suspendidas en el aire y los elementos contenidos en ellas.

El diseño de la Red contempla los criterios internacionales de la OMS-EPA-PNUMA, tanto para el número de estaciones como su ubicación (Figura A1.1). La frecuencia de monitoreo es de un muestreo de 24 horas cada seis días; cuenta actualmente con 19 estaciones que miden concentraciones de material sólido suspendido y cinco que miden fracción respirable de este parámetro. Ambos tipos de estaciones determinan los componentes metálicos que son capturados, así como sulfatos y nitratos.

Con esta red es posible realizar muestreos programados de otros contaminantes atmosféricos para los que no existe una tecnología de muestreo continua.

A.1.5 Red Meteorológica.

El objetivo de la Red Meteorológica es proporcionar información que tienda a evaluar la calidad del aire en condiciones normales y extraordinarias.

Esta red está constituida por diez estaciones con sensores de velocidad y dirección del viento, así como medidores de humedad relativa y temperatura, los cuales se interconectan teleméricamente al Sistema Central de Control, enviando la información en tiempo real.

Este subsistema se complementa con una unidad de medición de vientos de altura, que consiste en una torre meteorológica y dos radares acústicos. Los radares permiten obtener en forma sencilla las condiciones atmosféricas. Además se utiliza información proporcionada por el Servicio Meteorológico Nacional.

A.1.6 Unidades empleadas para el Monitoreo de la Calidad del Aire.

Partes Por Millón (PPM).

Para determinar la concentración de una sustancia química en un volumen se utilizan las partes por millón. Se divide el volumen en un millón de partes iguales. Cada millonésima parte de este volumen, correspondiente a la sustancia de nuestro interés, se considera una parte por millón de la sustancia. Las PPM se utilizan para determinar concentraciones muy pequeñas de gases en la atmósfera.

Partes Por Billón (PPB).

Para determinar la concentración de una sustancia química en un volumen se utilizan las partes por billón. Se divide el volumen en un billón de partes iguales. Cada billonésima parte de este volumen, correspondiente a la sustancia de nuestro interés, se considera una parte por billón de la sustancia. Las PPB se utilizan para determinar concentraciones muy pequeñas de gases en la atmósfera.

En la tabla A1.1 se muestran las unidades adoptadas por el sistema de monitoreo ambiental de la Zona Metropolitana de la Ciudad de México, para la medición de los contaminantes.

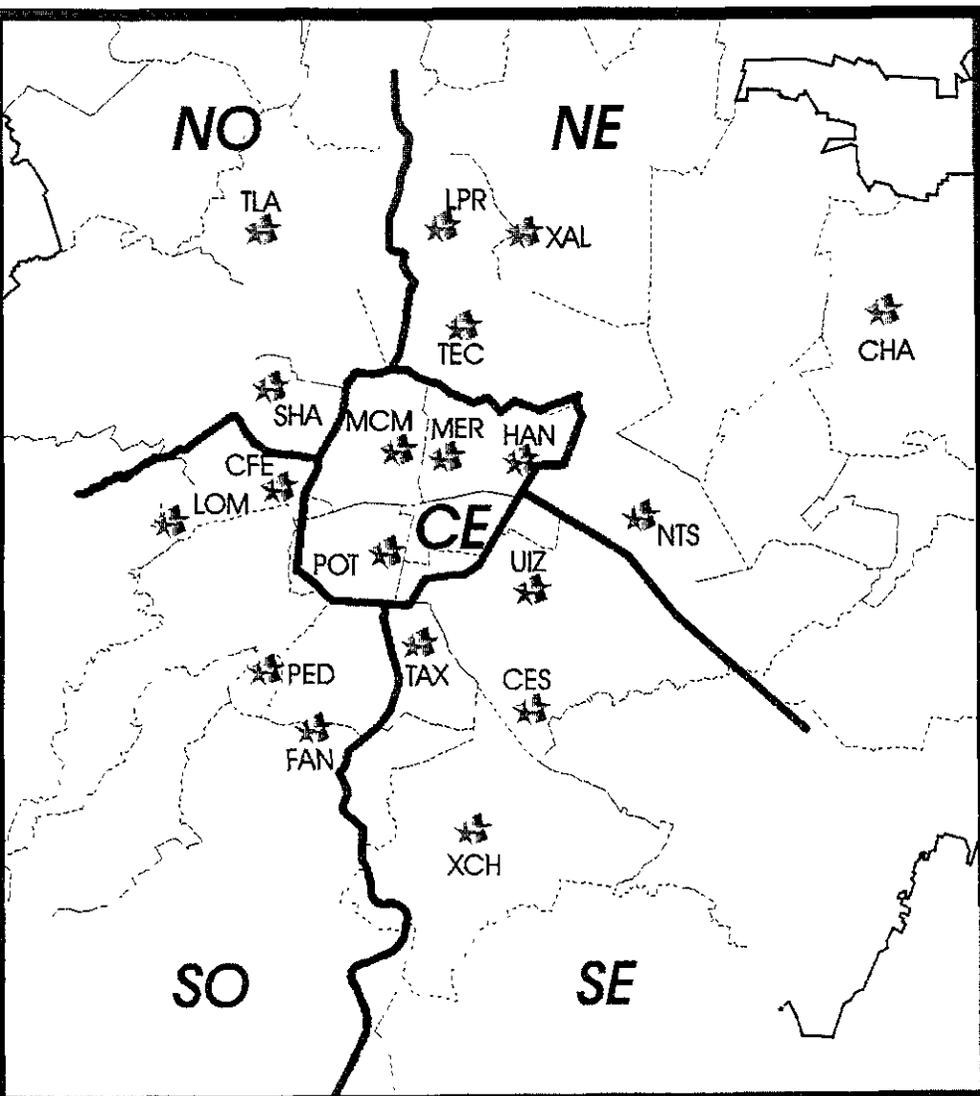
Tabla A1.1 Unidades para medición de contaminantes.

PARAMETRO	CLAVE	UNIDAD	RED
Monóxido de Carbono	CO	PPM	MONITOREO AUTOMÁTICO
Dióxido de Azufre	SO ₂	PPM	
Dióxido de Nitrógeno	NO ₂	PPM	
Ozono	O ₃	PPM	
Oxido de Nitrógeno	NO _x	PPM	
Acido sulfhídrico	H ₂ S	PPM	
Partículas menores a 10 micras	PM-10	µg/m ³	
Partículas suspendidas totales	TSP	µg/m ³	MONITOREO MANUAL
Plomo	Pb	µg/m ³	
Cobre	Cu	µg/m ³	
Hierro	Fe	µg/m ³	
Cadmio	Cd	µg/m ³	
Níquel	Ni	µg/m ³	
Temperatura	TMP	°C	MONITOREO METEOROLÓGICO
Humedad Relativa	RH	% de Hum. Rel.	
Velocidad del Viento	WSP	metros por segundo	
Dirección del Viento	WDR	grados	

A.1.7. Localización Geográfica de las estaciones Manuales y Automaticas de Monitoreo Atmosférico.

Las estaciones de monitoreo de contaminantes empleadas por el sistema de monitoreo atmosférico de la Zona metropolitana de la Ciudad de México, se encuentran distribuidas estratégicamente así y como se muestran en las Figuras A1.1 y A1.2.

Figura A1.1 Localización geográfica de las estaciones de la Red Manual de Monitoreo Atmosférico.



En la tabla A1.2 se muestra la descripción y ubicación de las estaciones de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico.

Figura A1.2 Localización geográfica de las estaciones de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico.

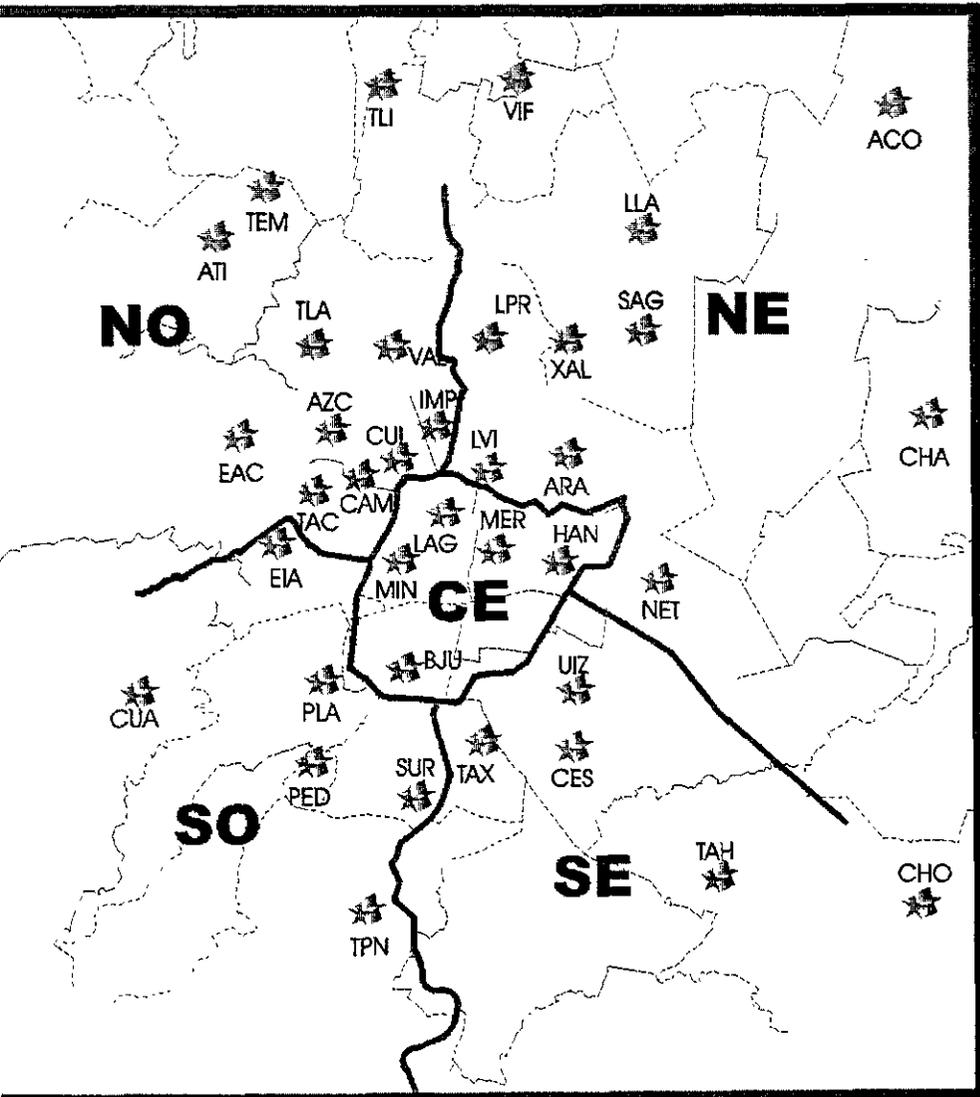


Tabla A1.2 Estaciones de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico.

Zona	Estación	Número	Abreviación	Delegación o Municipio
Noroeste	ITESM Campus Edo. Mex.	33	TEC	Atzapán de Zaragoza, Edo. Mex.
	Azacapotzalco	10	AZC	Del. Azcapotzalco
	Cuittáhuac	25	CUI	Del. Azcapotzalco
	Instituto Mexicano del Petróleo	21	IMP	Del. Gustavo A. Madero
	Tacuba	4	TAC	Del. Miguel Hidalgo
	Vallejo	2	VAL	Del. Gustavo A. Madero
	Atzapán	27	ATI	Atzapán de Zaragoza, Edo. Mex.
	ENEP-Acatlán	5	EAC	Naucalpan, Edo. Mex.
	Tlalnepantla	11	TLA	Tlalnepantla, Edo. Mex.
	Tultitlán	26	TLI	Tultitlán, Edo. Mex.

CONTINUACIÓN DE LA TABLA A1.2.

Zona	Estación	Número	Abreviación	Delegación o Municipio
Noreste	Aragón	19	ARA	Del. Gustavo A. Madero
	La Villa	8	LVI	Del. Gustavo A. Madero
	Chapingo	31	CHA	Texcoco, Edo. Mex.
	La Presa	7	LPR	Tlalnepantla, Edo. Mex.
	Laureles	6	LLA	Ecatepec de Morelos, Edo. Mex.
	Nezahualcóyotl	20	NET	Cd. Nezahualcóyotl, Edo. Mex.
	San Agustín	9	SAG	Ecatepec, Edo. Mex.
	Villa de las Flores	28	VFI	Coacalco, Edo. Mex
	Xalostoc	12	XAL	Ecatepec, Edo. Mex.

CONTINUACIÓN DE LA TABLA A1.2.

Zona	Estación	Número	Abreviación	Delegación o Municipio
Centro	Benito Juárez	22	BJU	Del. Benito Juárez
	Hangares	17	HAN	Del. Venustiano Carranza
	Insurgentes	24	MIN	Del. Cuauhtémoc
	Lagunilla	1	LAG	Del. Cuauhtémoc
	Merced	13	MER	Del. Venustiano Carranza
Suroeste	Cuajimalpa	29	CUA	Del. Cuajimalpa
	Pedregal	14	PED	Del. Alvaro Obregón
	Plateros	16	PLA	Del. Alvaro Obregón
	Santa Ursula	3	SUR	Del. Coyoacán
	Tlalpan	30	TPN	Del. Tlalpan
Sureste	Cerro de la Estrella	15	CES	Del. Iztapalapa
	Taxqueña	23	TAX	Del. Coyoacán
	Tlahuac	32	TAH	Del. Tlahuac
	UAMI	18	UIZ	Del. Iztapalapa

A.1.8. Índice Metropolitano de Calidad del Aire (IMECA).

El efecto de informar a la población de una manera sencilla y clara la calidad del aire en una ciudad, registrada por una red automática de monitoreo atmosférico, se ha definido el Índice Metropolitano de la Calidad del Aire (IMECA).

El índice de calidad del aire se puede definir como una función que transforma la concentración de un contaminante a un valor simple, representativo de la calidad del aire de una región determinada.

El valor IMECA se obtiene por medio de dos procedimientos; el primero marca el establecimiento del IMECA horario, que permite conocer la calidad del aire cada hora del día, durante las 24:00 hrs. El segundo procedimiento indica la forma de combinar los valores IMECA horario para la obtención de un índice del día, que se conoce como IMECA diario.

El primero involucra la utilización de funciones segmentadas basadas en dos puntos de quiebra principales. Estos puntos fueron obtenidos a partir de los criterios mexicanos de la calidad del aire, así como de niveles para los que ocurren daños significativos a la salud. Al primero se le asignó el valor de 100 y al segundo el de 500; entre estos dos puntos se definieron tres más, cuyo objetivo es clasificar el intervalo en diferentes términos descriptivos de la calidad del aire (Tabla A1.3).

La función principal del IMECA es mantener informada a la población sobre la calidad del aire en la Ciudad de México, así como observar el comportamiento de los distintos contaminantes y comparar la calidad del aire entre zonas que utilicen índices similares.

Tabla A1.3 Índice Metropolitano de Calidad del Aire (IMECA).

IMECA	CALIDAD DEL AIRE	EFFECTOS
0-100	Satisfactoria	Situación favorable para la realización de todo tipo de actividades
101-200	No Satisfactoria	Aumento de molestias menores en personas sensibles
201-300	Malas	Aumento de molestias e intolerancia relativa al ejercicio en personas con padecimientos respiratorios
301-500	Muy mala	Aparición de diversos síntomas e intolerancia al ejercicio en la población

IMECA	Satisfactorio 0 - 100	No Satisfactorio 150 - 200	Malas 200 - 300
-------	-----------------------	----------------------------	-----------------



**Universidad Nacional Autónoma
de México**

ANEXO 2

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



ANEXO 2 PRINCIPALES CONTAMINANTES DEL AIRE.

En una atmósfera contaminada, podemos encontrar una gran cantidad de contaminantes, algunos serán mezcla de dos o más contaminantes y otros serán precursores o contaminantes puros. De todos estos contaminantes solo se mencionan aquellos que se encuentran en mayor cantidad y los que son poco reactivos de tal manera que pueden ser medidas sus concentraciones en la atmósfera.

A.2.1 El ozono.

El ozono es un gas compuesto de 3 átomos de oxígeno, se denomina oxidante y produce efectos tóxicos porque fácilmente quita electrones a otras moléculas, iniciando con esto reacciones en cadena y perturbando estructuras vitales en las células.

Es un gas inodoro e incoloro, ocurre tanto en la atmósfera superior de la tierra como al nivel del suelo. El ozono puede ser bueno o malo, dependiendo de dónde se encuentra.

Ozono bueno. Este ozono ocurre naturalmente en la atmósfera superior de la tierra—10 a 30 millas por encima de la superficie de la tierra—donde forma una capa protectora que nos defiende de los dañinos rayos ultravioleta del sol. Este ozono "bueno" está siendo destruido gradualmente por las sustancias químicas producidas por el hombre. Las regiones donde el ozono ha sido destruido más significativamente—por ejemplo, sobre los polos norte o sur—se conocen como "agujeros en la capa de ozono".

Ozono malo. Este ozono se forma en la atmósfera inferior de la tierra, cerca del nivel del suelo, cuando los contaminantes emitidos por automóviles, plantas generadoras de energía, calderas industriales, refinarias, plantas químicas, y otras fuentes, reaccionan químicamente en la presencia de la luz solar.

El ozono al nivel del suelo se forma por medio de una reacción química entre los compuestos orgánicos volátiles (COV) y los óxidos de nitrógeno en presencia de la luz solar. Las fuentes de COV y de óxidos de nitrógeno incluyen:

Las concentraciones de ozono pueden alcanzar niveles dañinos a la salud cuando el clima está caliente y oleado con vientos relativamente ligeros.

Los criterios para evaluar la calidad del aire en ozono es permitido un promedio horario máximo de $216 \mu\text{g}/\text{m}^3$ o 11 partes por millón (ppm).

Los científicos han estado estudiando los efectos del ozono en la salud por muchos años. Hasta ahora, han encontrado que el ozono puede causar varios tipos de efectos en los pulmones (Quadri, G. Sanchez, 1994).

A.2.2 Partículas Suspendidas Totales (PST).

Es un término general empleado para describir una variedad de sustancias que existen como partículas diferenciadas, ya sea como minúsculas gotas de líquido o materia sólida. La materia particulada puede

Incluir materiales cancerígenos como asbesto y humo de tabaco, porque casi siempre empeoran los efectos de los contaminantes gaseosos.

El material particulado se puede clasificar de acuerdo a su tamaño como finos (menores de 2.5 micras) y particulado grande; el material fino puede permanecer en el aire durante semanas y meses pudiendo viajar grandes distancias desde sus orígenes. El material fino por lo general es emitido por la combustión, el material grande se emite de construcciones, incendios naturales y polvo del viento.

Entre las partículas suspendidas que representan un mayor interés se encuentran las *partículas menores a 10 micrómetros (PM 10)*, debido a su tamaño, estas se sedimentan a una velocidad tan lenta que pueden ser inhaladas, lo cual incrementa el potencial tóxico y/o patógeno de sus componentes. Recientemente las PM 10 se adoptaron en estados unidos como parámetros de evaluación y regulación de la calidad del aire en sustitución de las PST

Entre los trastornos a la salud que provoca el material particulado se incluye la agudización de bronquitis en niños y adultos con males respiratorios. Son un factor de aceleración en personas que padecen enfermedades en las vías respiratorias. Las exposiciones a largo plazo pueden producir daños en los tejidos pulmonares que contribuyen a enfermedades respiratorias crónicas, cáncer y muertes prematuras. Los niños sufren más resfríos y tos.

Las partículas deterioran edificios, monumentos, textiles, reducen la visibilidad y dañan estructuras y materiales. El material particulado también altera el clima porque impide el paso de la luz solar.

El criterio para evaluar la calidad del aire en Partículas Suspendidas permisibles es de $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (microgramos sobre metro cúbico) en un promedio de 24 horas [Quadri, G. Sanchez, (1994)].

A.2.3 Plomo.

Provoca alteraciones graves a la salud a muy bajas concentraciones, incluyendo daños cerebrales irreversibles y daños a los sistemas que forman la sangre. Su fuente de generación principal es la gasolina denominada "Nova", ya que utiliza plomo como aditivo antidetonante; otras fuentes de emisión lo constituyen las fundidoras que utilizan o reprocessan materiales metálicos.

El plomo es un metal suave, color gris blancuzco, poco soluble en agua; se comporta en el organismo como el calcio, acumulándose en los huesos, se puede metabolizar y entrar al torrente sanguíneo donde eleva sus niveles en la sangre. El ser humano adquiere las concentraciones de plomo principalmente por el consumo de alimentos (60%), la inhalación del aire (30%) y el agua (10%) [Quadri, G. Sanchez, (1994)].

A.2.4 Óxidos de Nitrógeno (NO_x).

Los óxidos de nitrógeno se forman durante los procesos de combustión y en las reacciones químicas atmosféricas subsiguientes; estos contaminantes son los precursores en la formación del ozono. El NO_2 al combinarse con el agua de la niebla forma lluvia ácida.

El NO_2 es un gas amarillo pardusco que da al smog su característico color café; es producido por la reacción fotoquímica de óxido nítrico (NO) en el aire. Este último es emitido durante la combustión. El NO_2 es también un oxidante, teniendo la capacidad de quitar electrones a otras moléculas.

El NO_2 es un fuerte irritante pulmonar que daña las células que revisten los pulmones, no produce síntomas a menos que se trate de concentraciones muy altas; el mayor daño aparece de 5 a 72 horas después de la exposición causando edema pulmonar. Los niños que habitan casas con calefacción presentan infecciones respiratorias (resfriados comunes). Algunos de los síntomas son: descarga nasal, dolor de cabeza, mareo y dificultad al respirar [Quadri, G. Sanchez, (1994)].

A.2.5 Monóxido de carbono.

El monóxido de carbono (CO) es un gas venenoso que emiten los escapes de los automóviles y otras fuentes de combustión; el tabaquismo y el tráfico denso representan las exposiciones más importantes a este gas en la población en general.

Es el más abundante y más distribuido de todos los contaminantes del aire, representa un subproducto de la combustión incompleta. Idealmente, los únicos productos finales de una combustión completa de combustibles fósiles son el dióxido de carbono (CO_2) y el agua (H_2O).

El CO es un gas no irritante, incoloro, insípido y casi inodoro que se produce por reacciones incompletas. Este contaminante priva al cuerpo del oxígeno al inhalarlo, se une con facilidad a la hemoglobina de la sangre y desplaza al oxígeno del sitio de enlace, entorpece la liberación de oxígeno en los tejidos y produce lo carboxihemoglobina (COHB).

Los síntomas y efectos en la salud se manifiestan por dolor de cabeza, mareo, somnolencia y náusea, en exposición grave a altas concentraciones producen vómitos, colapsos e inclusive la muerte por paro respiratorio [Quadri, G. Sanchez, (1994)].

A.2.6 Dióxido de azufre y sulfatos.

El SO_2 es un gas incoloro, tiene un olor picante e irritante, reacciona con facilidad con los oxidantes o partículas atmosféricas, formando sulfatos y partículas de ácido sulfúrico; las principales fuentes de SO_2 son el uso de combustibles y procesamiento de minerales. El azufre es una impureza en los combustibles fósiles y en muchos minerales, su principal fuente la representan industrias y transporte público.

La exposición al SO_2 causa constricción de los conductos respiratorios y ataques asmáticos. Puede inmovilizar los cilios que revisten el aparato respiratorio superior que normalmente remueven los agentes infecciosos y otras partículas extrañas, produciendo tos, bronquitis y otras infecciones respiratorias. El SO_2 se combina con partículas que pueden alojarse en los pulmones.

El SO_2 produce daños directos en la vegetación, causando decoloración y lesiones en el follaje, ataca a líquenes, musgos y retoños de árboles. El daño más grave se presenta al transformarse el SO_2 en lluvia ácida, algunos de estos efectos los presentan ríos y lagos.

El SO_2 corroe el acero de construcciones, degrada el zinc, deteriora el concreto y piedra caliza, papel, cuero, monumentos históricos y algunos textiles [Quadri, G. Sanchez, (1994)].

A.2.7 Hidrocarburos.

Los hidrocarburos gaseosos participan en las reacciones fotoquímicas de oxidación, pudiendo oxidarse ellos mismos, generando ácidos, éteres, cetonas y aldehídos. Todos estos compuestos, especialmente las alifáticas, participan en el smog fotoquímico, produciendo contaminantes secundarios, tales como los nitratos de peroxiacetilo (PAN's) y otras sustancias que tienen acciones de tipo irritativo respiratorio y capacidad de "estronante"

Los hidrocarburos son compuestos orgánicos que contienen carbono e hidrógeno en estado gaseoso. Se pueden combinar en presencia de la luz solar con óxidos de nitrógeno y participan en la formación del smog fotoquímico.

Los hidrocarburos se generan principalmente en la combustión incompleta de combustibles y otras sustancias que contienen carbono. Procesamiento, distribución y uso de compuestos derivados del petróleo, tales como la gasolina y los solventes orgánicos. Incendios, reacciones químicas en la atmósfera, y descomposición bacteriana de la materia orgánica en ausencia del oxígeno.

Los efectos principales en la salud originan trastornos en el sistema respiratorio y algunos hidrocarburos provocan el cáncer [Quadri, G. Sanchez, (1994)]



**Universidad Nacional Autónoma
de México**

ANEXO 3

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



ANEXO 3 DATOS INICIALES USADOS EN EL PROGRAMA SIMCONT.

ESTACIÓN	UTM _x	UTM _y	[O ₃] ppm	[NO] ppm	[NO ₂] ppm	T °C
LAG	35810	39780	0.018	—	—	
TAC	28660	41020	0.016	0.101	0.054	10.53
EAC	24540	43990	0.022	0.171	0.051	8.58
SAG	45800	50030	0.025	0.136	0.045	9.59
AZC	29157	44806	0.024	—	—	
TLA	28521	49233	0.017	0	0.045	
XAL	42000	49090	0.023	0.251	0.052	12.15
MER	37475	37620	0.02	0.292	0.092	12.69
PED	28553	26673	0.027	0.013	0.041	11.51
CES	42150	27800	0.017	0.091	0.039	10.98
PLA	28950	31340	0.018	0	0	10.52
HANG	41200	37370	0.021	0.143	0.067	11.43
UIZ	42520	30760	0.025	—	—	
BJU	33260	31870	0.02	0	0.056	
TAX	37100	27960	0.015	—	—	
CUA	19300	3100	0.017	—	—	
TPN	31070	18940	0.018	—	—	
CHA	61077.1	47737	0.021	—	—	
TAH	49562.2	20606	0.02	—	—	
TLI	31711.8	62477	—	0	0.029	
ATI	23440	54620	—	0	0.048	
VIF	39516.6	62932	—	0	0.026	



**Universidad Nacional Autónoma
de México**

ANEXO 4

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



ANEXO 4 METODOS NUMERICOS

A.4.1 SOLUCION NUMERICA DEL PROBLEMA CON CONDICIONES INICIALES.

Dado el problema de valor inicial,

$$\frac{\partial y}{\partial t} = f(x, y),$$

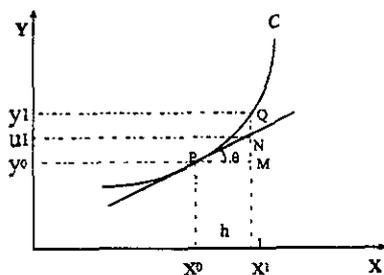
$$y(x_0) = y_0.$$

denotemos por u_1, u_2, u_3, \dots a los valores aproximados de y . Es decir, sea u_n el valor aproximado de y en $x_n = x_0 + n_h$, $n = 1, 2, 3, \dots$. De acuerdo con la condición inicial $u_0 = y_0$. Para comenzar los cálculos, necesitamos un método que utilice solamente el valor u_0 para obtener el valor u_1 .

El método de Euler explícito, es muy sencillo y nos permite obtener el valor de u_1 utilizando únicamente el valor de u_0 .

Consideremos la Figura A4.1 La gráfica de la solución exacta y , es una curva C en el plano xy . Sea P el punto inicial (x_0, y_0) y T la tangente a C en el punto P . Sea Q el punto en que la recta $x \approx x_1$ corta a la curva C y sea N el punto en que esta recta corta a la tangente T . El valor exacto de y en x_1 es y_1 , y está representado por el segmento PQ . El valor aproximado de y en x_1 es u_1 y está representado por el segmento PN . El error al aproximar el valor exacto de y en x_1 por u_1 está entonces representado por el segmento NQ . Podemos notar en la figura que si h es suficientemente pequeño, el error NQ será pequeño también y la aproximación será buena.

Figura A4.1



Entonces tenemos:

Si $y_0 = u_0$, entonces podemos decir que

$$\operatorname{tg}\theta = \frac{u_1 - u_0}{h} \approx f(x_0, u_0);$$

de donde

$$u_1 = u_0 + hf(x_0, u_0).$$

Entonces para calcular u_1 , necesitamos la condición inicial, el paso h en el eje x , y evaluar la ecuación diferencial con las condiciones iniciales.

$$u_1 = u_0 + hf(x_0, u_0).$$

$$u_2 = u_1 + hf(x_1, u_1).$$

$$u_{n+1} = u_n + hf(x_n, u_n).$$

Al método se le llama explícito, porque el nuevo valor u_{n+1} está dado en términos del valor anterior u_n .

Es evidente que el método de Euler explícito es realmente simple, pero no es muy práctico. Se puede demostrar que si el incremento h no es muy pequeño, el método es inestable; es decir, los errores en una etapa de los cálculos ocasionan errores grandes, que se incrementan conforme los cálculos se continúan.

Como ya lo hemos mencionado, la formulación explícita por diferencias finitas tienen problemas de estabilidad. Los métodos implícitos superan ambas dificultades a expensas de usar algoritmos más complicados.

Se denomina método implícito, debido a que la incógnita aparece en ambos lados de la ecuación. Se puede desarrollar una forma implícita del método de Euler al evaluar la derivada en el tiempo futuro

$$y_{i+1} = y_i + f(x_{i+1}, y_{i+1})h,$$

esto se le llama " método de Euler Hacia atrás o implícito"

A.4.2 ESQUEMA NUMERICO DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN EN UNA SOLA DIMENSION

La ecuación de difusión en una dimensión en su forma más simple, se representa por la siguiente ecuación diferencial parcial,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, t > 0.$$

Supongamos que tenemos la siguiente condición inicial:

$$c(x,0) = \varphi(x), \quad 0 \leq x \leq l,$$

y las siguientes condiciones de frontera:

$$c(0,t) = a(t), \quad t \geq 0$$

$$c(l,t) = f(t), \quad t \geq 0$$

Es decir, conocemos los valores de las concentraciones iniciales y los valores de las concentraciones en las fronteras y deseamos calcular las concentraciones en todos los nodos internos (x,t) de la malla, como se muestra en la Figura A4.2

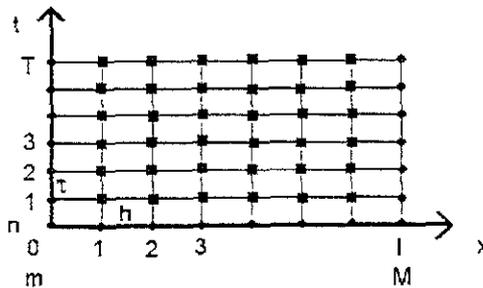


Figura A4.2 Malla del Dominio del problema

La forma de resolver la ecuación diferencial parcial por medio de un método numérico consiste en reemplazar las derivadas parciales por aproximaciones de diferencia finita, convirtiendo la ecuación diferencial en un sistema de ecuaciones algebraicas.

Definamos el valor numérico de la concentración en un nodo (x_m, t_n) de la malla como:

$$c(x, t) \rightarrow u_m^n,$$

entonces las condiciones iniciales y de frontera conocidas están dadas por:

$$u_m^0 \quad m = 0, 1, 2, \dots, l$$

$$u_0^t \quad t = 0, 1, 2, \dots, T$$

$$u_l^t \quad t = 0, 1, 2, \dots, T$$

La aproximación numérica del primer término de la ecuación de difusión es:

$$\frac{\partial c}{\partial t} \approx \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\tau}$$

Para encontrar la aproximación numérica de la segunda derivada del segundo término, sea $y=f(x)$, entonces:

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

$$\Delta \left[\frac{\Delta y}{\Delta x} \right] = \frac{f(x + 2\Delta x) - f(x + \Delta x) - f(x + \Delta x) + f(x)}{\Delta x}$$

$$\frac{\Delta \left[\frac{\Delta y}{\Delta x} \right]}{\Delta x} = \frac{f(x + 2\Delta x) - 2f(x + \Delta x) + f(x)}{\Delta x^2}$$

Cuando Δx tiende a cero, tenemos la primera y la segunda derivada. Entonces, la aproximación numérica de la segunda derivada por el método de diferencias centrales viene dada por:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \approx \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2}$$

Y la ecuación de difusión queda representada por la siguiente ecuación en diferencias finitas:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\tau} = D \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2}.$$

Entonces, tenemos:

$$u_m^{n+1} = u_m^n + \frac{\tau D}{h^2} (u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n).$$

Si definimos,

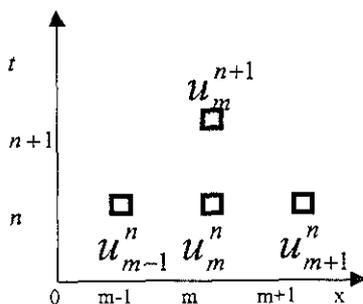
$$K = \frac{\tau D}{h^2}$$

tenemos:

$$u_m^{n+1} = u_m^n (1 - 2K) + Ku_{m+1}^n + Ku_{m-1}^n.$$

De tal manera, que para conocer el valor de u en el instante $t + \tau$, necesitamos el valor de u en tres puntos adyacentes, como se muestra en la figura A4.3. Es decir, esta ecuación nos permite calcular el valor de u en cualquier instante, con pasos discretos en x y t , si conocemos u en el instante anterior; es decir con las condiciones iniciales y de frontera podemos calcular todos los puntos de la malla.

Figura A4.3



El método es explícito, debido a que cada nuevo valor de concentración se calcula a partir de valores conocidos. El método es estable cuando los términos K y $1-2K$ son no negativos [Press *et al.*, (1991)].

Entonces se debe de cumplir.

$$1 - 2K \geq 0,$$

y

$$K \geq 0.$$

Para la primera condición se necesita que:

$$K \leq 1/2$$

Puesto que $K=0$ implica que $\tau = 0$, para la segunda condición se necesita que $K > 0$. Entonces para que el método sea estable, requerimos que:

$$0 < K \leq \frac{1}{2}.$$

Esta restricción sobre K significa en esencia que h no se puede hacer arbitrariamente pequeña sin disminuir drásticamente τ y así incrementar en gran medida la cantidad total de operaciones. Por ejemplo, si h se reduce en un factor de 10, τ debe disminuirse en un factor de 100 para que K sea la misma.

Esta limitación se elimina utilizando un método implícito. En este método, los valores de u en $t = t_1$ no se calculan solamente en función de los valores en $t = t_0$, sino que también implican otros valores de u en el mismo intervalo de tiempo.

Esto requiere que se resuelva un conjunto de ecuaciones simultáneas para cada intervalo de tiempo.

La expresión numérica de la ecuación de difusión utilizando el método implícito, viene dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0$$

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\tau} = D \frac{u_{m+1}^{n+1} - 2u_m^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}}{h^2}.$$

De donde tenemos.

$$-u_m^n = + \frac{\tau D}{h^2} (u_{m+1}^{n+1} - 2u_m^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}) - u_m^{n+1}.$$

Si definimos:

$$K = \frac{\tau D}{h^2}.$$

Entonces,

$$-u_m^n = Ku_{m+1}^{n+1} - u_m^{n+1}(1+2K) + Ku_{m-1}^{n+1}.$$

En forma análoga al método explícito, el método implícito es estable cuando los términos K y $1+2K$ son no negativos y es fácil de ver que esto se cumple para toda $K > 0$.

Mostremos el método resolviendo para la primera capa en el tiempo suponiendo $l = 4$:

Para $m=1$:

$$\begin{aligned} -u_1^0 &= Ku_2^1 - u_1^1(1+2K) + Ku_0^1 \\ -u_1^0 - Ku_0^1 &= -(1+2K)u_1^1 + Ku_2^1. \end{aligned}$$

Para $m=2$:

$$-u_2^0 = Ku_1^1 - u_2^1(1+2K) + Ku_3^1.$$

Para $m=3$:

$$-Ku_4^1 - u_3^0 = 0 + Ku_2^1 - u_3^1(1+2K),$$

donde los primeros términos de las ecuaciones están en función de los valores iniciales y de frontera conocidos.

Si estas tres ecuaciones las representamos en forma matricial, tenemos:

$$\begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(1+2k) & K & 0 \\ K & -(1+2k) & K \\ 0 & K & -(1+2k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^1 \\ u_2^1 \\ u_3^1 \end{bmatrix}.$$

Como se puede ver, el sistema de ecuaciones es tridiagonal, es decir todos los elementos de la matriz son cero a excepción de la diagonal y de las posiciones adyacentes a ella, lo cual elimina muchos cálculos.

$$\begin{bmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^i \\ u_2^i \\ u_3^i \\ u_4^i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \end{bmatrix}.$$

Para resolver este tipo de sistema, se usa el algoritmo de Thomas [Press *et al.*, (1992)], el cual se ha incorporado en el programa SIMCONT con el nombre de PROGON.

A.4.3 METODO DE CRANK-NICOLSON

El método de Crank-Nicolson proporciona un esquema implícito alterno que es de segundo orden en exactitud tanto en espacio como en tiempo [Ferziger, (1981)]. Para proporcionar esta exactitud, se desarrollan las aproximaciones por diferencias en el punto medio del incremento en el tiempo (Figura A4.4).

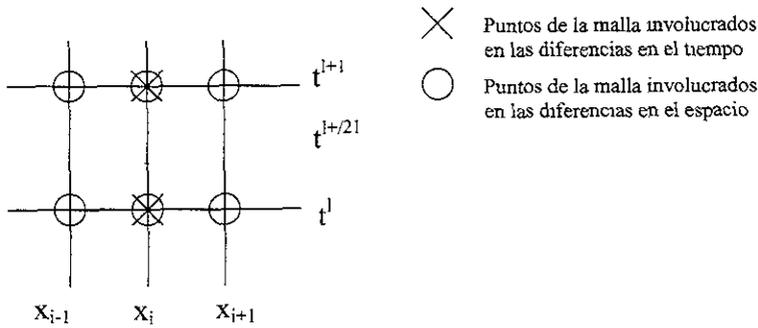


Figura A4.4 Molécula computacional para el método de Crank-Nicolson.

Para hacer esto, la primera derivada temporal puede ser aproximada en $t^{j+1/2}$ por

$$\frac{\partial c}{\partial t} \approx \frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\Delta t}$$

La segunda derivada en el espacio puede ser determinada en el punto medio al promediar las aproximaciones por diferencias al inicio t^j y al final t^{j+1} del incremento en el tiempo.

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \cong \frac{1}{2} \left[\frac{c_{i+1}^j - 2c_i^j + c_{i-1}^j}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{i+1}^{j+1} - 2c_i^{j+1} + c_{i-1}^{j+1}}{(\Delta x)^2} \right]$$

Sustituyendo las ecuaciones anteriores en la ecuación

$$\lambda \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{\partial c}{\partial t}$$

reagrupando términos, se obtiene la primer ecuación tridiagonal

$$-\lambda c_{i-1}^{j+1} + 2(1 + \lambda)c_i^{j+1} - \lambda c_{i+1}^{j+1} = \lambda c_{i-1}^j + 2(1 - \lambda)c_i^j + \lambda c_{i+1}^j$$

donde :

$$\lambda = k\Delta t / (\Delta x)^2$$

Como en el caso de la aproximación implícita simple, las condiciones de frontera son las siguientes:

$$c_0^{i+1} = f_0(t^{i+1}),$$

$$c_{m+1}^{i+1} = f_{m+1}(t^{i+1}),$$

pueden ser prescritas para deducir versiones de la ecuación para el primer y último nodo interiores.

Para el primer nodo interior

$$2(1 + \lambda)c_1^{i+1} - \lambda c_2^{i+1} = \lambda f_0(t^i) + 2(1 - \lambda)c_1^i + \lambda c_2^i + f_0(t^{i-1}),$$

obtenemos la segunda ecuación tridiagonal

Para el último nodo interior

$$-\lambda c_{m-1}^{i+1} + 2(1 + \lambda)c_m^{i+1} = \lambda f_{m+1}(t^i) + 2(1 - \lambda)c_m^i + \lambda c_{m-1}^i + \lambda f_{m+1}(t^{i+1}),$$

se obtiene una tercera ecuación tridiagonal.

Al final, obtenemos un sistema tridiagonal y por lo tanto puede resolverse de manera eficiente, por medio del algoritmo de Thomas, [Press *et al.*, (1986)].

A.4.4 ECUACIONES PARABOLICAS EN DOS DIMENSIONES ESPACIALES.

Las ecuaciones parabólicas determinan como una incógnita varía tanto en espacio como en el tiempo. Por ejemplo, la ecuación de difusión se manifiesta por la presencia de las derivadas espacial y temporal.

La ecuación de difusión se puede aplicar a más de una dimensión espacial. Por ejemplo, para dos dimensiones su forma es:

$$k \left[\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right] = \frac{\partial c}{\partial t}$$

Una aplicación de esta ecuación es modelar la dispersión de contaminantes conforme cambia el tiempo.

Se puede aplicar el método explícito en la ecuación anterior, sin embargo como en el caso unidimensional, esta aproximación está limitada por un criterio de estabilidad restringido. Para el caso de dos dimensiones el criterio será

$$\Delta t \leq \frac{1}{8} \frac{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}{k}$$

Supongamos una malla uniforme donde $dx=dy$, entonces el valor de

$$\lambda = k\Delta t / (\Delta x)^2;$$

debe ser menor o igual a $1/4$. En consecuencia, dividir a la mitad del tamaño del paso cuadruplica el número de nodos y multiplica por 16 el esfuerzo computacional [Steven C. Chapra, Raymond P., (1999)].

Como en el caso de los sistemas unidimensionales, las técnicas implícitas ofrecen alternativas que garantizan estabilidad. Sin embargo, la aplicación directa de los métodos implícitos tal como las técnicas del método de Crank Nicolson, nos lleva a la solución de $m \times n$ ecuaciones simultáneas. Además, cuando están escritas para dos o tres dimensiones espaciales, estas ecuaciones pierden la valiosa propiedad de ser tridiagonales. De esta manera, el almacenamiento de la matriz y el tiempo de cálculos pueden resultar muy grandes. El método que a continuación se describe ofrece una manera de resolver esta disyuntiva .

A.4.5 Esquema implícito de dirección alterna o esquema IDA

Proporciona el medio para resolver ecuaciones parabólicas en dos dimensiones espaciales que usan matrices tridiagonales.

Cada incremento de tiempo es ejecutado en dos pasos (Ver Figura A4.5).

Para el primer paso la ecuación

$$\frac{\partial c}{\partial t} = k \left[\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right] \dots\dots\dots(i),$$

es aproximada por

$$\frac{T_{i,j}^{t+\Delta t/2} - T_{i,j}^t}{\Delta t / 2} = k \left[\frac{T_{i+1,j}^t - 2T_{i,j}^t + T_{i-1,j}^t}{(\Delta x)^2} + \frac{T_{i,j+1}^{t+\Delta t/2} - 2T_{i,j}^{t+\Delta t/2} + T_{i,j-1}^{t+\Delta t/2}}{(\Delta y)^2} \right] \dots\dots\dots(ii).$$

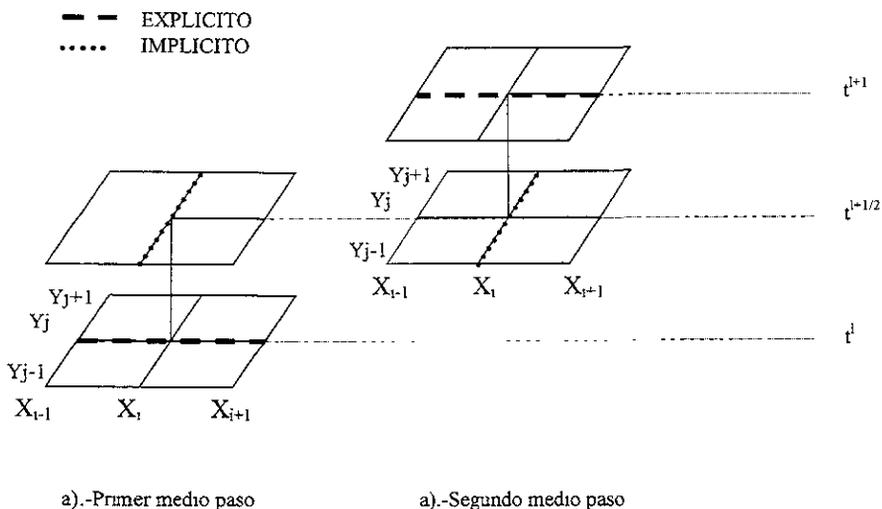


Figura A4.5 Esquema IDA

La aproximación de $\partial^2 c / \partial x^2$ esta escrita explícitamente, es decir, en el punto base t^l donde son conocidos los valores de la concentración del contaminante c . Solo se conocen los tres términos de la aproximación de la concentración. Para el caso de una malla cuadrada ($\Delta x = \Delta y$), esta ecuación se puede expresar como:

$$-\lambda c_{i,j-1}^{l+1,2} + 2(1+\lambda)c_{i,j}^{l+1,2} - \lambda c_{i,j+1}^{l+1,2} = \lambda c_{i-1,j}^l + 2(1-\lambda)c_{i,j}^l + \lambda c_{i+1,j}^l \quad \dots\dots\dots(iii),$$

la cual cuando esta escrita para el sistema, da como resultado un conjunto tridiagonal de ecuaciones simultáneas.

Para el segundo paso, que va de $t^{l+1/2}$ a t^{l+1} , la ecuación (i) es aproximada por:

$$\frac{c_{i,j}^{l+1} - c_{i,j}^{l+1/2}}{\Delta t / 2} = k \left[\frac{c_{i+1,j}^{l+1} - 2c_{i,j}^{l+1} + c_{i-1,j}^{l+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{i,j+1}^{l+1/2} - 2c_{i,j}^{l+1/2} + c_{i,j-1}^{l+1/2}}{(\Delta y)^2} \right] \quad \dots\dots\dots(iv)$$

onde los puntos u_{-1}^{n+1} son puntos falsos.

mostremos el método resolviendo para la primera capa en el tiempo t_1 suponiendo $l=3$. Tenemos:

para $m=0$.

$$\frac{u_0^{n+1} - u_0^n}{\tau} \approx D \frac{u_1^{n+1} - 2u_0^{n+1} + u_{-1}^{n+1}}{h^2}.$$

de acuerdo a la aproximación numérica del flujo con puntos falsos, tenemos:

$$\frac{u_1^{n+1} - u_{-1}^{n+1}}{2h} = l_1^{n+1}.$$

por lo tanto, los puntos falsos están dados por:

$$u_{-1}^{n+1} = u_1^{n+1} - 2hl_1^{n+1}$$

substituyendo en el esquema numérico de la ecuación de difusión, tenemos:

$$\frac{u_0^{n+1} - u_0^n}{\tau} = D \frac{u_1^{n+1} - 2u_0^{n+1} + (u_1^{n+1} - 2hl_1^{n+1})}{h^2}$$

entonces, para $n=0$ tenemos:

$$\frac{u_0^{n+1} - u_0^n}{\tau} \approx D \frac{u_1^{n+1} - 2u_0^1 + u_1^1 - 2hl_1^1}{h^2}.$$

si definimos $K = \tau D / h^2$, tenemos:

$$(1 + 2K)u_0^1 - 2Ku_1^1 = u_0^0 - 2Kh l_1^1.$$

para $m=1$:

$$u_1^1 - u_{-1}^0 = K(u_2^1 - 2u_1^1 + u_0^1)$$

$$-Ku_0^1 + (1 + 2K)u_1^1 - Ku_2^1 = u_1^0.$$

para $m=2$.

$$Ku_1^1 + (1 + 2K)u_2^1 - Ku_3^1 = u_2^0.$$

Para $m=3$, como es el último punto, utilizaremos otra vez el método de los puntos falsos. Entonces:

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\tau} = D \frac{u_{m+1}^{n+1} - 2u_m^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}}{h^2}.$$

Donde los puntos u_{m+1}^{n+1} son puntos falsos.

La aproximación numérica del flujo en la frontera $x = l$ está dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=l} = \frac{u_{m+1}^{n+1} - u_{m-1}^{n+1}}{2h} = J_2^{n+1}.$$

Entonces:

$$u_{m+1}^{n+1} = (2hJ_2^{n+1}) + u_{m-1}^{n+1}.$$

Substituyendo en la expresión numérica de la ecuación de difusión tenemos:

$$u_m^{n+1} - u_m^n = K(2hl_2^{n+1} + 2u_{m-1}^{n+1} - 2u_m^{n+1}),$$

para nuestro ejemplo $m=3$ y $n=0$, tenemos:

$$-2Ku_2^1 + (1 + 2K)u_3^1 = 2Khl_2^1 + u_3^0.$$

Si las ecuaciones obtenidas para cada m las arreglamos en forma matricial obtenemos el siguiente sistema tri-diagonal:

$$\begin{bmatrix} (1+2k) & -2K & 0 & 0 \\ -K & (1+2k) & -K & 0 \\ 0 & -K & (1+2k) & -K \\ 0 & 0 & -2K & (1+2k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0^1 \\ u_1^1 \\ u_2^1 \\ u_3^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_0^0 - 2Khl_1^1 \\ u_1^0 \\ u_2^0 \\ u_3^0 - 2Khl_2^1 \end{bmatrix}$$

Al resolver este sistema por medio del algoritmo de Thomas, obtenemos todas las concentraciones para

$n=1$



**Universidad Nacional Autónoma
de México**

BIBLIOGRAFÍA

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán



BIBLIOGRAFIA:

Ames J., Myers T.C., Reid L.E., Whitney D.C., Golding S.H., Hayes S.R. and Reynolds S.D., (1985). SAI Airshed Model Operation Manual. Vol. I. User's Manual. U.S. EPA Publication EPA-600/8-85-007a, U.S. Environmental Protection Agency Research Triangle Park, North Carolina.

Aurenhammer, F., and Klein, R., (2000). Handbook of Computational Geometry, Voronoi diagrams, Cap 5 201-290p.

Chico T. and Lester J., (1992). Application of the Urban Airshed Model for two SCAQS episodes in the Southern California Air Quality Study Data Analysis Conference Los Angeles, CA

Cohen, Hindmarsh, A., (1996). CVODE, a Stiff/NonStiff ODE solver in C. *Computers in Physics* 10.138p

Environmental Protection Agency, EPA, (1989). User's Manual for OZIPM-4 (Ozone Isopleth Plotting with Optional Mechanisms).

Eschenroeder, A., Martinez, (1972). Concepts and application of photochemical smog models. *Adv. Chem. Ser.* 113 101p.

Ferziger, J. H., (1981). Numerical methods for engineering application Wiley. Nueva York, 1981.

Goodin, W., McRae, G., Seinfeld J., (1979). A Comparison of interpolation methods for sparse data: application to wind and concentration fields. *J. Applied Meteorology* 18. 761p.

Goodin, W., McRae, G., Seinfeld J., (1980). An objective analysis technique for constructing three-dimensional urban scale wind fields. *J. Applied Meteorology* 19. 98p.

Gronski K.E., Walker S.E. and Gram F., (1993). Evaluation of a model for hourly spatial concentration distributions. *Atmos Environment* 27B. 105-120p

Guderian, R. Editor, (1985). Air Pollution by Photochemical Oxidants Springer Verlag Germany.

Hanna, S., (1973). A simple dispersion model for the analysis for chemically reactive pollutants. *Atmosf. Environ.* 7 803p.

Hanna, S. R., Moore, G. E., Fernau, M.E., (1996). Evaluation of photochemical grid model (UAM-IV, UAM-V, and the ROM/UAM-IV couple) using data from Lake Michigan Ozone Study (LMOS) *Atmos Environ.* 30. 3265p

Hesstvedt, E., Hov, O., Isaksen, I., (1978). Quasi-steady-state approximation in air pollution modeling. comparison of two numerical schemes for oxidant prediction. *Int. J. Chem Kinet* 10. 971p.

- Jáuregui, E., (1971).** Mesomacroclima de la Ciudad de México. UNAM. Instituto de Geografía. México.
- Keubler, J., Giovannoni, J. M., Rusell, A. G., (1996).** Eulerian modeling of photochemical pollutants over the Swiss Plateau and control strategy analysis. *Atmos Environ.* 30. 951p.
- Kim, j., Cho, S., (1997).** Computation Accuracy and efficiency of the time-splitting method in solving transport/chemistry equations. *Atmos Environ.* 31. 2215p.
- Kumar, N., Rusell, A., (1996).** Comparing prognostic and diagnostic meteorological field and their impacts on photochemical air quality modeling. *Atmos. Environ.* 30. 1989p.
- Lin, J. S., Hidelmann, L.M., (1997).** A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition. *Atmos Environ,* 31. 59p.
- Lu, R., Turco, R. P., (1996).** Ozone distributions over the Los angeles basin: three-dimensional simulations with the SMOG model. *Atmos Environ.* 30. 4155p.
- McRae, G., Goodin, W., Seinfeld, J., (1982).** Numerical solution of the Atmospheric Diffusion Equation for Chemically reacting Flows. *Review article. J. Computational Physics* 45. 1p.
- McRae G.J. and Seinfeld J.H., (1983).** Development of a second generation mathematical model for urban air pollution II. Performance Evaluation. in *Atmos Environ.* 17. 501-523p.
- Moussiopoulos N., Sahn P., Kessler Ch., (1995).** Numerical simulation of the photochemical smog formation in Athens. Greece- A case study, to appear in *Atmos. Environ*
- Nester K., Baer M., Fielder F., (1987).** Modellierung des Ferntransports von Luftschadstoffen für eine TULLA-Episode, 3. *Statuskolloquium des PEF, KFK-PEF 12. BD.2*
- Nevers, N., (1997, 1998).** Ingeniería de control de la contaminación del aire. McGraw Hill. México.
- Oliver and R. Webster, (1990).** Kriging a method of interpolation for geographical information system, VOL 4 313-332p.
- Persson C., Langner J. and Robertson L., (1994).** MATCH: A mesoscale atmospheric dispersion model and its application to air pollution assessments in Sweden. *Air Pollution Modelling and Its Application X.* Edited by S.-V. Gryning and M M Millan, Plenum Press, New York, 1994.
- Peters, L., Berkowitz, C., Carmichael, G., Castro, R., Fairweather, G., Saylor., (1995).** The current state and future direction of eulerian models in simulating the troposphere chemistry and transport of trace species, a review. *Atmos Environ* 29. 189p.
- Press, W. H., B. P. Flanner, S. A. Teukolsky y W.T. Vetterling, (1986).** Numerical recipes: The Art of Scientific Computing *Cambridge University Press. Cambndge, 1986*

- Press, W. H., B. P. Flanner, S. A. Teukolsky y W.T. Vetterling, (1991). Numerical recipes in C. Cambridge University Press 1991.
- Press, W. H., B. P. Flanner, S. A. Teukolsky y W.T. Vetterling, (1992). Numerical recipes: The Art of Scientific Computing. Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- Roth, p. (1981). In Guderian eds. 1985.
- Russel A.G., McCue K.F., Gass G.R., (1988). Mathematical modelling of the formation of nitrogen-containing pollutants. I. Evaluation of an Eulerian photochemical model. *Environ. Science and Tech.* 22. 263-271p.
- Quadri, Sánchez, L. R., (1994). La Ciudad de México y la contaminación atmosférica. Ed. Limusa. México.
- Saylor, R. Ford, G., (1995). On the comparison of numerical methods for the integration of kinetic equations in atmospheric chemistry and transport models. *Atmos. Environ.* 29. 2585p.
- Seinfeld, J. H., Reynolds, S.D., Roth, P. M., (1972). Simulation of urban air pollution. *Adv Chem Ser.* 113. 58p.
- Seinfeld, J. H., (1977). International conference on oxidants, 1976- Analysis of evidence and viewpoints. California Institute of Technology Pasadena, California.
- Seinfeld, J. H., (1978). Contaminación atmosférica Fundamentos Físicos y Químicos. Instituto de Estudios de Administración local. Madrid.
- Seinfeld, J. H., (1986). Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution. John Wiley & Sons. New York.
- Seinfeld, J. H., Spyros N. Pandis, (1997). Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change, John Wiley & sons. 1997.
- Shere, K. L., Demerjian, K. L., (1978). A photochemical box model for urban air quality simulation. 4th Joint Conf sensing Environ Pollut. Am Chem Soc.
- Sklarew, R., Fabrick, A., Prager, J., (1972). Mathematical modelling of photochemical smog using the PICK method. *JAPCA* 22. 865p.
- Steven C., Chapra, Raymond P. Canale, (1999). Métodos numéricos para ingenieros, McGraw-Hill.
- Tilden, J., Seinfeld, J. H., (1982). Sensitivity analysis of a mathematical model for photochemical air pollution. *Atmos environ.* 16. 1357p.
- Velasco, R., Varela, J., (1996). Simulación numérica de la dispersión de contaminantes en la atmósfera. Eds. El colegio nacional México. pag.191

- Venkatram, A., (1978).** An examination of box models for air quality simulation. *Atmos Envir.* 12. 2243p.
- Verwer, J., Blom, J., Van Loon M., Spee, E., (1996).** A comparison of stiff ODE solvers for atmospheric chemistry problems. *Atmos. Environ.* 30. 49p.
- Wayne, L., Kokin, A., Weisburd, M., (1973).** Controlled evaluation of the reactive environmental simulation model. *EPA R4 Vol.1.*
- Yamartino R.J., Scire J.S., Charnichael G.R. and Chang Y.S., (1992).** The CALGRID mesoscale photochemical grid model.-I. Model formulation. *Atmos. Environ.* 26A.. 1493-1512p.