

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA

MODELACIÓN DE LA CONCENTRACIÓN
MEDIA DE UN CONTAMINANTE PASIVO
EN UNA ZONA URBANA

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

MAESTRA EN CIENCIAS

(MODELACIÓN MATEMÁTICA Y COMPUTACIONAL

DE SISTEMAS TERRESTRES)

P R E S E N T A :

ADRIANA ESPINOSA CONTRERAS

DIRECTOR: DR. IOURI SKIBA

2007.



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.

Agradecimientos:

A mi Tutor, Dr. Iouri Skiba por su atención, dedicación y

dirección del presente trabajo.

a los sinodales:

M. en C. José Luis Navarro Urrutía,

Dr. Arón Jazcilevich Diamant,

Dr. David Parra Guevara,

Dra. Valentina Davydova Belitskaya

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca otorgada con número de registro 195521.

A los proyectos:

Proyecto de Investigación Básica de CONACYT: 46265 Modalidad A-1.

“Dinámica e inestabilidad de la atmosfera. Teoría y aplicaciones”.

Proyecto de Investigación de CONACYT: FOSEMARNATd-2004-01-160.

“Desarrollo de una metodología para el control de corto plazo de contaminantes atmosféricos pasivos”.

Proyecto de PAPIIT, DGAPA, UNAM 1N105005.

“Modelación de procesos atmosféricos y control de contaminantes”.

Al Posgrado en Ciencias de la Tierra, al auxiliar administrativo, Gustavo Mateos por su atención en todos los trámites.

Dedico este trabajo a mis dos grandes pilares J. Refugio Espinoza Murguía† y Judith Contreras Mendoza. A Chucho, Chiquita y Reyna por recibirme todos los días.

A toda la familia, difícil de citar a uno por uno, sin embargo siempre presentes.

Agradezco a:

Fís. Israel Limas Cerón por su constante ayuda en este trabajo y por su amistad.

Ing. Daniel Espinosa Jiménez por sus asesorías on-line.

A los amigos de la Fac: Karina, Margarita, Miguel Angel, Carlitos y los que faltan...

A los que conocí en el Posgrado e hicieron del cubículo una alegría: Alejandro Martínez, Julio Rojas, Daniela, Arturo R., Arturo H. Laura y Laurita, Olivia, Francisco, Alejandro García y nuevamente los que faltan... Gracias por todo lo que compartimos!!!

A Jorge Gregorio, Goyito gracias por todo!.

Índice general

Resumen	VI
1. Introducción	1
2. Contaminación del aire	4
2.1. Contaminantes atmosféricos	5
2.2. Fuentes contaminantes	18
2.3. Dispersión	19
3. Problema de transporte de contaminantes	26
4. Estimaciones directas del contaminantes $\phi(r, t)$	31
5. Concepto del operador adjunto	33
6. Problema de transporte adjunto	37
7. Estimaciones adjuntas del contaminante $\phi(r, t)$	39
8. Peculiaridades de los dos tipos de estimaciones	42

9. Problemas de transporte discreto y su adjunto	45
10. Esquemas numéricos	48
11. Situación de la ZMG	51
11.1. Condiciones físicas	53
11.1.1. Condiciones geográficas	53
11.1.2. Condiciones meteorológicas	55
11.2. Calidad del aire	58
12. Resultados numéricos y discusión	69
13. Conclusiones	89
Bibliografía	93

Resumen

Para estimar la concentración media de contaminación en zonas ecológicamente importantes se usan dos tipos de estimaciones: las directas y las adjuntas. Las primeras dependen de la solución del modelo de transporte de contaminantes y aportarán un conocimiento completo sobre el impacto ambiental que produce cada contaminante en la región del estudio. Las estimaciones adjuntas son muy convenientes para analizar la sensibilidad de los niveles de contaminación en la zona con respecto a variaciones en las tasas de emisión, en las posiciones y en la cantidad de plantas industriales.

En este trabajo se formulan el modelo de transporte de contaminantes y su adjunto y se introducen las estimaciones directas y adjuntas. Para ambos se desarrollan los correspondientes modelos numéricos (discretos) usando las diferencias finitas y los métodos de balance y de separación. Los esquemas numéricos obtenidos, aproximan modelos continuos con el segundo orden respecto a los tamaños de malla (tanto temporal como espacial) y son absolutamente estables y balanceados.

Se estimaron los niveles de concentración media de un contaminante pasivo en la Zona Metropolitana de Guadalajara. También se muestra que las soluciones del modelo adjunto aportan información importante sobre la influencia que tiene cada fábrica en el proceso de contaminar una zona ecológicamente importante.

Capítulo 1

Introducción

El crecimiento de la población, el aumento en el consumo de combustibles, así como el incremento en la densidad de vehículos en la circulación, entre otras variables, contribuyen al deterioro de la calidad del aire. Es en las grandes ciudades y en los corredores industriales en donde se agudiza el impacto de todos estos elementos vinculados con el desarrollo, teniendo como una de sus manifestaciones a la contaminación atmosférica y sus consecuentes efectos en los ecosistemas y en la salud de la población.

La investigación en el tema de la contaminación atmosférica es de suma importancia, ya que para encontrar medidas efectivas para su prevención y control es necesario entender los factores asociados a este fenómeno. Se requiere además de las mediciones, otros estudios que permitan obtener información sobre la presencia y los niveles de los contaminantes, la relación entre estos, sus procesos de formación y destrucción, así como los aspectos relacionados con la difusión y el transporte de los mismo tanto en las capas verticales como en trayectoria horizontal. Estos tópicos se tratan en el capítulo 2 del presente trabajo, los fenómenos físicos y químicos que intervienen en la formación y destrucción de contaminantes atmosféricos, las

características inherentes de los contaminantes atmosféricos que permiten su transporte a grandes distancias del lugar donde fueron generados, esto implica que la prevención y el control de la contaminación del aire debe considerar no sólo el impacto de los contaminantes en el lugar donde fueron generados, sino también el que puede tener en poblaciones humanas y sistemas naturales de zonas receptoras cercanas, y también de aquellas que se encuentran a cientos o miles de kilómetros.

La formulación de un modelo matemático del problema de transporte de contaminantes se revisa a partir del capítulo 3 al 7, en donde se describe su postulación, condiciones de frontera e iniciales. Se estudia el operador adjunto y se formula el problema de transporte adjunto. Para la solución de ambos problemas se obtienen sus respectivas estimaciones. En el capítulo 8 se analizan las peculiaridades de ambas estimaciones.

En el siguiente capítulo para ambos modelos se desarrollan los correspondientes esquemas numéricos usando las diferencias finitas y los métodos de balance y de separación (Marchuk y Skiba, 1976), (Skiba, 1993). Los esquemas numéricos obtenidos aproximan modelos continuos con el segundo orden respecto a los tamaños de malla y pasos de tiempo. Estos esquemas son absolutamente estables y balanceados.

En el capítulo 11, se describe la situación de la Zona Metropolitana de Guadalajara, sus condiciones físicas, geográficas y meteorológicas. Así como la calidad del aire observada en el periodo 2001-2004.

En el capítulo 12 se discuten los resultados de los experimentos numéricos realizados para diferentes tipos de viento climatológico. Los experimentos desarrollados con el modelo directo simulan los niveles de contaminación para bióxido de azufre en calidad de emisión típica de fuentes fijas o de industria en general. El modelo adjunto se aplicó para calcular las funciones de peso de varias fuentes fijas de emisiones en la ciudad, para determinar la contribución de

cada fábrica en la contaminación en una zona ecológica.

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

Capítulo 2

Contaminación del aire

La contaminación del aire puede ser definida como cualquier condición atmosférica en la cual los polutantes del aire se presentan en concentraciones bastante altas con respecto a su nivel normal en el medio ambiente y producen un efecto dañino en hombres, animales, vegetación y materiales (Seinfeld y Pandis, 1998). Por “sustancias” determinamos cualquier elemento químico natural o de origen antropogénico o formado por los compuesto del aire como resultado de procesos fotoquímicos. Estas sustancias pueden existir en la atmósfera como gases, gotas de líquido, o partículas sólidas.

Los contaminantes naturales, pueden representar serios problemas de calidad del aire, cuando son generados en cantidades significativas cerca de asentamientos humanos. Pero representan bajo impacto en la salud y el bienestar, porque los niveles de contaminantes asociados con la contaminación natural del aire son típicamente muy bajos, las grandes distancias entre las fuentes de contaminantes naturales y las grandes poblaciones humanas; y las mayores fuentes de contaminantes naturales, tales como incendios forestales, tormentas de polvo y volcanes, son en episodios transitorios.

La contaminación del aire antropogénica se ha vuelto un serio problema. Su seriedad recae en el hecho de que la altura, niveles de contaminantes potencialmente perjudiciales, son producidos en ambientes donde el daño a la salud del humano es el más probable.

La atmósfera actual, por debajo de los 100 Km. (la homósfera) contiene solo unos cuantos gases bien mezclados que, juntos, cubren más del 99 por ciento de todas las moléculas de gas en esta región. Estos gases bien mezclados son llamados gases estables porque sus razones de mezcla no cambien mucho en el tiempo o el espacio. Sin embargo, los gases variables, aquellos cuya razón de mezcla es pequeña pero varía en tiempo y espacio, son los gases más importantes en lo que respecta a los problemas de contaminación del aire (Jacobson, 2002).

Algunos gases son importantes porque sus concentraciones son altas, sugiriendo que estos gases no se degradan rápidamente. Otros son importantes porque reaccionan rápidamente para formar uno o más productos que son dañinos o de alguna otra importancia. Algunos gases que no reaccionan rápidamente (pasivos) son $N_2(g)$, $O_2(g)$, y $CO_2(g)$. Algunos que reaccionan rápidamente son $OH(g)$, $NO(g)$, $NO_2(g)$, y $O_3(g)$, la mayoría de los cuales son radicales libres. El tiempo requerido para la que concentración de un gas disminuya a $\frac{1}{e}$ de su concentración original como resultado de una reacción química es llamado un decaimiento exponencial. Esta parámetro es similar a la vida media, la cual es el tiempo requerido para que la concentración de un gas disminuya a la mitad de su concentración original (Jacobson, 2002).

2.1. Contaminantes atmosféricos

Bioxido de azufre. El bióxido de azufre $SO_2(g)$ es históricamente el más prominente de los gases contaminantes, habiendo logrado esta notoriedad como irritante respiratorio. Es

un gas incoloro que exhibe un sabor a niveles mayores de 0.3 partes por millón de volumen (ppmv) y un fuerte olor a niveles mayores de 0.5 ppmv. Actualmente esta regulado en muchos países.

Fuentes y sumideros. Algunas fuentes incluidas plantas de energía que queman carbón, escapes de automóviles y volcanes. El bióxido de azufre es también producido químicamente en el aire del dimetilsulfuro [$DMS(g)$] producido biológicamente y del sulfuro de hidrógeno [$H_2S(g)$]. El bióxido de azufre es removido por reacción química, disolución en agua y transferencia al suelo. Es relativamente soluble.

Razones de mezcla. En el fondo de la troposfera, las razones de mezcla del bióxido de azufre van desde 1 a 30 parte por billón de volumen (ppbv). Los niveles de bióxido de azufre son usualmente menores en espacios interiores que en exteriores. La razón de bióxido de azufre de interior a exterior es típicamente entre 0.1:1 a 0.6:1 en construcciones sin fuentes interiores. Las razones de mezcla en hogares equipados con calefactores de keroseno o estufas de gas fueron encontradas de 30 a 57 ppbv.

Efectos en la salud. A causa de que el bióxido de azufre es soluble, es absorbido en las membranas mucosas de la nariz y tracto respiratorio. El ácido sulfúrico [$H_2SO_4(aq)$] también es soluble, pero su razón de deposición en el tracto respiratorio depende del tamaño de la partícula en la cual se disuelve. Altas concentraciones de bióxido de azufre y ácido sulfúrico pueden dañar los pulmones. Constricción bronquiolar e infecciones respiratorias pueden ocurrir a razones de mezcla mayores a 1.5 ppmv. La exposición a largo plazo al bióxido de azufre a consecuencia de la quema de carbón, esta asociado con daño al funcionamiento pulmonar y otras enfermedades respiratorias. La gente expuesta a las quemas abiertas de carbón emisoras de bióxido de azufre son propensas a sufrir disnea y sofocación más que aquellos que no se expusieron a tales quemas (Jacobson, 2002).

En la actualidad se emite una cantidad considerable de bióxido de azufre a nivel del suelo, particularmente, en la zonas continentales del Hemisferio Norte. En muchos países, el uso más importante del carbón es para la generación de electricidad. Habitualmente, la mitad o más del azufre queda retenido en “inclusiones” en el contenido mineral del carbón; sí el carbón se pulveriza antes de la combustión, este tipo de azufre puede eliminarse por medio mecánicos. Muchas fuentes puntuales de bióxido de azufre, también están asociados a la industria de la fundición de metales no ferrosos (es decir, conversión de minerales a metales libres) Baird (2001).

Bióxido de nitrógeno. El bióxido de nitrógeno [$NO_2(g)$] es un gas de color café con un fuerte olor. Absorbe las longitudes de onda cortas del espectro visible (azul y verde) y transmite el remanente del verde y rojo, provocando que el bióxido de nitrógeno se observe de color café. El bióxido de nitrógeno es un intermediario entre la emisión del óxido nítrico y la formación del ozono. También es precursor del ácido nítrico. El bióxido de nitrógeno natural al igual que óxido nítrico, reduce el ozono en la estratosfera superior.

Fuentes y sumideros. Las fuentes menores son la combustión de combustibles fósiles y la quema de biomasa. Las fuentes interiores incluyen calentadores que emplean keroseno, estufas de leña y los cigarros. Las fuentes de bióxido de nitrógeno también incluyen a la fotólisis y las reacciones químicas.

Razones de mezcla. Las razones de mezcla del bióxido de nitrógeno cerca del nivel del mar en la troposfera libre de los 20 a 50 parte por trillón de volumen (pptv). En la troposfera superior, las razones de mezcla son de 30 a 70 pptv. En regiones urbanas van desde 0.1 a 0.25 ppmv. En los espacios exteriores, el bióxido de nitrógeno es más prevalente a media mañana que durante a medio día o en la tarde, ya que la luz del sol descompone la mayoría del bióxido de nitrógeno pasada la media mañana (Jacobson, 2002).

Efectos en la salud. El bióxido de nitrógeno, es considerado dañino para las plantas y se sabe tóxico para los humanos, aunque no a concentraciones que normalmente ocurren en la atmósfera (Lynn, 1976). Sin embargo la exposición a razones de mezcla altas del bióxido de nitrógeno daña los pulmones e incrementa las infecciones respiratorias (Jacobson, 2002).

Monóxido de carbono. El monóxido de carbono [$CO(g)$] es el único de los seis principales contaminantes que es simple, compuesto químico específico. Es un gas sin sabor, incoloro, e inodoro. Aunque es el más abundante emitido aparte del dióxido de carbono y el vapor de agua, juega un pequeño papel en la formación de áreas urbanas. En el fondo de la troposfera, juega un amplio papel en la formación de ozono. El monóxido de carbono no es un gas de efecto invernadero, pero su emisión y oxidación a dióxido de carbono afecta el clima global. El monóxido de carbono no es importante respecto a la reducción del ozono estratosférico o a la deposición ácida. El monóxido de carbono es un componente importante de la contaminación urbana y de espacios interiores porque tiene efectos dañinos a corto plazo. El monóxido de carbono está ahora regulado en muchos países.

Fuentes y sumideros. Una fuente grande de monóxido de carbono es la combustión incompleta en automóviles, camiones y aviones. Las fuentes emisoras de monóxido de carbono incluyen incendios, quema de biomasa, combustión no transportable, algunos procesos industriales y la actividad biológica. Las fuentes interiores de monóxido de carbono incluyen calentadores de agua, carbón y gas, y estufas de gas. El principal sumidero del monóxido de carbono es la conversión química a dióxido de carbono. También es eliminado por deposición en los suelos y capas de hielo y la disolución en el agua oceánica (Jacobson, 2002).

La principal fuente de monóxido de carbono es la combustión de gasolina en vehículos motorizados. La combustión en un automotor es muy ineficiente, en parte por las propiedades intrínsecas del motor, y en parte porque los automóviles son diseñados para producir velocidad

potencia en vez de economía. Los carros producen más de la mitad de los cerca 100 millones de toneladas de monóxido de carbono que se emiten en un año, y dan razón de la gran proporción originada en áreas urbanas (Lynn, 1976).

Razón de mezcla. Las razones de mezcla del monóxido de carbono en el aire urbano son típicamente de 2 a 10 ppmv. En autopistas y túneles de tráfico pueden alcanzar más de 100 ppmv. Las razones de mezcla típicas del monóxido de carbono dentro de automóviles en áreas urbanas se extienden desde 9 a 56 ppmv. En espacios interiores, el promedio por hora de la razón de mezcla puede alcanzar de 6 a 12 ppmv cuando una estufa de gas está encendida. En la ausencia de fuentes interiores, las razones de mezcla de monóxido de carbono interior son usualmente menores que los exteriores. En la troposfera libre, las razones de mezcla varían de 50 a 150 ppbv.

Efectos en la salud. La exposición a 300 ppmv de monóxido de carbono por una hora causa dolores de cabeza; la exposición a 700 ppmv de monóxido de carbono por una hora causa la muerte, el envenenamiento por monóxido de carbono ocurre cuando se disuelve en la sangre y reemplaza al oxígeno como un enlace a la hemoglobina [$Hb(aq)$], compuesto que contiene hierro. La conversión de $O_2Hb(aq)$ a $COHb(aq)$ (carboxihemoglobina) causa sofocación. El monóxido de carbono puede también interferir con la difusión de $O_2(g)$ en la mitocondria celular y con oxidación intracelular. Para la mayor parte, los efectos del monóxido de carbono son reversibles si la exposición al monóxido de carbono es reducida. Seguido a la exposición aguda, de cualquier modo, los individuos pueden manifestar síntomas neurológicos o psicológicos por semanas o meses, especialmente si estuvieron inconscientes momentáneamente (Jacobson, 2002).

Ozono. El ozono [$O_3(g)$] es un gas relativamente incoloro a típicas razones de mezcla. Aparece ligeramente púrpura cuando sus razones de mezcla son altas porque débilmente

absorbe longitudes de onda verde de la luz visible y transmite azul y rojo, las cuales se combinan y forman el púrpura. El ozono exhibe un olor cuando sus razones de mezcla exceden 0.02 ppmv. En smog urbano o interiores, es considerado un contaminante del aire por el daño que hace a humanos, animales, plantas y materiales. En la mayoría de los países es regulado. En la estratosfera, la absorción del ozono de los rayos UV proporciona un escudo protector para la vida en la Tierra. Aunque el ozono es considerado como “bueno” en la estratosfera y “malo” en la capa frontera, las moléculas de ozono son las mismas en ambos casos.

Fuentes y sumideros. El ozono no es emitido, su única fuente en el aire es la reacción química. Los sumideros del ozono incluyen la reacción, la transferencia al suelo y capas de hielo, y la disolución en aguas oceánicas. Dado que el ozono es relativamente insoluble, su razón de disolución es relativamente lenta.

Razones de mezcla. En la troposfera libre las razones de mezcla del ozono son de 20 a 40 ppbv cerca del nivel del mar y de 30 a 70 ppbv a altitudes mayores. En el aire urbano, las razones de mezcla del ozono van desde menos de 0.01 ppmv en la noche a 0.50 ppmv (durante las tardes en las ciudades más contaminadas del mundo), con valores típicos de 0.15 ppmv durante tardes moderadamente contaminadas. Las razones de mezcla del ozono en espacios interiores son casi siempre menores que los de los espacios abiertos. En la estratosfera, el pico de las razones de mezcla son alrededor de 10 ppmv.

Efectos en la salud. El ozono produce dolores de cabeza a razones mayores de 0.15 ppmv, dolores de pecho a razones de mezcla mayores a 0.25 ppmv, y dolor de garganta y tos a razones de mezcla mayores de 0.30 ppmv. El ozono disminuye la función pulmonar en la gente que se ejercita constantemente por más de una hora exponiéndose a concentraciones mayores de 0.3 ppmv. Los síntomas de problemas respiratorios incluyendo tos y malestar respiratorio. Pequeñas disminuciones en la función pulmonar afecta a gente con asma, bronquitis crónica, y

enfisema. El ozono puede acelerar el envejecimiento del tejido pulmonar. A niveles mayores de 0.1 ppmv, el ozono afecta a los animales por el incremento de su susceptibilidad a infecciones bacterianas. También interfiere con el crecimiento de plantas y árboles y deteriora material orgánico, tales como el caucho, tintes textiles, y algunas pinturas y revestimientos. El ozono incrementa el estrés en plantas y árboles, y su susceptibilidad a enfermedades, infestación y muerte (Jacobson, 2002).

Dióxido de carbono. Es un gas incoloro, inodoro, de efecto invernadero, que es también responsable en gran parte del calentamiento global que ha ocurrido a la fecha. Es derivado de reacciones químicas, pero no solo es un importante contaminante de espacios abiertos en el sentido clásico porque no reacciona químicamente formando nuevos productos ni es dañino para la salud en razones típicas de mezcla. El dióxido de carbono juega un papel a fondo en los problemas de la deposición ácida porque es responsable de la acidez natural de la lluvia, pero tal acidez natural no causa daño ambiental. El dióxido de carbono juega un papel agudo en el agotamiento del ozono estratosférico porque el calentamiento global cerca de la superficie de la Tierra a pesar de que el dióxido de carbono aumenta el enfriamiento de la estratosfera, y tal enfriamiento regresa a la capa de ozono. Las razones de mezcla del dióxido de carbono no son regulados en ningún país. Los controles de emisión del dióxido de carbono son sujeto de un esfuerzo actual por la comunidad internacional para reducir el calentamiento global.

En la actualidad la atmósfera contiene aproximadamente 700 gigatoneladas (GT) en total de carbono, principalmente su forma más oxidada, CO_2 . El carbón en el aire, también aparece en su forma más reducida, metano CH_4 , y en la forma de una variedad de otros componentes de gases y partículas. La masa de carbón como CO_2 en el aire es más de 200 veces que la de su más cercano competidor, CH_4 .

Fuentes y sumideros. El dióxido de carbono es producido durante muchos de los procesos

biológicos, incluyendo la fermentación, desnitrificación, respiración aeróbica. Otras fuentes de dióxido de carbono son la evaporación de los océanos, la oxidación química del monóxido de carbono y gases orgánicos. emisión de gases volcánicos, la quem de biomasa natural y antropogénica, así como la combustión de combustibles fósiles.

La fuente simple más extensa de dióxido de carbono es la descomposición bacteriana de materia orgánica muerta. Las fuentes en espacios interiores incluye la exhalación humana y la combustión completa de gas, keroseno, madera y carbón.

El dióxido de carbono es removido del aire por la fotosíntesis (producción-oxígeno), disolución en el agua oceánica, transferencia a los suelos, a la capa superior de los hielos e intemperismo químico.

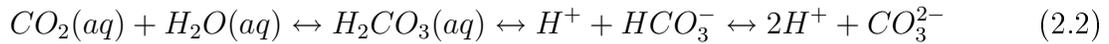
El decaimiento exponencial de su vida media, de la emisión al removimiento, a pesar de todos los procesos de eliminación, el rango es de 50 a 200 años. Como el vapor de agua, el dióxido de carbono es un gas de efecto invernadero. A diferencia del vapor de agua, el dióxido de carbono tiene pocos procesos químicos de eliminación en el fase gaseosa. Su principal proceso de eliminación es la fotólisis en la estratosfera alta y mesosfera.

Un importante mecanismo de eliminación de dióxido de carbono es su disolución en el agua oceánica. La disolución ocurre por la reacción reversible,



seguida por la rápida combinación de $CO_2(aq)$ con agua para formar el ácido carbónico $[H_2CO_3(aq)]$ y la disociación de ácido carbónico en ión hidrógeno $[H^+]$, ión bicarbonato

$[HCO_3^-]$, o el ión carbonato $[CO_3^{2-}]$, por las reacciones reversibles:

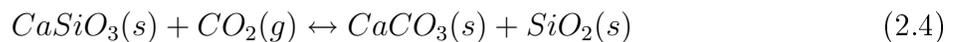


Bajo condiciones oceánicas típicas, aproximadamente todo el $CO_2(g)$ disuelto se disocia en ión bicarbonato y una pequeña fracción se disocia en ión carbonato. Ciertos organismos en el océano son capaces de sintetizar CO_3^{2-} con el ión calcio $[Ca^{2+}]$ para formar el carbonato de calcio $[CaCO_3(s)]$, calcita, conchas (o caparazones) por:



Cuando los crustáceos mueren, se hunden en el fondo del océano, donde se entierran en última instancia y sus conchas se vuelven roca calcita.

Otro proceso de eliminación de dióxido de carbono del aire es el intemperismo químico, el cual es la descomposición y reagrupación de rocas y minerales a nivel atómico y molecular por reacciones químicas. Una reacción de intemperismo químico es:



En cual el silicato con presencia de calcio reacciona con el $CO_2(g)$ para formar la piedra de carbonato de calcio y la piedra de cuarzo $[SiO_2(s)]$. A altas temperaturas, tales como las del manto de la Tierra, la reacción reversa también ocurre, liberando $CO_2(g)$, el cual es expelido al aire por erupciones volcánicas.

Otra reacción química de intemperismo involucra al dióxido de carbono y la piedra calcita. Durante este proceso, $CO_2(g)$ entra a la superficie del agua o al agua subterránea por la

reacción 2.1 y forma ácido carbónico [$H_2CO_3(aq)$] por la reacción 2.2. El ácido reacciona con la calcita, produciendo Ca^{2+} y HCO_3^- por



Dado que la reacción 2.5 es reversible, puede ir tanto a la derecha como a la izquierda. Cuando la presión parcial de $CO_2(g)$ es alta, la reacción ocurre a la derecha, rompiendo la calcita, removiendo $CO_2(g)$ y produciendo Ca^{2+} . Dentro de los suelos, raíces y la respiración de microorganismos y la descomposición de materia orgánica causan que la presión parcial de $CO_2(g)$ sea entre 10 y 100 veces que la de la atmósfera. Así, la calcita se rompe y el $CO_2(g)$ es removido con más facilidad dentro de los suelos que en la superficie del suelo. Disuelto el calcio finalmente circula de regreso a los océanos, donde parte es almacenado y el resto es convertido en material para conchas.

Razón de mezcla. El promedio global de la razón de mezcla del $CO_2(g)$ ha incrementado de aproximadamente 280 ppmv a mediados de 1800s a aproximadamente 370 al día de hoy. Los incrementos anuales son a causa del incremento de la emisión de $CO_2(g)$ de la combustión de combustibles fósiles. La fluctuación estacional en la razón de mezcla del $CO_2(g)$ es a causa de la fotosíntesis y de la descomposición bacteriana. Cuando las plantas anuales crecen en la primavera y el verano, la fotosíntesis remueve $CO_2(g)$ del aire. Cuando dichas plantas mueren en el otoño e invierno, su descomposición por bacterias añade $CO_2(g)$ al aire. Las razones de mezcla típicas del $CO_2(g)$ de espacios interiores son de 700 a 2,000 ppmv, pero pueden exceder las 3,000 ppmv cuando hay ventilación.

Efectos en la salud. La razón de mezcla del $CO_2(g)$ en espacios abiertos son tan bajas como para causar problemas de salud notorios. En espacios cerrados, la razón de mezcla del

$CO_2(g)$ puede contribuir bastante a causar algunas molestias, pero para esto son necesarias más de 15,000 ppmv para afectar la respiración humana. Razones de mezcla mayores a 30,000 ppmv son necesarios para causar dolores de cabeza, mareos o nauseas. Tales razones de mezcla por lo general no ocurren (Jacobson, 2002).

Metano. El metano [$CH_4(g)$] es la forma más reducida de carbono en el aire. También es la más simple y el más abundante hidrocarburo y gas orgánico. El metano es un gas de efecto invernadero que absorbe radiación térmica IR 25 veces más eficientemente, molécula a molécula, que el dióxido de carbono, pero sus razones de mezcla del dióxido son mayores que las del metano.

El metano insignificamente realza la formación de ozono en el smog fotoquímico, pero a consecuencia del incremento de ozono producido a partir del metano es pequeño en comparación con el ozono producido por los otros hidrocarburos, el metano es un componente relativamente sin importancia del smog fotoquímico. En la estratosfera, el metano tiene un pequeño efecto en la capa de ozono, pero su descomposición química proporciona una de las pocas fuentes de vapor de agua estratosférica. Ni la emisión ni la concentración ambiental de metano esta regulada en ningún país.

Fuentes y sumideros. El metano es producido en ambientes anaeróbicos, donde la bacteria metanogénica consume material orgánico y excreta metano. Los ambientes anaeróbicos maduros incluyen a los campos de arroz, tierras de cultivos, tierras húmedas y tractos digestivos de las vacas, borregos y termitas. El metano o también es producido en el suelo a partir de la descomposición del carbono fosilizado. El gas natural resultante, el cual contiene más del 90 % de metano, frecuentemente liberado en el aire o es aprovechado y utilizado para la energía. El metano también es producido durante la quema de biomasa, combustión de combustibles fósiles y las reacciones químicas atmosféricas. Sus sumideros incluyen reacciones químicas,

transferencia al suelo, capas de hielo, los océanos y consumo por las bacterias metanotróficas. La vida media del metano (con caída exponencial) debido a la reacción química es aproximadamente de 8 a 12 años, la cual es lenta en comparación con la vida media otros gases orgánicos. Por eso el metano es relativamente insoluble, su razón de disolución en el agua oceánica es lenta. Aproximadamente el 80 % del metano en el aire hoy es de origen biogénico; el resto se origina de la combustión del combustible y de la liberación del combustible.

Razón de mezcla. La razón de mezcla promedio del metano en la troposfera es cerca de 1.8 ppmv, la cual incrementó de cerca de 0.8 ppmv a mediados de 1800s. Su razón de mezcla ha incrementado constantemente a causa del incremento de la quema de biomasa, combustión de combustible fósil, uso de fertilizantes, y desarrollo de tierras cultivo. Las razones de mezcla del metano son relativamente constantes con altura en la troposfera, pero decrece en la estratosfera a causa de la pérdida química. A 25 Km., la razón de mezcla del metano es casi la mitad que en la troposfera.

Efectos en la salud. El metano no tiene efectos dañinos en la salud humana a típicas razones de mezcla en interiores y exteriores (Jacobson, 2002).

Óxido nítrico. El óxido nítrico [$NO(g)$] es un gas incoloro y un radical libre. Es importante porque es un precursor del ozono troposférico, ácido nítrico [$HNO_3(g)$] y el anión de nitrato [NO_3^-]. Mientras que el óxido nítrico no afecta directamente la deposición ácida, el ácido nítrico sí. Mientras que el óxido nítrico no afecta al clima, el ozono y el anión de nitrato sí. El óxido nítrico natural reduce el ozono en la estratosfera. Las emisiones de óxido nítrico de los jets que vuelan en la estratosfera también reducen el ozono estratosférico. Los niveles de óxido nítrico en espacios exteriores no son regulados en ningún país.

Fuentes y sumideros. El óxido nítrico es emitido por microbios en los suelos y las plantas durante la desnitrificación, y es producido por descargas eléctricas de relámpagos, combustión

y reacciones químicas. Las fuentes de combustión abarcan naves aéreas, automóviles, refinerías de petróleo, y quema de biomasa. La principal fuente del óxido nítrico es la reacción química.

Razones de mezcla. Una razón de mezcla típica a nivel del mar del óxido nítrico en el fondo de la troposfera es de 5 pptv. En la parte alta de la troposfera, la razón de mezcla del óxido nítrico es de 20 a 60 pptv. En regiones urbanas la razón de mezcla del óxido nítrico alcanza 0.1 ppmv a tempranas horas del día, pero puede decrecer a cero al medio día debido a su reacción con el ozono.

Efectos en la salud. El óxido nítrico no presenta efectos dañinos a la salud a razones mezcla típicas para espacios interiores y exteriores (Jacobson, 2002).

Gases y partículas. A causa del conocimiento del impacto sobre la atmósfera, vegetación, salud de los humanos y materiales, los contaminantes tradicionales del aire, gases y partículas, han recibido considerable investigación y atención reguladora. Aunque los términos gases y partículas son usados, éstos en realidad representan las tres fases de la materia. Las partículas representan ambas fases, líquida y sólida. Cuando partículas sólidas y líquidas son dispersadas en la atmósfera, la suspensión resultante es caracterizada como un aerosol. Los aerosoles pueden reducir la visibilidad, manchar materiales y afectar la salud.

Los aerosoles pueden ser generados en distintas maneras. Por ejemplo, aerosoles gaseosos son producidos por la combustión y subsiguiente condensación de los vapores de metal, aerosoles de polvo de la fragmentación de la materia, neblina de la atomización de líquidos o condensación de vapores, y humos de la incompleta combustión de materiales orgánicos. El humo, como se le conoce, es una mezcla de gases, partículas sólidas y gotitas de líquido. El aerosol fotoquímico es producido por la condensación de gases la cual resulta de reacciones fotoquímicas en la atmósfera. La mayoría de los aerosoles ácidos los cuales contribuyen a la formación de la neblina ligera y a la acidificación de la precipitación o la formación de lluvia

ácida es aparentemente también formada fotoquímicamente.

Aunque las partículas son la manifestación más visible de la contaminación del aire, son sólo una parte relativamente pequeña del problema de las emisiones, donde sobre una base de peso el 90 % de la carga de contaminación liberada a la atmósfera son gases. Estos contaminantes gaseosos pueden ser producidos por la combustión de combustibles y otros materiales, la fundición de minerales metalíferos o de la vaporización de líquidos o sólidos volátiles.

2.2. Fuentes contaminantes

Los contaminantes en la atmósfera pueden ser liberados de una fuente identificable o pueden ser producidos en la atmósfera como un resultado de reacciones químicas. Los tipos son clasificados como contaminantes primarios y secundarios.

Fuentes de contaminantes primarios pueden ser clasificados como móviles o estacionarios, combustión o no combustión, fuentes de área o puntuales, directas o indirectas. El uso de estas clasificaciones refleja aproximaciones regulatorias y administrativas en la implementación de programas de control de la contaminación del aire a niveles federal, estatal y local.

Las fuentes móviles incluyen automóviles, trenes y aviones, por ejemplo; todas las demás son estacionarias. La clasificación de fuentes como de combustión o no combustión se explican por sí mismas. Una fuente puntual es una fuente estacionaria cuyas emisiones son una contribución significativa a la degradación de la calidad del aire. Las fuentes de área, por otro lado, son fuentes las cuales cuando son vistas individualmente no tienen un impacto significativo en la calidad del aire. Su impacto, resulta significativo cuando son vistas colectivamente. Las fuente de área pueden incluir emisiones de vehículos motorizados, naves aéreas, trenes,

quemadas abiertas, y una variedad de pequeñas fuentes misceláneas. Las fuentes que por sí mismas no emiten, pero indirectamente contribuyen a elevar los niveles de contaminación, son fuentes indirectas, en tales casos tenemos como ejemplos los centros comerciales o estacionamientos, los cuales contribuyen a elevar los niveles por el tráfico vehicular que se presenta en la zona en la cual se encuentran ubicados.

2.3. Dispersión

Desde que el primer hombre descubrió la utilidad del fuego, se ha usado a la atmósfera como un lugar de depósito de los productos de desecho en sus actividades. Por miles de años la atmósfera, con su enorme volumen y constante movimiento, ha aceptado fácilmente y dispersado las relativas pequeñas cantidades depositadas en ella.

Hasta la era moderna de las grandes cantidades e intensa industrialización, era natural depender de la atmósfera para la transportación de los contaminantes, pero esta capacidad ha sido excedida.

Los intensos episodios de contaminación del aire, generalmente con duración de unos cuantos días hasta más de una semana, dependen de la meteorología. Durante un episodio de contaminación, el aire está usualmente confinado así que las concentraciones de contaminantes aumentan en los días sucesivos. Los procesos principales de eliminación de contaminantes en un episodio son las reacciones químicas y la deposición a la tierra. Cuando las condiciones meteorológicas cambian, los contaminantes se pueden dispersar hacia arriba, por medio de los vientos, o hacia la tierra por medio de la lluvia (Jacobson, 2002).

Una pobre dispersión de contaminantes, permite la formación de niveles de contaminación que degradan la calidad del ambiente y dañan la salud de la población.

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

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

el fenómeno denominado asentamiento que constituye un posible inhibidor de la dispersión de los contaminantes en la atmósfera (Matveyev, 1984) (Wark y Warner, 1996).

Los vientos horizontales juegan un papel significativo en el transporte (propagación) de contaminantes. Cuando la velocidad del viento incrementa, el volumen de aire movido por un determinado periodo de tiempo también se incrementa. Si la tasa de emisión es relativamente constante, si la rapidez del viento incrementa al doble, la concentración del contaminante disminuirá a la mitad, entonces la concentración es una función inversa de la rapidez del viento.

La velocidad de los vientos horizontales es afectada por la fricción, la cual es proporcional a lo accidentado de la superficie, lo cual es determinado por las características topográficas del terreno tales como montañas, valles, ríos, lagos, bosques, zonas de cultivos y construcciones. La velocidad del viento sobre una superficie lisa, por ejemplo, zonas de cultivo y lagos, tiende a ser mayor en promedio que aquella sobre una superficie accidentada, por ejemplo, montañas y construcciones.

La dispersión de contaminantes es también afectada significativamente por la variabilidad de la dirección del viento. Si la dirección del viento es relativamente constante la misma área será continuamente expuesta a altos niveles de contaminantes. Si, por otro lado, la dirección del viento esta constantemente cambiando, los contaminantes serán dispersos sobre un área mayor, la concentración sobre el área expuesta dada será menor. Grandes cambios en la dirección del viento pueden ocurrir en periodos cortos de tiempo. Por ejemplo, un cambio de la dirección de 30° , en una hora es común, y en un periodo de 24 horas de la dirección del viento puede cambiar 180° . Cambios de estaciones pueden resultar en una variación de la dirección del viento de 360° (Godish, 1991).

Una pluma contaminante emitida por una sola fuente es transportada en la dirección de

la medio del viento. Como ésta viaja está influida por el nivel prevaleciente de la turbulencia atmosférica la cual causa que la pluma crezca de tamaño, así como su entrada a los alrededores libres de contaminantes. Hay dos mecanismos principales para la generación de turbulencia atmosférica. Estos son la turbulencia mecánica y la convectiva.

La turbulencia mecánica es generada mientras el aire fluye sobre obstáculos sobre el suelo, tales como los cultivos, arbustos, árboles, construcciones y montañas. La intensidad de tal turbulencia se incrementa al aumentar la velocidad del viento y al aumentar la aspereza de la superficie y decrece al aumentar la altura sobre el suelo. Si hay solo un pequeño flujo de calor en la atmósfera, la mayoría de la turbulencia es generada mecánicamente, la atmósfera se dice es neutral o está en un estado estabilidad neutral.

Como la radiación solar calienta la superficie de la Tierra, las capas bajas de la atmósfera incrementan su temperatura y empieza la convección. El movimiento de las parcelas de aire de la superficie es inestable mientras una parcela está en ascenso, ya que se encuentra más caliente que sus alrededores y continuará elevándose. Circulaciones convectivas son iniciadas en la frontera y esta forma de turbulencia es usualmente asociada con largos remolinos, efectos de los cuales son visible frecuentemente en las plumas provenientes de las chimeneas. En la noche, cuando no hay radiación solar incidente y la superficie de la Tierra se enfría, la temperatura se incrementa con la altura, y la turbulencia tiende a ser suprimida.

Para estimar la capacidad de la atmósfera de dispersar los contaminantes que recibe es necesario conocer el grado de estabilidad de la atmósfera. Se conocen tres tipos de estratificación atmosférica denominados como inestable, neutral y estable en donde la clase de estratificación establece a veces subdividen en estable y muy estable. Aquí la atmósfera estable es aquella que no muestra movimientos verticales o cuando su tasa de cambio, $-\frac{dT}{dz}$ es menor que la tasa de cambio adiabática seca, $\Gamma = 1^\circ C/100m$ y muy estable resulta cuando

la tasa de cambio $-\frac{dT}{dz}$ es significativamente menor que la tasa de cambio adiabática seca Γ (Turner, 1994). La distribución inversa o incremento de temperatura con la altura produce el efecto de estratificación estable, y mayor gradiente en la distribución inversa, mayor estabilidad atmosférica observada. En su presencia no se observan perturbaciones del flujo zonal y por lo tanto, la intensidad de intercambios verticales disminuye considerablemente. En los casos de estratificación inestable, cuando la tasa de cambio de la atmósfera es mayor a Γ , se incrementan perturbaciones en el flujo zonal del aire y como consecuencia, se incrementan intercambios turbulentos o verticales (Lumley y Panofsky, 1964). Cuando la tasa de cambio de la atmósfera es aproximadamente igual a Γ , la atmósfera se caracteriza como neutral, y no se observan desplazamientos hacia arriba o hacia abajo y la porción del aire permanecerá en su posición de desplazamiento (Turner, 1994).

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

El efecto de la "isla de calor". La atmósfera de una gran ciudad tiene características que la difiere de la del campo. Densas y altas construcciones hechas de aluminio, concreto, vidrio y otros materiales que tienden a absorber mayor cantidad de energía solar durante el día y la conserva por un período más largo durante la noche, de lo que ocurriría con un área

rural igual, producen un fenómeno conocido como la “isla de calor”. El epicentro de la isla normalmente se encuentra en el centro de la zona urbana, quizá por la concentración y altura de los edificios, calles pavimentadas y ausencia de áreas verdes. Este aire caliente se eleva arrastrando la contaminación, se expande y fluye hacia la periferia de la zona urbana, pero al expandirse el aire se enfría en una determinada altura sobre la ciudad y de nuevo fluirá desde la periferia hacia el centro cerca del suelo. De esta manera se forma un sistema circulatorio cerrado, que conservará el contenido de la atmósfera urbana y como consecuencia favorecerá a las altas concentraciones de contaminación en la ciudad (Mestayer y Anquetin, 1995).

Precipitaciones atmosféricas. Si los contaminantes fueran continuamente emitidos a la atmósfera sin ser removidos, los niveles de fondo incrementarían todo el tiempo. Con la excepción de CO_2 y $CFCs$, y algunos otros compuestos químicamente estables, no ocurriría una apreciable acumulación de contaminantes en la atmósfera. Esto es lo fundamental a causa de los procesos de eliminación (“seco” o “húmedo”). En la eliminación “seca”, las partículas son eliminadas por la gravedad o la colisión y difusión de gases a superficies donde son absorbidas. La eliminación “húmeda” es el principal proceso para la mayoría de las partículas. Dependiendo de su concentración, la contaminación puede obtener efectos opuestos en el proceso de la precipitación. La adición de unas cuantas partículas que actúen como núcleo de hielo pueden causar partículas de hielo que crecen a expensas de gotitas de agua súper enfriadas, resultando en partículas bastante grandes que caen como precipitación. Los fenómenos meteorológicos que incrementan la frecuencia y la intensidad de precipitación en una región reducirán significativamente la carga de contaminantes y aumenta la calidad del aire. La precipitación asociada con ciclones migratorios es, particularmente, efectiva en la limpieza de la atmósfera. Por otro lado, problemas de contaminación son agravados en regiones con poca precipitación.

Sedimento. El proceso por el cual las partículas caen del aire al suelo es llamado sedimentación. El descenso de partículas por copos de nieve, lluvia, granizo, agua, nieve, bruma o neblina, es una forma común de aglomeración y sedimentación.

Partículas menores que 20 micrómetros ($\mu m.$) son tratados como dispersión de gases, y sus efectos, a pesar de su velocidad de caída, son en general ignorados. Partículas mayores a $20\mu m.$ tienen velocidades perceptibles de sedimentación. Partículas en un rango de 20 a $100\mu m.$ se asume que su dispersión es aproximadamente como los gases, pero con su centroide moviéndose hacia abajo en la atmósfera conforme a la velocidad de caída.

Capítulo 3

Problema de transporte de contaminantes

Se formula un problema simple de transporte de un contaminante atmosférico en una región bidimensional limitada D con una frontera S como el la figura 3.1. La topografía de la región no se toma en cuenta aquí. Sea $r = (x, y)$ un punto en la región D , y sea $r_i = (x_i, y_i)$ la ubicación de la i -ésima industria que emite una sustancia contaminante con la tasa $Q_i(t)$, $i = 1, \dots, I$. Se denota con $f(r, t)$ la concentración de la especie contaminante en el punto $r = (x, y)$ al tiempo t . En una primera aproximación, con el fin de simplificar el problema, la propagación del contaminante en la región D en un intervalo de tiempo $(0, T)$ se describe mediante la ecuación del transporte y difusión

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

donde μ es el coeficiente de difusión, ∇ es el gradiente bidimensional y el término $\sigma \phi$

con el coeficiente σ parametriza el decrecimiento del contaminante $\phi(r, t)$, o su extracción a causa de transformaciones químicas y fotoquímicas, depositación seca o húmeda (Stockwell y Calvert, 1983); (Boubel et al, 1994); (Hicks et al, 1998). Para simplificar los modelos de transporte estos procesos complejos de decrecimiento frecuentemente se describen con una ley exponencial (Matveyev, 1984); (Boubel et al, 1994); (Seinfeld y Pandis, 1998).

Los experimentos numéricos (Shir y Shich, 1974) también demuestran que la parametrización $\sigma\phi$ funciona satisfactoriamente en el caso de contaminantes tales como monóxido de carbono, bióxido de azufre, plomo, carbono, etc. Notemos que en las zona urbanas, el monóxido de carbono se produce por las entidades que queman carbono o gas natural, y las centrales eléctricas que consumen combustible fósil producen 75 % de bióxido de azufre (Hill, 1997), (Hobbs, 2000).

Se asume que la velocidad del viento $U(r, t) = \{u(r, t), v(r, t)\}$ es conocida (por ejemplo, el viento climático mensual, de temporada o calculado con algún modelo dinámico de la atmósfera) y se cumple en D la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial x}u + \frac{\partial}{\partial y}v = 0 \quad (3.2)$$

Supóngase que el campo del contaminante en el momento inicial $t = 0$ está dado como

$$\phi(r, 0) = \phi^0(r) \quad (3.3)$$

y ahora se asignan las condiciones de frontera. Sea $U_n = U \cdot n$ la proyección de la velocidad U sobre el vector normal exterior n a la frontera S y dividimos S en dos partes, dependiendo de sí el flujo de contaminantes entra a la región D ó sale de D , es decir, $S = S^+ + S^-$,

donde la parte del flujo saliente S^+ contiene todos los puntos de S en los que $U_n \geq 0$ (por ejemplo, el punto A de la figura 3.1 pertenece a la parte S^+), mientras que $U_n < 0$ en la parte complementaria S^- (por ejemplo, el punto B en la figura 3.1 pertenece a la parte del flujo entrante S^-). Para la ecuación 3.1 se imponen las siguientes condiciones de frontera

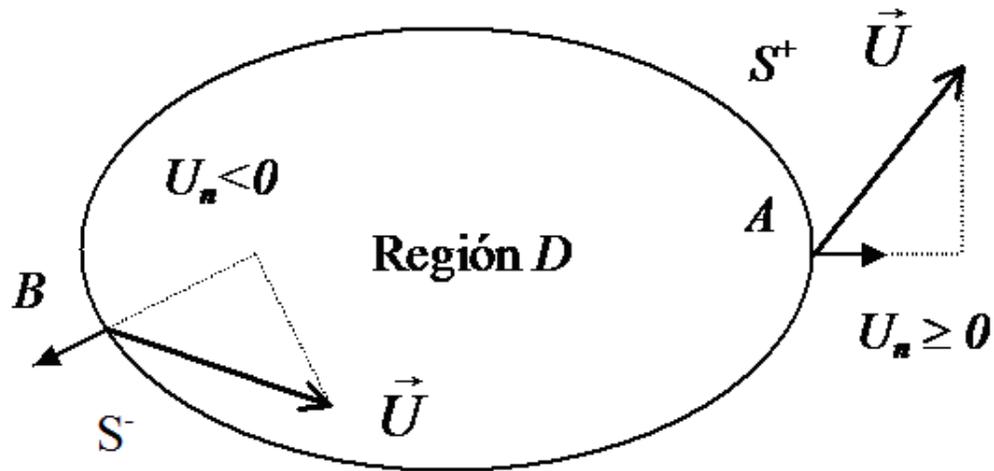


Figura 3.1: Región esquemática (área limitada con las fronteras abiertas) donde se busca la solución del problema de transporte 3.1-3.5

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} \phi - U_n \phi = 0 \quad \text{en } S^-, \tag{3.4}$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} \phi = 0 \quad \text{en } S^+ \tag{3.5}$$

La condición 3.4 significa que en la parte de la frontera S donde el viento ingresa a D , el

flujo total del contaminante (generado por la difusión y advección) es igual a cero, es decir, se supone que no existen fuentes de contaminación fuera de la región D . En la práctica, esta condición puede ser realizada extendiendo la región D con el fin de incluir en ésta todas las importantes fuentes de contaminación. La condición 3.5 dice que cuando el viento sale de la región D se desprecia el flujo turbulento en comparación con el flujo de advección $U_n\phi$ del contaminante. Estas condiciones de frontera fueron definidas por (Marchuk, 1986) para un problema bidimensional y generalizadas en el caso de tres dimensiones por (Skiba, 1993). Cuando no hay difusión ($\mu = 0$), la condición 3.4 se reduce a $\phi = 0$ (ausencia del contaminante sobre la frontera del flujo entrante), mientras que la condición 3.5 desaparece como debe ser (Skiba y Adem, 1995). En efecto, para el problema de advección pura ($\mu = \sigma = 0$), no se requiere ninguna condición en la parte del flujo saliente S^+ donde la solución se determina por el método de las líneas características (Godunov, 1971). Así en el caso límite cuando no hay difusión, las ecuaciones 3.5 y 3.6 aproximan las condiciones de contorno bien conocidas para el problema de transporte.

Integrando la ecuación 3.1 en D y tomando en cuenta las condiciones 3.4-3.5 se obtiene la ecuación de balance

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi dr = \sum_{i=1}^I Q_i(t) - \int_D \sigma \phi dr - \int_{S^+} U_n \phi dS \quad (3.6)$$

Integrando la ecuación 3.1 premultiplicando por $\phi(r, t)$ sobre D y usando 3.2, 3.4 y 3.5 obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi^2 dr = 2 \sum_{i=1}^N Q_i(t) \phi(r_i, t) - 2 \int_D (\sigma \phi^2 + \mu |\nabla \phi|^2) dr - \int_S |U_n| \phi^2 dS \quad (3.7)$$

donde $(\int_D \phi^2 dr)^{1/2}$ es la norma de la solución $\phi(r, t)$. Según 3.6, la concentración total $\int_D \phi dr$ del contaminante en el dominio D se incrementa debido a la presencia de las fuentes con tasas respectivas $Q_i(t)$ y decrece a causa del flujo de advección saliente a través de la parte S^+ de la frontera y algunos procesos disipativos, tanto físicos como químicos ($\sigma > 0$). Si $Q_i(t) = 0$ para cada i (es decir, todas las fábricas están paradas) entonces tanto $\int_D \phi dr$ como $\int_D \phi^2 dr$ decrecen con el tiempo (recordamos que $U_n < 0$ en S^-). Si adicionalmente no hay procesos disipativos ($\sigma = 0, \mu = 0$) y $U_n = 0$ en todos los puntos de la frontera S , entonces las dos integrales son invariantes:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi dr = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi^2 dr = 0 \quad (3.8)$$

las relaciones 3.8, a pesar de que se cumplen sólo bajo las condiciones artificiales, son muy útiles para probar algoritmos numéricos y programas computacionales (códigos) (Skiba, 1993).

Notemos que el modelo 3.1-3.5 es un problema bien formulado de acuerdo con (Hadamard, 1923), es decir, su solución ϕ existe, es única y depende continuamente de la condición inicial y de las tasas de emisión (Skiba y Parra, 2000).

Capítulo 4

Estimaciones directas del contaminantes

$$\phi(r, t)$$

Ahora considérese en la región D una zona de importancia ecológica Ω y defínase el funcional $J(\phi)$ como

$$J(\phi) = \frac{1}{\tau |\Omega|} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi(r, t) dr dt \quad (4.1)$$

donde $|\Omega|$ es el área de Ω . El funcional $J(\phi)$ representa la concentración promedio en la zona Ω y en el intervalo de tiempo $[T - \tau, T]$ del contaminante $\phi(r, t)$ y se denota como la estimación directa. Si la solución $\phi(r, t)$ del problema 3.1-3.5 es hallada entonces, el funcional 4.1 puede ser calculado para cualquier zona Ω . Se puede dividir la región D en varias zonas Ω_i y calcular el funcional 4.1 para cada una de ellas. En particular, la zona Ω se reduce a un sólo punto cuando $|\Omega| \rightarrow 0$. En este sentido, las estimaciones directas pueden dar información completa sobre la contaminación del aire en toda la región D .

Sin embargo, el estudio completo puede ser costoso y no siempre necesario. A veces es

suficiente monitorear los niveles de concentración del contaminante en tres o cuatro zonas, ubicadas en la región D y que son ecológicamente las más importantes. En este caso, existe un método más económico para analizar la situación ecológica en las zonas mencionadas. Se llama el método adjunto. El método está basado en la aplicación de un modelo adjunto. Especialmente es conveniente para estudiar la sensibilidad de las estimaciones de tipo 4.1 con respecto a variaciones en varios parámetros del problema (tasas de emisión $Q_i(t)$, concentración inicial $\phi^0(r)$, velocidad U , etc.). En efecto, cada vez cuando se cambia la tasa de emisión $Q_i(t)$ o la concentración inicial $\phi^0(r)$, es necesario resolver de nuevo la ecuación 3.1 para calcular el valor 4.1. El método adjunto permite evitar resolver el problema de transporte repetidamente.

En los siguientes párrafos introducimos el modelo de transporte adjunto y con ayuda de sus soluciones obtenemos otras fórmulas para calcular estimaciones 4.1 en cada zona de la región D .

Capítulo 5

Concepto del operador adjunto

Sea H un espacio de Hilbert que incluye todas las funciones reales $\varphi(r)$ definidas en el dominio Ω y cuya norma

$$\|\varphi\| = \left\{ \int_{\Omega} |\varphi(r)|^2 dr \right\}^{1/2} \quad (5.1)$$

es finita. Entonces el producto interno de dos funciones cualesquiera en H se define por

$$\langle \varphi, \phi \rangle = \int_{\Omega} \varphi(r)\phi(r)dr \quad (5.2)$$

Obviamente, $\|\varphi\| = \langle \varphi, \varphi \rangle^{1/2}$. Sea A un operador lineal con dominio $D(A)$, i.e., el resultado $A\varphi(r)$ está determinado en H para cualquier función $\varphi(r)$ de $D(A)$. Entonces el operador adjunto A^* puede ser definido por la identidad de Lagrange (Kato, 1966)

$$\langle A\varphi, g \rangle = \langle \varphi, A^*g \rangle \quad (5.3)$$

la cual es válida para cualquier $\varphi(r)$ de $D(A)$ y cualquier función $g(r)$ de dominio $D(A^*)$ del

operador adjunto A^* . Consideremos ahora algunos ejemplos del operador adjunto.

Ejemplo 1. *Operador autoadjunto.* Sea H un espacio de funciones $\varphi(r)$ cuadrado integrables definidas en Ω con producto interno 5.2, y $A\varphi(r) = \gamma\varphi(r)$ donde $\gamma = \text{const}$. Evidentemente, el dominio $D(A)$ coincide con H , y A tiene que cumplir que $\|A\| = \gamma$ (Kato, 1966). Entonces, debido a 5.3,

$$\langle A\varphi, g \rangle = \int_{\Omega} [\gamma\varphi(r)] dr = \int_{\Omega} \varphi(r) [\gamma g(r)] dr = \langle \varphi, A^*g \rangle \quad (5.4)$$

así que A es autoadjunto: $A^*g(r) = \gamma g(r)$, y $D(A^*) = D(A)$.

Ejemplo 2. *El adjunto de una matriz real.* Sea H un espacio vectorial Euclidiano $n - D$, y A una matriz $n \times n$. Definiendo $\langle \vec{\varphi}, \vec{g} \rangle = \vec{g}^T \vec{\varphi}$ como el producto interno de los vectores $\vec{\varphi}$ y \vec{g} en H donde \vec{g}^T es el transpuesto. Entonces

$$\langle A\vec{\varphi}, \vec{g} \rangle = \vec{g}^T A\vec{\varphi} = (\vec{g}^T A) \vec{\varphi} = (A^T \vec{g})^T \vec{\varphi} = \langle \vec{\varphi}, A^T \vec{g} \rangle \quad (5.5)$$

y debido a 5.3, $A^* = A^T$. De esta manera el adjunto de A es simplemente la transpuesta de A . En particular, $A^* = A$, si A es simétrica, y $A^* = -A$ si A es antisimétrica.

Ejemplo 3. *Operador de advección antisimétrico.* Sea H un espacio de funciones reales cuadrado integrables $\varphi(x)$ en el intervalo $[a, b]$ con el producto interno

$$\langle \varphi, \phi \rangle = \int_a^b \varphi(x) \phi(x) dx \quad (5.6)$$

y la norma

$$\|\varphi\| = \langle \varphi, \varphi \rangle^{1/2} \quad (5.7)$$

Considerando el operador de advección más simple

$$A\varphi(x) = \frac{\partial}{\partial x}\varphi(x) \quad (5.8)$$

en el dominio $D(A)$ de todas las funciones periódicas con derivada continua: $\varphi(b) = \varphi(a)$.

Donde $D(A)$ es parte de H , A es ilimitado, y por 5.6,

$$\langle A\varphi, g \rangle = \int_a^b \frac{\partial}{\partial x}\varphi(x) g(x) dx = \varphi(b)g(b) - \varphi(a)g(a) + \int_a^b \varphi(x) \left[-\frac{\partial}{\partial x}g(x) \right] dx \quad (5.9)$$

Ahora estamos en un buen punto para explicar el papel de las condiciones a la frontera en la definición del operador adjunto. Si $D(A^*) = D(A)$, *i.e.*, $D(A^*)$ es también un conjunto de funciones periódicas con la derivada continua en $[a, b]$ entonces

$$\langle A\varphi, g \rangle = \int_a^b \varphi(x) \left[-\frac{\partial}{\partial x}g(x) \right] dx \quad (5.10)$$

y por 5.3, A es antisimétrica ($A^* = -A$):

$$A^*g = -\frac{\partial g}{\partial x} \quad (5.11)$$

La fórmula 5.11 es también válida si $D(A^*)$ es un conjunto de todas las funciones de derivada continua $g(x)$ en $[a, b]$ tales que $g(b) = 0$ y $g(a) = 0$. Como el dominio $D(A^*)$ del adjunto A^* es ahora más limitado. Así aunque dos operadores adjuntos tengan la misma estructura 5.11, no son idénticos por la diferencia del dominio $D(A^*)$.

Finalmente, suponer que $D(A)$ es el conjunto de todas las funciones periódicas con derivada continua $\varphi(x)$ en $[a, b]$ que $\varphi(a) = c$, $\varphi(b) = d$, $c \neq d$. Entonces $A^* = -A$ sólo si

$D(A^*)$ consiste de funciones de derivada continua $g(x)$ tales que $g(a) = d$ y $g(b) = c$. En este caso φ y g tienen diferentes condiciones a la frontera, y $D(A^*)$ y $D(A)$ difieren uno del otro. Así el adjunto A^* está definido no solo por su estructura formal 5.11, sino también por su dominio $D(A^*)$ y las consideraciones a la frontera.

Ejemplo 4. *El operador de difusión simétrico.* Sea H el mismo espacio que en ejemplo 3, y sea A un operador de difusión de la forma

$$A\varphi(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) \quad (5.12)$$

además, $D(A)$ contiene funciones tales que su segunda derivada es continua en $[a, b]$ que

$$\varphi(a) = 0 \quad y \quad \frac{\partial\varphi}{\partial x}(b) = 0 \quad (5.13)$$

entonces

$$\langle A\varphi, g \rangle = -g(a) \frac{\partial\varphi}{\partial x}(a) - \varphi(b) \frac{\partial g}{\partial x}(b) + \int_a^b \varphi \left[\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \right] dx \quad (5.14)$$

para una función con segunda derivada continua $g(x)$.

Por lo tanto

$$A^*g = \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \quad (5.15)$$

si

$$g(a) = 0 \quad y \quad \frac{\partial g}{\partial x}(b) = 0 \quad (5.16)$$

Así, $D(A^*) = D(A)$, y A es ilimitada y simétrica.

Capítulo 6

Problema de transporte adjunto

Ahora, se formula en el dominio $D \times (0, T)$ un modelo adjunto al problema 3.1-3.5. Con este fin se utiliza la definición del operador adjunto en un espacio de Hilbert y la identidad de Lagrange (Lyusternik y Sobolev, 1964); (Marchuk y Skiba, 1976); (Marchuk y Skiba, 1990); (Marchuk et al, 1996). La ecuación básica del modelo adjunto tiene la forma

$$-\frac{\partial}{\partial t}g - U \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot \mu \nabla g = P(r, t) \quad (6.1)$$

donde $P(r, t)$ es un forzamiento que será determinado posteriormente y todos los demás parámetros son iguales a los de 3.1. La construcción de la ecuación 6.1 se describe en detalle, por ejemplo, en (Skiba et al, 1996). Si se asume que $P(r, t) = 0$ y $Q_i(t) \equiv 0$ para todas las i y con la sustitución $t' = T - t$ se cambia en la ecuación 6.1 la dirección del tiempo de ($t = T$ a $t = 0$) entonces resulta que las ecuaciones homogéneas 3.1 y 6.1 difieren solamente en el signo de la velocidad U . Así, la parte del flujo saliente S^+ (o la parte del flujo entrante S^-) de la frontera S para la ecuación 6.1 en el mismo tiempo es la parte del flujo entrante S^-

(la parte del flujo saliente S^+) para la ecuación 6.1. Por lo tanto las condiciones de frontera para el modelo adjunto se obtienen fácilmente de las condiciones 3.4 y 3.5:

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} g = 0 \quad \text{en } S^- \quad (6.2)$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} g + U_n g = 0 \quad \text{en } S^+ \quad (6.3)$$

la ecuación 6.1 con las condiciones de frontera 6.2-6.3 se resuelve en dirección opuesta de tiempo ($t = T$ a $t = 0$) usando la condición “inicial” nula en el momento $t = T$:

$$g(r, T) = 0 \quad \text{en } D \quad (6.4)$$

el modelo adjunto 6.1-6.4 también es un problema bien formulado de acuerdo con (Hadamard, 1923,S). Se nota que la solución $g(r, t)$ no es negativa en el dominio $D \times (0, T)$ si el forzamiento $P(r, t)$ no es negativo.

Capítulo 7

Estimaciones adjuntas del contaminante

$$\phi(r, t)$$

Con ayuda del problema adjunto, el funcional 4.1 se puede estimar de otra manera (Skiba, 1997):

$$J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(r_i, t) Q_i(t) dt + \int_D g(r, 0) \phi^0(r) dr \quad (7.1)$$

donde $g(r, t)$ es la solución del problema adjunto hallada con el forzamiento

$$P(r, t) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{\tau|\Omega|}, & \text{si } (r, t) \in \Omega \times (T - \tau, T). \\ 0, & \text{si } (r, t) \notin \Omega \times (T - \tau, T). \end{array} \right\} \quad (7.2)$$

La estimación adjunta de la concentración promedio del contaminante $\phi(r, t)$ en la zona Ω y en el intervalo de tiempo $[T - \tau, T]$ se hace con la fórmula 7.1 y es equivalente a la estimación directa 4.1, la estimación 6.1 muestra explícitamente la contribución de las tasas de emisión $Q_i(t)$ y de la contaminación inicial $\phi^0(r)$ en la concentración $J(\phi)$ del contaminante

$\phi(r, t)$. Según 7.1, la contribución de la i -ésima tasa de emisión $Q_i(t)$ depende de los valores $g(r, 0)$ de la solución $g(r, t)$ en el momento $t = 0$ en toda la región D . Por ejemplo, si para algún i , $g(r_i, t) = 0$ en todo el intervalo $(0, T)$, entonces las emisiones de la i -ésima fábrica no producen ningún impacto en la zona Ω y por el contrario, si los valores $g(r_i, t)$ son grandes en $(0, T)$, entonces las emisiones de la i -ésima fábrica tienen una gran influencia en contaminar dicha zona. Debido a que el forzamiento 7.2 no es negativo, la solución $g(r, t)$ tampoco es negativa en $D \times (0, T)$. Así pues, se puede interpretar $g(r_i, t)$ y $g(r, 0)$ como funciones de peso (funciones de influencia o funciones de información) en la estimación 7.1. En matemáticas también se llaman funciones de Green.

Según 7.1 son de gran importancia los valores de $Q_i(t)$ y de $\phi^0(r)$ en los dominios en donde $g(r_i, t)$ y $g(r, 0)$ tienen valores grandes. Es preciso notar que al hallar la solución $g(r, t)$ del problema adjunto, no es necesario guardar en la memoria de una computadora todos sus valores, ya que la estimación 7.1 usa sólo los valores $g(r_i, t)$ y $g(r, 0)$. Además, según 7.2, el forzamiento $P(r, t)$ es nulo en el intervalo $(0, T - \tau)$. Por lo tanto, si el período $T - \tau$ es bastante largo, entonces $g(r, 0)$ se reduce a cero debido a la disipación ($\mu = 0$, $\sigma = 0$) y la fórmula 7.1 se simplifica a:

$$J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(r_i, t) Q_i(t) dt \quad (7.3)$$

Un análogo discreto de la fórmula 7.3 usado en experimentos numéricos se obtiene de la siguiente manera. Se introduce en $(0, T)$ una malla bastante fina.

Con tamaño Δt ($t_n = n\Delta t$; $t_0 = 0$, $t_N = T$, $n = 0, \dots, N$) y aproximamos como:

$$J(\phi) \cong \Delta t \sum_{i=1}^I \sum_{n=1}^N g(r_i, t_n) Q_i(t_n) \quad (7.4)$$

donde $g(r_i, t_n)$ y $Q_i(t_n)$ son valores promedios de las funciones $g(r_i, t)$ y $Q_i(t)$ dentro del intervalo (t_{n-1}, t_n) la contribución de la i -ésima fuente $Q_i(t_n)$ a $J(\phi)$ es nula o muy insignificante. Nótese que los valores $g(r_i, t_n)$ dependen tanto de la ubicación mutua de la zona Ω y de las industrias como el viento U en la región D .

Capítulo 8

Peculiaridades de los dos tipos de estimaciones

En general, las estimaciones directas 4.1 y las adjuntas 7.1 y 7.3 se complementan una a la otra muy bien en el estudio de la situación ecológica en la región D . En cada situación concreta, una u otra estimación es preferible. Sin embargo es preciso notar la diferencia fundamental que existe entre los dos tipos de estimación. En la estimación directa 4.1, la solución del problema 3.1-3.5 depende del número I , del sitio r_i , de las tasas de emisión $Q_i(t)$ de las fábricas y de la concentración inicial $\phi^0(r)$, pero no depende de una zona ecológica Ω . Por eso, la fórmula 4.1 es preferible si necesitamos una información amplia sobre las concentraciones de un contaminante del aire en muchas zonas (o en cada punto) de la región D . A diferencia de éste, la solución del problema adjunto que figura en la estimación adjunta 7.1 depende sólo de la zona ecológica Ω , pero es independiente de los parámetros mencionados I , r_i , $Q_i(t)$ y $\phi^0(r)$. Por lo tanto, dicha solución puede ser calculada para cada zona Ω sin relación alguna con valores concretos de éstos parámetros. Esto hace las estimaciones

adjuntas convenientes y muy efectivos en el estudio de la sensibilidad de la concentración del contaminante $J(\phi)$ en la zona Ω con respecto a variaciones en los parámetros I , r_i y/o $Q_i(t)$. En efecto, para usar la fórmula 4.1 es necesario resolver de nuevo el problema de transporte 3.1-3.5 cada vez que se cambia por lo menos uno de los parámetros ya mencionados. Así el método directo consume mucho tiempo computacional. Contrariamente a éste, el método adjunto es más económico ya que no usa la solución del problema 3.1-3.5, y los valores $g(r_i, t)$ y $g(r, 0)$ una vez calculados, pueden ser guardados en la memoria de una computadora y utilizados repetidamente en la evaluación de $J(\phi)$ cada vez que se cambian las tasas de emisión $Q_i(t)$, el número de fábricas I , sus sitios r_i , y de la concentración inicial $\phi^0(r)$.

Ya que el problema es lineal, es fácil obtener la fórmula

$$\delta J(\phi) = \sum_{i=1}^I \int_0^T g(r_i, t) \delta Q_i(t) dt + \int_D g(r, 0) \delta \phi^0(r) dr \quad (8.1)$$

para evaluar el impacto de variaciones arbitrarias en I , r_i , $Q_i(t)$ y $\phi^0(r)$ en la concentración $J(\phi)$ en la zona Ω (Skiba, 1997). Notemos que en el caso cuando todas las variaciones son pequeñas, también es posible tomar en cuenta el efecto de variaciones pequeñas δU en la velocidad del viento U mediante la fórmula de sensibilidad

$$\delta J(\phi) = \sum_{i=1}^I \int_0^T g(r_i, t) \delta Q_i(t) dt + \int_D g(r, 0) \delta \phi^0(r) dr - \int_0^T \int_D g(r, t) U' \cdot \nabla \phi dr dt \quad (8.2)$$

sin embargo, 8.2 es mucho más compleja que 8.1, ya que usa la solución del problema 3.1-3.5.

Las estimaciones adjuntas son muy útiles para evaluar la sensibilidad de los niveles de contaminación en una zona con respecto a variaciones en las tasas de emisión de las fuentes y en la distribución inicial del contaminantes en todo el dominio (Skiba y Davydova, 2002,S,S).

También juegan un papel principal en el desarrollo de varias estrategias de control Parra-Guevara y Skiba (2003); (Parra-Guevara y Skiba, 2006,S).

Capítulo 9

Problemas de transporte discreto y su adjunto

Para hacer discreto el problema de transporte (o su adjunto) en el espacio se usan los métodos de diferencias finitas y de balance, mientras que para hacerlo discreto en tiempo se aplica el método de separación “componente-por-componente” (Marchuk, 1986) y el esquema de Crank-Nicolson (Crank y Nicolson, 1947). El método de separación permite reducir la solución del problema original bidimensional a dos problemas simples unidimensionales.

Los esquemas y algoritmos numéricos utilizados para resolver el problema de transporte 3.1-3.5 y su adjunto son descritos detalladamente en (Skiba, 1997). Por lo tanto aquí se darán solamente resultados básicos. Usando 3.2, el operador A de la ecuación 3.1 puede ser descrito como $A = A_1 + A_2$ donde

$$A_1\phi = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (u\phi) + \frac{1}{2} u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma \phi - \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (9.1)$$

$$A_2\phi = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial y}(v\phi) + \frac{1}{2}v\frac{\partial\phi}{\partial y} + \frac{1}{2}\sigma\phi - \frac{\partial}{\partial y}\mu\frac{\partial\phi}{\partial y} \quad (9.2)$$

Con ayuda de 3.4-3.5 puede ser mostrado que cada uno de los operadores A_i ($i = 1, 2$) es positivamente semidefinido (Skiba, 1993). El operador del problema 6.1-6.4 es el adjunto del operador A y puede ser representado como $A^* = A_1^* + A_2^*$ donde

$$A_1^*\phi = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u\phi) - \frac{1}{2}u\frac{\partial\phi}{\partial x} + \frac{1}{2}\sigma\phi - \frac{\partial}{\partial x}\mu\frac{\partial\phi}{\partial x} \quad (9.3)$$

$$A_2^*\phi = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial y}(v\phi) - \frac{1}{2}v\frac{\partial\phi}{\partial y} + \frac{1}{2}\sigma\phi - \frac{\partial}{\partial y}\mu\frac{\partial\phi}{\partial y} \quad (9.4)$$

Al hacer discreto el problema de transporte y su adjunto, se usa el método de separación de las variables basado en las representaciones $A = A_1 + A_2$ y $A^* = A_1^* + A_2^*$ (Skiba, 1997). Por ejemplo, las funciones ϕ , u y v se presentan sobre distintas mallas: $\phi_{ij} = \phi(x_i, y_j)$, $u_{ij} = u(x_{i-1/2}, y_j)$ y $v_{ij} = v(x_i, y_{j-1/2})$. Las matrices A_i^h , que representan los operadores A_i en la malla, tienen la siguiente forma:

$$(A_1^h\phi)_{ij} = \frac{u_{i+1,j}\phi_{i+1,j} - u_{ij}\phi_{i-1,j}}{2\Delta x} + \sigma\phi_{ij} - \frac{\mu}{(\Delta x)^2}[\phi_{i+1,j} - 2\phi_{ij} + \phi_{i-1,j}] \quad (9.5)$$

$$(A_2^h\phi)_{ij} = \frac{v_{i,j+1}\phi_{i,j+1} - v_{ij}\phi_{i,j-1}}{2\Delta y} + \sigma\phi_{ij} - \frac{\mu}{(\Delta y)^2}[\phi_{i,j+1} - 2\phi_{ij} + \phi_{i,j-1}] \quad (9.6)$$

La ecuación de continuidad se aproxima como

$$\frac{u_{i+1,j} - u_{ij}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1} - v_{ij}}{\Delta y} = 0 \quad (9.7)$$

Las aproximaciones 9.5-9.7 son de segundo orden con respecto a los tamaños de malla Δx y Δy . Las matrices adjuntas $(A_i^h)^*$ se obtienen de 9.5 y 9.6 al sustituir u , v y ϕ por $-u$, $-v$

y g , respectivamente.

Ahora se muestra brevemente la aproximación de las condiciones de frontera. Supóngase, por ejemplo, que $M = (x_{1/2,j}, y_j)$ es el punto de frontera del dominio de malla y sea u_{1j} un valor positivo de la u -componente de la velocidad de viento en el punto M . Entonces $U_n = -u_{1j} < 0$, es decir, el punto M pertenece a S^- y las condiciones 3.4 y 6.2 se aproximan como

$$\mu \frac{\phi_{0j} - \phi_{1j}}{\Delta x} + u_{1j} \frac{\phi_{0j} + \phi_{1j}}{2} = 0, \quad g_{0j} = g_{1j} \quad (9.8)$$

Análogamente, se aproximan las condiciones 3.4 y 3.5, 6.2 y 6.3 en todos los puntos de la frontera.

Es fácil demostrar que para cada i , las matrices (A_i^h) y $(A_i^h)^*$ son positivamente semi-definidas, además son anti-simétricas en el caso especial cuando $\mu = 0$, $\sigma = 0$, y $U_n = 0$ en toda la frontera S . También, una de las propiedades importantes que posee la discretización es que $(A_i^h)^* = (A_i^*)^h$ para cada i , ($i = 1, 2$), donde por los índices h y $*$ se designan la proyección en la malla y la operación adjunta, respectivamente. Las propiedades mencionadas de las matrices separadas permiten construir para ambos modelos los esquemas balanceados, compatibles y absolutamente estables.

Capítulo 10

Esquemas numéricos

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

$$\Phi \left[n - \frac{3-i}{3} \right] - \Phi \left[n - \frac{4-i}{3} \right] = -\frac{\tau}{2} A_i^h \left(\Phi \left[n - \frac{3-i}{3} \right] + \Phi \left[n - \frac{4-i}{3} \right] \right) \quad (i = 1, 2)$$

$$\Phi \left[n + \frac{1}{3} \right] - \Phi \left[n - \frac{1}{3} \right] = 2\tau Q[n]$$

$$\Phi \left[n + \frac{4-i}{3} \right] - \Phi \left[n + \frac{3-i}{3} \right] = -\frac{\tau}{2} A_i^h \left(\Phi \left[n + \frac{4-i}{3} \right] + \Phi \left[n + \frac{3-i}{3} \right] \right) \quad (i = 2, 1)$$

(10.1)

El esquema numérico para el problema djunto tiene el mismo intervalo (t_{n-1}, t_{n+1}) la siguiente forma:

$$G \left[n + \frac{3-i}{3} \right] - G \left[n + \frac{4-i}{4} \right] = -\frac{\tau}{2} (A_i^h)^* \left(G \left[n + \frac{3-i}{3} \right] + G \left[n + \frac{4-i}{3} \right] \right) \quad (i = 1, 2)$$

$$\begin{aligned}
 G \left[n - \frac{1}{3} \right] - G \left[n + \frac{1}{3} \right] &= 2\tau P [n] \\
 G \left[n - \frac{4-i}{3} \right] - G \left[n - \frac{3-i}{3} \right] &= -\frac{\tau}{2} (A_i^h)^* \left(G \left[n - \frac{4-i}{3} \right] + G \left[n - \frac{3-i}{3} \right] \right) \quad (i = 2, 1)
 \end{aligned} \tag{10.2}$$

en donde Φ y G son los vectores que aproximan los valores de las funciones (soluciones exactas) ϕ y g en los puntos de malla.

Es preciso notar que de ellos, sólo los vectores $\Phi [n + 1]$, $\Phi [n - 1]$, $G [n + 1]$ y $G [n - 1]$ representan las soluciones numéricas, mientras que los índices fraccionales son vectores auxiliares del método de separación.

Los vectores $Q [n]$ y $P [n]$ aproximan los valores de las funciones Q y P en los puntos de malla en el momento central t_n del intervalo (t_{n-1}, t_{n+1}) . En cada intervalo (t_{n-1}, t_{n+1}) , el algoritmo es absolutamente estable, es decir, estable para cada τ :

$$\|\Phi [n + 1]\| \leq \|\Phi [n - 1]\| + 2\tau \|Q [n]\|, \quad \|G [n - 1]\| \leq \|G [n + 1]\| + 2\tau \|P [n]\| \tag{10.3}$$

Además, en el caso particular (cuando $Q [n] = 0$, $P [n] = 0$, $\mu = 0$, $\sigma = 0$ y $U_n = 0$ en toda la frontera S), los esquemas 10.1 y 10.2 poseen dos leyes de conservación (Skiba, 1997):

$$\|\Phi [n + 1]\| = \|\Phi [n - 1]\|, \quad \|G [n - 1]\| = \|G [n + 1]\| \tag{10.4}$$

y

$$\sum_i \Phi_i [n + 1] V_i = \sum_i \Phi_i [n - 1] V_i, \quad \sum_i G_i [n - 1] V_i = \sum_i G_i [n + 1] V_i \tag{10.5}$$

donde $\Phi_i [k]$ y $G_i [k]$ son las i -ésimas componentes de los vectores $\Phi [k]$ y $G [k]$, respectivamente, y V_i es el volumen elemental del punto de malla correspondiente. Cada una de las

ecuaciones unidimensionales de los esquemas 10.1 y 10.2 se resuelve sin iteraciones utilizando la factorización LU para una matriz tridiagonal (Skiba, 2001,S).

Capítulo 11

Situación de la ZMG

Al igual que en otras metrópolis de nuestro país, la Zona Metropolitana de Guadalajara ha experimentado un acelerado crecimiento poblacional, requiriendo para su funcionamiento el suministro de grandes cantidades de insumos y energéticos y, a la vez, constituyéndose en un polo de intensa actividad industrial, comercial y cultural. Sin embargo, este crecimiento poblacional y económico ha traído consigo también mayores impactos al medio ambiente, y en particular, un aumento en la generación de contaminantes atmosféricos. La severidad del problema de contaminación del Valle de Atemajac puede ilustrarse con el hecho de que en 1996 se rebasó la norma de ozono en el 60 % de los días del año, así como la norma correspondiente a partículas finas del 30 %.

La contaminación atmosférica en la ZMG es un problema de origen multifactorial, destacándose la presencia de un parque vehicular con una edad promedio cercana a los diez años y cuyo estado de mantenimiento es con frecuencia inadecuado. Además, hay un número importante de industrias, comercios y servicios que, como resultado de sus actividades, emiten contaminantes en mayor o menor grado. Por otro lado, las características fisiográficas y

meteorológicas de la región ocasionan que, con frecuencia, no existan condiciones favorables para la dispersión de los contaminantes, por lo que deben necesariamente realizarse esfuerzos que garanticen una disminución de la emisión de los mismos.

La problemática atmosférica de la ZMG, como en la mayor parte de las grandes ciudades del país, se encuentra estrechamente relacionada con su esquema de desarrollo histórico. Hasta antes de los años treinta la ZMG dependía fuertemente de las actividades comerciales y agropecuarias. A partir de 1934 se implementó un modelo de desarrollo que prevaleció hasta hace algunos años; Guadalajara se convirtió en un importante centro comercial y manufacturero, en tanto que el resto del Estado la principal actividad continuaba siendo la agrícola.

La política de estímulos fiscales a las industrias que se instalaron en la ZMG se acompañaron de un intenso proceso de modernización de su vías de comunicación y de su infraestructura de apoyo. En la época de la posguerra de 1945, se abrieron mejores perspectivas para el crecimiento industrial de la ZMG. En el Valle de Atemajac se establecieron nuevas industrias manufactureras relacionadas con las necesidades del mercado norteamericano. Esto provocó un intenso flujo migratorio a partir de 1965, década en la cual el ritmo de crecimiento poblacional fue el más elevado.

A partir de esas fechas se pensó en instalar un corredor industrial entre las ciudades de Ocotlán y La Barca. Durante los años 70's se establecieron en Guadalajara numerosas industrias extranjeras entre las que sobresalen la fotográfica, la cigarrera, la hulera y la productos químicos, que se agregaron a las industrias nacionales de producción de alimentos, bebidas y metalurgia.

Estas circunstancias han determinado que en la actualidad, en los cuatro municipios que constituyen la ZMG, de un total de 177, se concentre más del 50 % de la población estatal, generándose agudas presiones sociales, demográficas y económicas que demandan espacios,

infraestructura y servicios urbanos para satisfacer las necesidades cada vez mayores de una población en rápido crecimiento. Como consecuencia se han generado en la ZMG diversas alteraciones al medio ambiente, destacando por las características urbano-industriales de este asentamiento, la contaminación del aire. Ésta surge como resultado de la existencia de numerosas industrias, por un significativo parque vehicular viejo en mal estado de mantenimiento y por la contribución de polvos de áreas periféricas semiurbanas y rurales con escasa cubierta vegetal.

11.1. Condiciones físicas

La calidad del aire de una cuenca atmosférica depende, en primera instancia, del volumen de contaminantes emitidos, del comportamiento fisicoquímico de éstos y de la dinámica meteorológica que determina su dispersión, transformación y remoción en la atmósfera. La magnitud de las emisiones contaminantes depende a su vez de diversas variables intrínsecas a los múltiples e intensos procesos urbanos que se desarrollan en la ciudad, en un complejo sistema de interacciones.

11.1.1. Condiciones geográficas

La ciudad de Guadalajara, capital del estado de Jalisco es la segunda más grande en México. Su área urbana se ubica en una región geográfica con coordenadas: latitud $20^{\circ}41'N.$, longitud $103^{\circ}20'W.$, altitud 1578 m sobre el nivel del mar. La Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG), con un área de $340 \text{ Km}^2.$, se sitúa principalmente sobre el valle de Atemajac como se muestra en la figura 11.1, al cual rodean los siguientes objetos geográficos. Hacia el Norte y Noreste de la ciudad se localiza una falla geológica conocida como barranca de

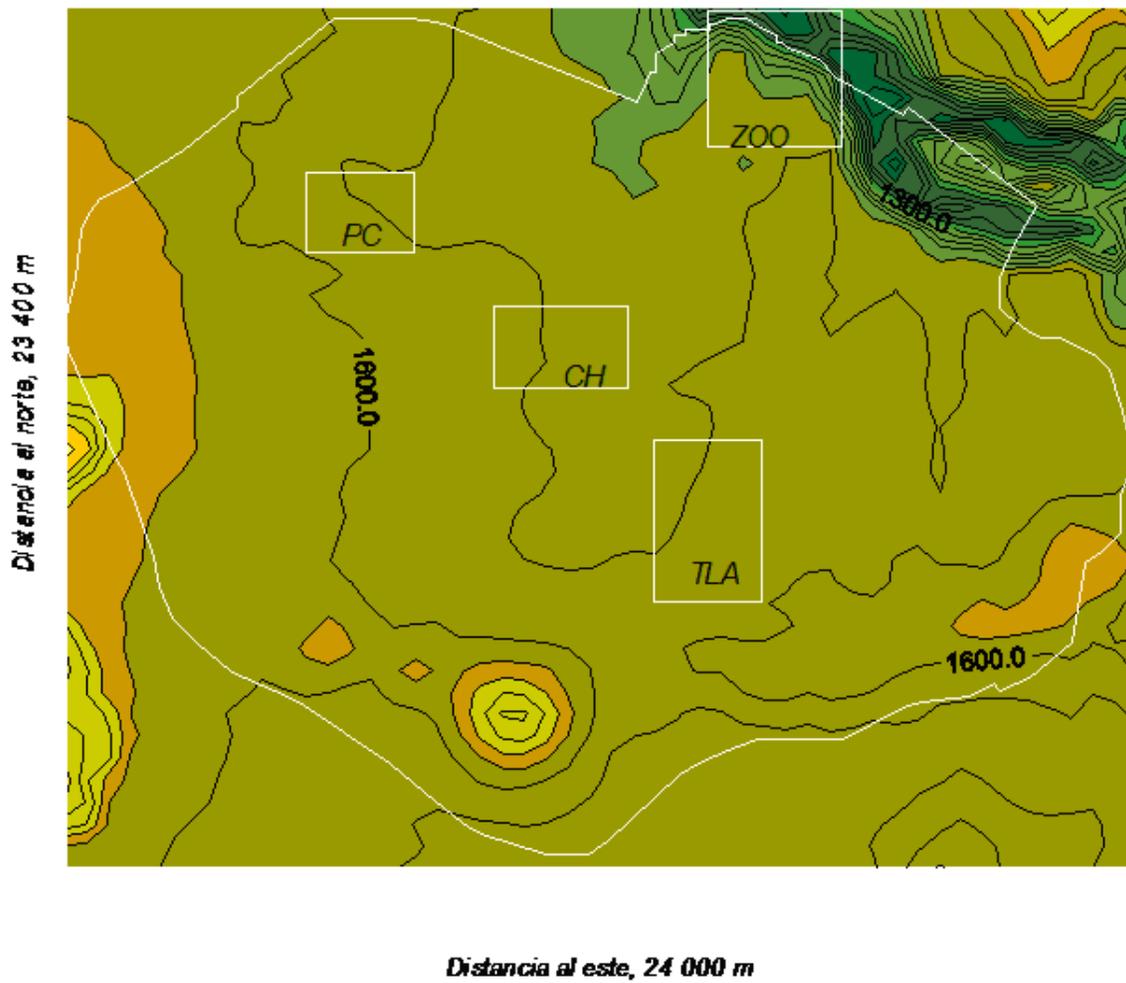


Figura 11.1: Zona Metropolitana de Guadalajara situada sobre el Valle de Atemajac, Jalisco, México, en donde “PC”, “CH”, “TLA” y “ZOO” son las zonas protegidas seleccionadas.

Huentitan-Oblatos el Alto, en el fondo de la cual fluyen los ríos Verde y Santiago. Al este se encuentra un macizo reolítico muy erosionado llamado Sierra de San Esteban. Al sur y sureste el valle de Toluquilla, también considerado parte de la ZMG, de la cual es separado por una pequeña cordillera basáltica y algunos volcanes basálticos, como los cerros La Cúpula, de la Reina o de Tonalá y de Cholo. Al suroeste se encuentran varios cerros de importante altura como el cerro El Cuatro, de las Juntas, Santa María de Tequepexpan y el cerro del Tesoro. Al oeste se limita por la sierra de la venta del Astillero (Díaz, 1946).

Esta cadena de cerros rodea al valle en forma de letra U, determinando su cuenta atmosférica y régimen de los vientos locales. Alrededor de la ciudad se encuentran pocas áreas boscosas, de las cuales la realmente importante y considerada como pulmón de la ciudad se llama bosque La Primavera, localizado en las afueras de la ciudad hacia el sur-suroeste. El bosque (parque) “Los Colomos” se localiza dentro de la urbe y forma la zona verde más importante dentro de la ciudad. Otro objeto geográfico importante que además influye sobre el clima de Guadalajara es el lago de Chapala (con un área de 1112 Km^2), el lago más grande de la República Mexicana, y que se encuentra a escasos 40 Km. al sur-sureste de la ZMG.

11.1.2. Condiciones meteorológicas

La ZMG se encuentra afectada la mayor parte del año por la afluencia de aire marítimo tropical. Sin embargo, en el transcurso del año una gran variedad de fenómenos meteorológicos de escala regional, en superficie y en la atmósfera superior, tienen influencia sobre las condiciones meteorológicas de la zona metropolitana.

La ZMG por estar situada en la región central del país, está sujeta también a la influencia de sistemas anticiclónicos, generados tanto en el Golfo de México como en el Océano Pacífico.

Esos sistemas ocasionan una gran estabilidad atmosférica, inhibiendo el mezclado vertical del aire. Así mismo, recibe una abundante radiación solar debido a su latitud de 20°N, lo que hace que su atmósfera sea altamente fotorreactiva. En presencia de la luz solar, los hidrocarburos y los óxidos de nitrógeno reaccionan fácilmente para formar ozono y otros oxidantes.

La época de invierno (conocida también como “seca”), el anticiclón del Pacífico (es decir la zona de alta presión, con movimiento descendente del aire y vientos débiles en superficie), al bajar de latitud genera vientos occidentales que favorecen la entrada de aire marítimo tropical, con un ligero contenido de humedad, generando lluvias poco importantes. Sin embargo, de manera temporal, la presencia de la Corriente de Chorro (o de vientos máximos) en los niveles superiores de la atmósfera, llega a reflejar una intensificación de los vientos occidentales en superficie y un aumento en el aporte de humedad, generando algunas precipitaciones. Durante la misma época se presentan invasiones de masas de aire frío y seco que penetran por la región norte del país y avanzan hacia la región central, llegando a extenderse hasta la ZMG, provocando descensos de temperatura, algunas heladas y estratificación de las capas atmosféricas, intensificando con ello el fenómeno de la inversión térmica.

En la época de verano (conocida como “de lluvias”) la ZMG se ve afectada por la entrada de aire cálido y húmedo procedente del Océano Pacífico, del Golfo de México y del Mar Caribe, provocando altas temperaturas y favoreciendo el movimiento vertical ascendente del aire disminuyendo con ello la presencia, la intensidad y espesor de las inversiones térmicas. Por otra parte, la influencia del Golfo de México y Mar Caribe se manifiestan con un aumento de humedad en la ZMG, debido al constante avance de ondas tropicales, provocando importantes cantidades de lluvia y vientos de componente oriental.

En el caso del Océano Pacífico, el transporte de humedad es favorecido por el desplazamiento de masas de aire hacia latitudes mayores de la zona intertropical de convergencia, la

que al activarse ocasiona fuertes desprendimientos de humedad hacia los estados del Pacífico central, generando un aumento de cielos nublados e intensas precipitaciones. Durante la misma época se desarrollan importantes sistemas tropicales sobre el Océano Pacífico oriental, como son las perturbaciones, depresiones, tormentas tropicales y huracanes. Dichos sistemas llegan a provocar, de acuerdo a su circulación ciclónica y cercanía a la tierra, la entrada de bandas nubosas y altas cantidades de precipitación con una intensificación de los vientos, los cuales llegan a la ZMG ligeramente degradados.

Las inversiones térmicas provocan el estancamiento de los contaminantes. Por la noche y temprano en las mañanas, la capa de aire que se encuentra en contacto con la superficie del suelo adquiere una temperatura menor que las capas superiores, volviéndose más densa y pesada. Las capas de aire que se encuentran a mayor altura y que están relativamente más calientes, actúan entonces como una cubierta que impide el movimiento ascendente del aire contaminado.

La información de frecuencias de ocurrencia de la inversión térmica muestra que ésta se presenta en la ZMG durante 283 días del año, es decir un 78 % de los días, siendo los periodos de enero a junio y noviembre a diciembre, cuando su presencia se da prácticamente en todos los días del mes. Para los meses de julio a octubre, su frecuencia llega a ser menor al 50 % de los días del mes.

Asimismo, la inversión térmica alcanza sus valores más altos de intensidad en el mismo período en que se presenta con mayor incidencia; esto es, las épocas de invierno-primavera y la mayor parte del otoño. En diciembre, la intensidad de la inversión térmica ha llegado a presentar valores máximos de hasta 12°C. Durante la mayor parte del periodo de lluvias, de junio a septiembre, e inclusive octubre, la intensidad promedio mensual de las inversiones térmicas es menor a 1°C.

El espesor de la inversión térmica es típicamente de decenas a algunos centímetros, siendo mayor en la época de secas y relacionada con temperaturas de rupturas de cerca de 13°C para los meses más fríos del año (enero y febrero).

11.2. Calidad del aire

Los antecedentes sobre el monitoreo de la calidad del aire en la ZMG, como en el caso de las Ciudades de México y Monterrey, datan de 1973, año en el cual el Gobierno de la República y las Naciones Unidas iniciaron un proyecto que incluyó el diagnóstico de la calidad del aire, la elaboración del inventario de emisiones, el monitoreo atmosférico, el análisis del costo beneficio del control de la contaminación del aire, la capacitación de personal, el desarrollo de programas de prevención y control, entre otras acciones.

Formalmente, el monitoreo de la calidad del aire en la ZMG se inició en 1975, interrumpiéndose cuatro años más tarde. Años después se rehabilitó la red manual y hasta 1991 estuvo constituida por 15 estaciones donde se muestreaba principalmente, partículas suspendidas totales y plomo. Fue hasta el año de 1993 que se puso en marcha la actual red automática de medición continua.

La Red Automática de Monitoreo Ambiental (RAMA) cuenta con 8 estaciones: Vallarta, Centro, Miravalle y Oblatos (en el municipio de Guadalajara), Atemajac y Águilas (en el municipio de Zapopan), Loma Dorada (municipio de Tonalá) y Tlaquepaque (en el municipio del mismo nombre). Esta red reporta los registros horarios de cinco contaminantes: ozono, monóxido de carbono, dióxido de nitrógeno, dióxido de azufre y partículas suspendidas.

El Índice Metropolitano de la Calidad del Aire (IMECA) es un valor de referencia para que la población conozca los niveles de contaminación prevalentes en su zona de residen-

cia, de manera precisa y oportuna, permitiendo que tome las medidas pertinentes para su protección. Cuando el IMECA de cualquier contaminante rebasa los 100 puntos, significa que

Cuadro 11.1: IMECA y sus efectos en la salud.

IMECA	CONDICIÓN	EFFECTOS A LA SALUD
0-50	Buena	Adecuada para llevar a cabo actividades al aire libre.
51-100	Regular	Posibles molestias en niños, adultos mayores y personas con enfermedades.
101-150	Mala	Causante de efectos adversos a la salud en la población, en particular a los niños y los adultos mayores con enfermedades cardiovasculares y/o respiratorias como el asma.
151-200	Muy mala	Causante de mayores efectos adversos a la salud en la población en general, en particular a los niños y adultos mayores con enfermedades cardiovasculares y/o respiratorias como el asma.
>200	Extremadamente mala	Causante de efectos totalmente adversos a la salud de la población en general. Se pueden presentar complicaciones graves en los niños y adultos mayores con enfermedades cardiovasculares y/o respiratorias como el asma.

sus niveles son perjudiciales para la salud y a medida que aumenta el valor se agudizan los síntomas, como se muestra en el cuadro 11.1.

Los intervalos del IMECA, se realizan con funciones lineales (cuadro 11.2), los valores que aparecen en los intervalos de cada contaminante, se refieren a múltiplos del límite que señala la Norma Oficial Mexicana (NOM) de Salud Ambiental. La excepción son las PM_{2.5}, para las cuales se emplean los intervalos propuestos por la Agencia de Protección Ambiental de

Cuadro 11.2: Ecuaciones empleadas para calcular el IMECA

Partículas menores a 10 micrómetros (PM_{10})		
IMECA	CONCENTRACIONES $\mu g/m^3$	ECUACIONES
0-50	0-60	$I[PM_{10}] = C[PM_{10}] \star 5/6$
51-100	61-120	
101-150	121-220	$I[PM_{10}] = 40 + C[PM_{10}] \star 0,5$
151-200	221-320	
>201	>320	$I[pm_{10}] = C[PM_{10}] \star 5/8$
Ozono (O_3)		
IMECA	CONCENTRACIONES	ECUACIONES
0-50	0-0.055	$I[O_3] = C[O_3] \star 100/0,11$
51-100	0.056-0.110	
101-150	0.111-0.165	
151-200	0.166-0.22	
>200	>0.220	
Dióxido de Nitrógeno (NO_2)		
IMECA	CONCENTRACIONES ppm	ECUACIONES
0-50	0-0.105	$I[NO_2] = C[NO_2] \star 50/0,105$
51-100	0.106-0.210	$I[NO_2] = 1,058 + C[NO_2] \star 49/0,104$
101-150	0.211-0.315	$I[NO_2] = 1,587 + C[NO_2] \star 49/0,104$
151-200	0.316-0.420	$I[NO_2] = 2,115 + C[NO_2] \star 49/0,104$
>200	>0.420	$I[NO_2] = C[NO_2] \star 201/0,421$
Dióxido de Azufre (SO_2)		
IMECA	CONCENTRACIONES ppm	ECUACIONES
0-50	0-0.065	$I[SO_2] = C[SO_2] \star 100/0,13$
51-100	0.066-0.130	
101-150	0.131-0.195	
151-200	0.196-0.260	
>200	>0.260	
Monóxido de Carbono (CO)		
IMECA	CONCENTRACIONES ppm	ECUACIONES
0-50	0-5.50	$I[CO] = C[CO] \star 50/5,50$
51-100	5.51-11.00	$I[CO] = 1,82 + C[CO] \star 49/5,49$
101-150	11.01-16.50	$I[CO] = 2,73 + C[CO] \star 49/5,49$
151-200	16.51-22.00	$I[CO] = 3,64 + C[CO] \star 49/5,49$
>200	>22.00	$I[CO] = C[CO] \star 201/22,01$

los Estados Unidos de América, (USEPA por sus siglas en inglés), estas normas se muestran en el cuadro 11.3.

Cuadro 11.3: Normas Oficiales Mexicanas de Salud Ambiental

Contaminante	Valores Límite			
	Exposición aguda		Exposición crónica	
Norma Oficial Mexicana ⁱ	Concentración y tiempo promedio	Frecuencia máxima aceptable	Concentración y tiempo promedio	Concentración y tiempo promedio
Ozono NOM-020-SSA1-1993	0.11 ppm (1 hora)	1 vez al año cada 3 años ⁱⁱ	>0.08 ppm ⁱⁱⁱ (máximo diario de promedios móviles de 8 horas)	>4 veces al año
Monóxido de Carbono NOM-021-SSA1-1993	11 ppm (máximo diario de promedios móviles de 8 horas)	1 vez al año		
Bióxido de Azufre NOM-022-SSA1-1993	0.13 ppm (24 horas)	1 vez al año	0.03 ppm (promedio anual)	
Bióxido de Nitrógeno NOM-023-SSA1-1993	0.21 ppm (1 hora)	1 vez al año		
Partículas Suspendidas Totales NOM-024-SSA1-1993	260 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (24 horas)	1 vez al año	75 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (promedio anual)	
Partículas menores a 10 μm NOM-025-SSA1-1993	150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (24 horas)	1 vez al año	50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (promedio anual)	

i Publicadas en el Diario Oficial de la Federación el 23 de diciembre de 1994.

ii En la modificación de la norma se plantea 1 vez al año, por publicarse en el Diario Oficial de la Federación.

iii Publicada en el Diario Oficial de la Federación el 12 de agosto de 2002.

Para resaltar la importancia de los estudios y control sobre la calidad del aire, se muestran los resultados del monitoreo ambiental de la ZMG. Se presenta un concentrado con los valores para el periodo 2001-2004 (Véase cuadro 11.4).

Cuadro 11.4: Concentrado comparativo de los niveles máximos de calidad del aire registrados en la ZMG. Periodo: Enero-Diciembre del 2001 al 2004. (SEMADES, 2004).

Parámetro	2001	2002	2003	2004
No. de días muestreados	365	365	365	366
Promedio en el periodo (IMECA)	89	93	88	88
No. de días en que se violó la Norma	111	125	119	99
Porcentaje de violación a la Norma	30 %	34 %	33 %	25 %
No. de días con valores arriba de 150 IMECA	2	6	8	8
No. de días con valores arriba de 250	0	0	0	0
Nivel IMECA máximo registrado	169	200	187	195
Mes con mayor índice de contaminación	febrero	mayo	mayo	noviembre
Mes con menor índice de contaminación	agosto	septiembre	agosto	agosto
Nivel IMECA mínimo registrado	42	40	38	40

En el cuadro 11.4, se muestra que en la ZMG, el porcentaje de violación a la norma, va desde el 25 % hasta el 35 %, y para tener mayor información al respecto, se muestra a continuación los niveles de concentración por estaciones.

Al comparar los resultados del periodo 2002-2004, con un estudio previo realizado para la misma zona de estudio pero en 1994-1999 (Lopez y Guerrero, 2004). Se observa que en 1994 se registro un 70 % de los días con la calidad de aire no satisfactoria a mala, en 1995 son 74 %, en 1996 es 77 % y en 1998 y 1999 es 68 %. Esto muestra una mejoría para el periodo 2002-2004, teniendo una notable reducción del porcentaje de los días con calidad no satisfactoria a mala.

Como se observa en las figuras, se ha logrado una reducción importante en lo que a bióxido de azufre, bióxido de nitrógeno y monóxido de carbono se refiere. Sin embargo la actual calidad del aire requiere atención y medidas de control, dado que más de 27 millones de habitantes (en todo el país) están expuestos a concentraciones de ozono y partículas que

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	50	0.055	148	0.169	7	0	0
Atemajac	58	0.063	134	0.152	12	0	0
Centro	61	0.067	146	0.166	14	0	0
L. Dorada	56	0.062	194	0.225	18	1	0
Miravalle	53	0.058	200	0.232	29	3	0
Oblatos	60	0.066	139	0.158	20	0	0
Tlaquepaque	43	0.047	126	0.142	6	0	0
Vallarta	61	0.067	150	0.171	26	0	0

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	57	0.062	145	0.165	14	0	0
Atemajac	52	0.057	161	0.185	14	1	0
Centro	60	0.066	150	0.171	25	0	0
L. Dorada	52	0.058	169	0.195	24	1	0
Miravalle	57	0.063	194	0.225	22	1	0
Oblatos	N.D. ³	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.
Tlaquepaque	46	0.051	132	0.149	9	0	0
Vallarta	56	0.062	187	0.217	15	0	0

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	53	0.058	144	0.164	9	0	0
Atemajac	50	0.055	145	0.165	4	0	0
Centro	55	0.061	138	0.157	6	0	0
L. Dorada	58	0.064	171	0.197	21	3	0
Miravalle	51	0.056	195	0.226	8	1	0
Oblatos	N.D. ³	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.
Tlaquepaque	54	0.059	123	0.138	11	0	0
Vallarta	53	0.058	153	0.175	8	0	0

Figura 11.2: Concentrado de niveles IMECA de máximos de Ozono en la ZMG en el 2002, 2003 y 2004 respectivamente. (SEMADES, 2002,S,S).

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	36	0.075	82	0.172	3	3	0
Atemajac	33	0.070	99	0.208	18	18	0
Centro	40	0.084	99	0.208	0	0	0
L. Dorada	34	0.071	112	0.264	3	0	0
Miravalle	22	0.046	69	0.145	0	0	0
Oblatos	21	0.044	53	0.111	0	0	0
Tlaquepaque	34	0.071	88	0.185	0	0	0
Vallarta	27	0.057	99	0.208	0	0	0

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	38	0.081	112	0.264	1	0	0
Atemajac	28	0.060	68	0.143	0	0	0
Centro	34	0.070	70	0.147	0	0	0
L. Dorada	33	0.068	88	0.185	0	0	0
Miravalle	25	0.052	83	0.174	0	0	0
Oblatos	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.
Tlaquepaque	28	0.059	70	0.147	0	0	0
Vallarta	28	0.059	167	0.510	2	1	0

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	29	0.060	67	0.141	0	0	0
Atemajac	27	0.058	66	0.139	0	0	0
Centro	26	0.055	63	0.132	0	0	0
L. Dorada	28	0.058	109	0.250	3	0	0
Miravalle	26	0.054	73	0.153	0	0	0
Oblatos	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.
Tlaquepaque	25	0.052	79	0.166	0	0	0
Vallarta	25	0.053	76	0.160	0	0	0

Figura 11.3: Concentrado de niveles IMECA de máximos de Bióxido de nitrógeno en la ZMG en el 2002, 2003 y 2004 respectivamente. (SEMADES, 2002,S,S).

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	N° de Días Fuera de Norma	N° de Días arriba de 150 IMECA	N° de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	23	2.95	73	9.49	0	0	0
Atemajac	29	3.71	76	9.88	0	0	0
Centro	30	3.94	93	12.09	0	0	0
L. Dorada	34	4.41	91	11.83	0	0	0
Miravalle	29	3.81	110	13.92	1	0	0
Oblatos	26	3.34	81	10.53	0	0	0
Tlaquepaque	32	4.17	146	17.25	3	0	0
Vallarta	22	2.90	62	8.06	0	0	0

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	N° de Días Fuera de Norma	N° de Días arriba de 150 IMECA	N° de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	26	3.35	74	9.62	2	2	0
Atemajac	27	3.52	91	11.83	0	0	0
Centro	32	4.21	120	14.85	3	0	0
L. Dorada	34	4.45	65	8.45	0	0	0
Miravalle	30	3.90	74	9.62	0	0	0
Oblatos	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.
Tlaquepaque	31	4.04	121	14.94	2	0	0
Vallarta	24	3.11	71	9.23	0	0	0

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	N° de Días Fuera de Norma	N° de Días arriba de 150 IMECA	N° de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	24	3.15	50	6.50	0	0	0
Atemajac	27	3.54	74	9.62	0	0	0
Centro	31	4.01	109	13.83	1	0	0
L. Dorada	29	3.77	80	10.40	0	0	0
Miravalle	23	2.93	159	18.46	3	2	0
Oblatos	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.
Tlaquepaque	32	4.12	85	11.05	0	0	0
Vallarta	22	2.92	47	6.11	0	0	0

Figura 11.4: Concentrado de niveles IMECA de máximos de Monóxido de carbono en la ZMG en el 2002, 2003 y 2004 respectivamente. (SEMADES, 2002,S,S).

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	9	0.012	20	0.026	0	0	0
Atemajac	10	0.013	16	0.021	0	0	0
Centro	10	0.012	29	0.038	0	0	0
L. Dorada	4	0.006	17	0.022	0	0	0
Miravalle	13	0.017	42	0.055	0	0	0
Oblatos	6	0.007	12	0.016	0	0	0
Tlaquepaque	6	0.008	27	0.035	0	0	0
Vallarta	8	0.010	20	0.026	0	0	0

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	26	3.35	74	9.62	2	2	0
Atemajac	27	3.52	91	11.83	0	0	0
Centro	32	4.21	120	14.85	3	0	0
L. Dorada	34	4.45	65	8.45	0	0	0
Miravalle	30	3.90	74	9.62	0	0	0
Oblatos	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.
Tlaquepaque	31	4.04	121	14.94	2	0	0
Vallarta	24	3.11	71	9.23	0	0	0

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	13	0.017	60	0.078	0	0	0
Atemajac	9	0.012	17	0.022	0	0	0
Centro	12	0.015	44	0.057	0	0	0
L. Dorada	8	0.011	31	0.040	0	0	0
Miravalle	9	0.012	33	0.043	0	0	0
Oblatos	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.
Tlaquepaque	6	0.008	22	0.029	0	0	0
Vallarta	8	0.010	27	0.035	0	0	0

Figura 11.5: Concentrado de niveles IMECA de máximos de Bióxido de azufre en la ZMG en el 2002, 2003 y 2004 respectivamente. (SEMADES, 2002,S,S).

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual ($\mu\text{gr}/\text{m}^3$)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada ($\mu\text{gr}/\text{m}^3$)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	39	39.4	99	148	0	0	0
Atemajac	38	38.3	80	110	0	0	0
Centro	46	46.1	129	208	6	0	0
L. Dorada	71	91.0	142	234	41	0	0
Miravalle	70	90.2	190	330	36	2	0
Oblatos	38	38.1	76	102	0	0	0
Tlaquepaque	58	66.8	133	216	12	0	0
Vallarta	38	38.1	92	134	0	0	0

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual (PPM)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada (PPM)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	10	0.013	22	0.029	0	0	0
Atemajac	10	0.013	31	0.040	0	0	0
Centro	9	0.012	26	0.034	0	0	0
L. Dorada	6	0.008	40	0.052	0	0	0
Miravalle	14	0.018	46	0.060	0	0	0
Oblatos	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.
Tlaquepaque	6	0.008	23	0.030	0	0	0
Vallarta	8	0.011	28	0.036	0	0	0

Estación	Promedio Aritmético Anual (IMECA)	Concentración Promedio Anual ($\mu\text{gr}/\text{m}^3$)	IMECA Máximo Registrado	Concentración Máxima Registrada ($\mu\text{gr}/\text{m}^3$)	Nº de Días Fuera de Norma	Nº de Días arriba de 150 IMECA	Nº de Días Arriba de 250 IMECA
Las Águilas	38	38.5	107	164	1	0	0
Atemajac	30	29.9	89	128	0	0	0
Centro	41	41.5	90	130	0	0	0
L. Dorada	63	75.8	134	218	20	0	0
Miravalle	63	75.6	152	254	25	1	0
Oblatos	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.
Tlaquepaque	52	53.4	128	206	12	0	0
Vallarta	44	44.0	97	144	0	0	0

Figura 11.6: Concentrado de niveles IMECA de máximos de PM10 en la ZMG en el 2002, 2003 y 2004. (SEMADES, 2002,S,S).

frecuentemente exceden las normas de calidad del aire establecidas por la Secretaría de Salud, (SEMARNAT e INE, 2006).

La flota vehicular en el país prácticamente podría duplicarse en los próximos 15 años; este crecimiento manteniendo las condiciones actuales, implicaría un crecimiento considerable en las emisiones de contaminantes a la atmósfera, lo que a su vez conllevaría a un mayor deterioro de la calidad del aire (SEMARNAT e INE, 2006).

En el análisis realizado por (SEMARNAT e INE, 2006) se muestra que el mejoramiento de la calidad de los combustibles, a la par de la introducción de nuevas tecnologías vehiculares, reduciría en 91 %, 50 %, 28 % y 45 % las emisiones a nivel nacional de SO_2 , NO_x , HC y $PM_{2,5}$ respectivamente, para el año 2020 con respecto al escenario base (sin control). Estas reducciones redundarían en una mejor calidad del aire que, a su vez, se asociaría con una reducción de cerca de 55,000 muertes prematuras, 166 mil casos de bronquitis crónica, 5.6 millones de días de trabajo perdidos y 7.8 millones de días de actividad restringida por enfermedades respiratorias, todo ello durante el periodo 2005-2030.

Capítulo 12

Resultados numéricos y discusión

En los experimentos numéricos como primera etapa se seleccionaron dos zonas ecológicamente significativas en la Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG): el “Parque Colomos” y el “Centro Histórico”, denotados en las figuras como la zona *PC* y la zona *CH*, repectivamente (figura 12.1).

El “Parque Colomos” es la principal área verde de la zona urbana, en donde la ciudadanía desarrolla actividades deportivas y de turismo, mientras que el “Centro Histórico” es la zona turística, comercial y de mayor densidad de población que cuenta con monumentos, edificios y otros atractivos turísticos.

Debido a graves problemas de contaminación atmosférica, estos monumentos históricos sufren serios procesos de corrosión y como consecuencia, requieren gran apoyo económico para su mantenimiento y restauración. Por lo tanto, es muy importante definir las fuentes básicas de contaminantes que afectan estas zonas y controlar sus emisiones con el fin de evitar situaciones ecológicas severas cuando la concentración de un contaminante supera la norma sanitaria establecida.

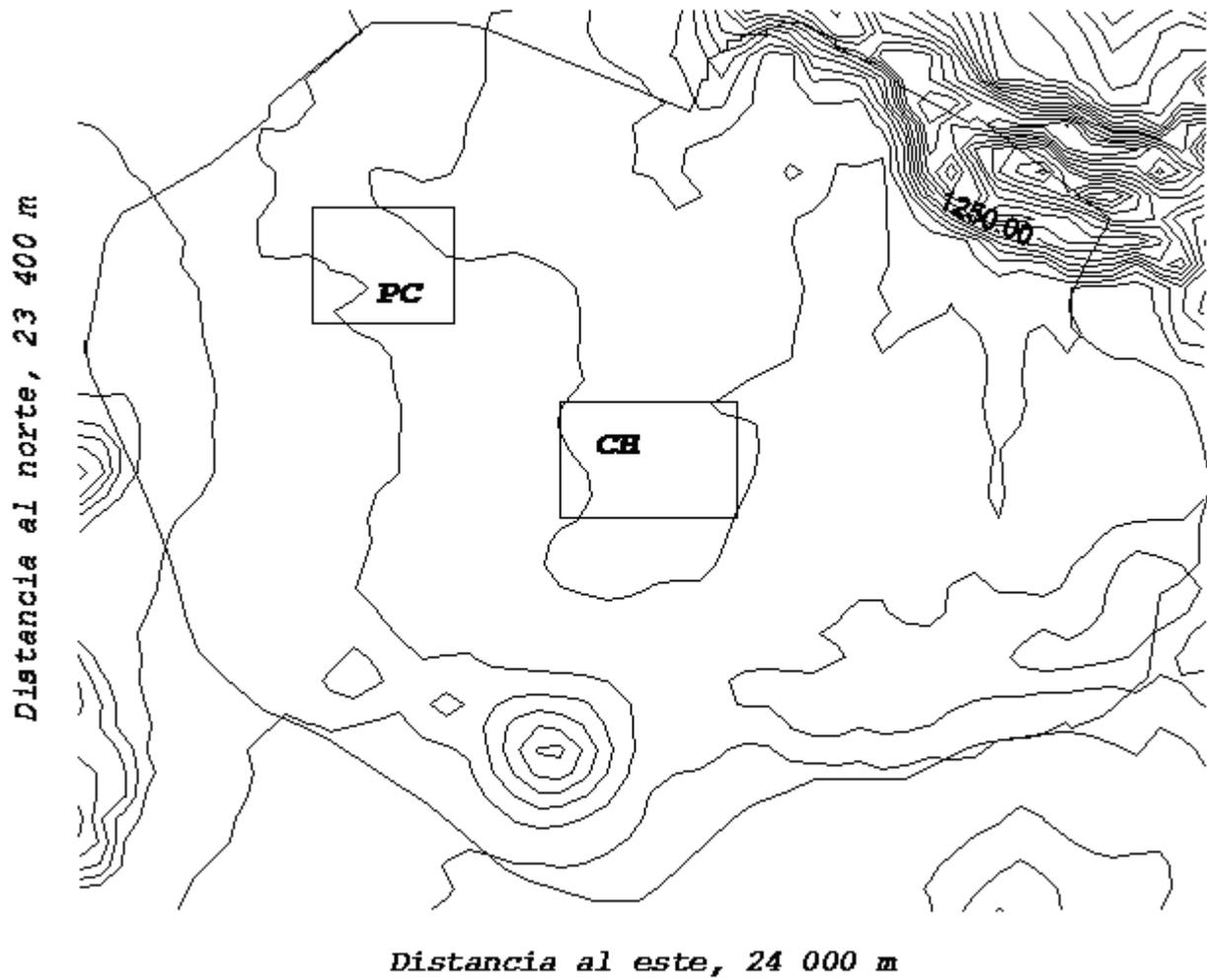


Figura 12.1: Plano de la Cd. de Guadalajara con la ubicación de dos zonas ecológicamente importantes, a saber, el Parque Colomos (*PC*) y el Centro Histórico (*CH*).

Uno de los objetivos de los experimentos numéricos descritos en esta sección fue aplicar el modelo bidimensional 10.1 para resolver el problema 3.1-3.5 de transporte de bióxido de azufre en la ZMG. Se usaron dos tipos de viento climático en los experimentos numéricos para la ZMG: el viento tipo I característico para la temporada húmeda (junio-septiembre) y el viento tipo II característico para la temporada seca (octubre-mayo). Los campos de ambos tipos del viento fueron obtenidos basándose en los datos del archivo climatológico de la Zona Metropolitana de Guadalajara creado en un periodo de 1881 a 1999 (Davydova y Skiba, 1999,D). El coeficiente $\sigma = \sigma_s + \sigma_h + \sigma_o$ del modelo de transporte y difusión de SO_2 toma en cuenta las tres velocidades (de depositación seca σ_s y húmeda σ_h , y de oxidación σ_o), considerando que $\sigma_s \ll \sigma_h$ para la temporada húmeda (Stockwell y Calvert, 1983,M,S). La velocidad de depositación seca para el SO_2 tiene la variación diurna: de 0.5 a 1.2 cm/s según (Boubel et al, 1994), y de 0.5 a 1.0 cm/s según (Hidy, 1994). Para los experimentos que fueron realizados en este trabajo se asumió el valor de la velocidad media de depositación seca igual a 1.0 cm/s (Seinfeld y Pandis, 1998). La complejidad de estimación de la velocidad de depositación húmeda consiste en una variedad de parámetros involucrados: solubilidad del contaminante en agua, condiciones meteorológicas presentes (niebla, lluvia o nieve), intensidad de precipitación observada, humedad relativa, intercepción de gases en las nubes y altura de la capa baja de nubes (Chamberlain, 1953,S). Consideremos aquí el valor promedio aproximado del coeficiente σ_h . Bajo las condiciones de tropósfera en fase gaseosa, el bióxido de azufre reacciona con el hidróxilo ($OH\cdot$) formando trióxido de azufre y posteriormente ácido sulfúrico. Es la reacción dominante en transformaciones de bióxido de azufre que tienden a disminuir su concentración (Stockwell y Calvert, 1983). Resumiendo, en los experimentos se usa el coeficiente σ que corresponde a la tase de extracción de 8-9 % por hora para la temporada seca, y de 13-14 % por hora para temporada húmeda.

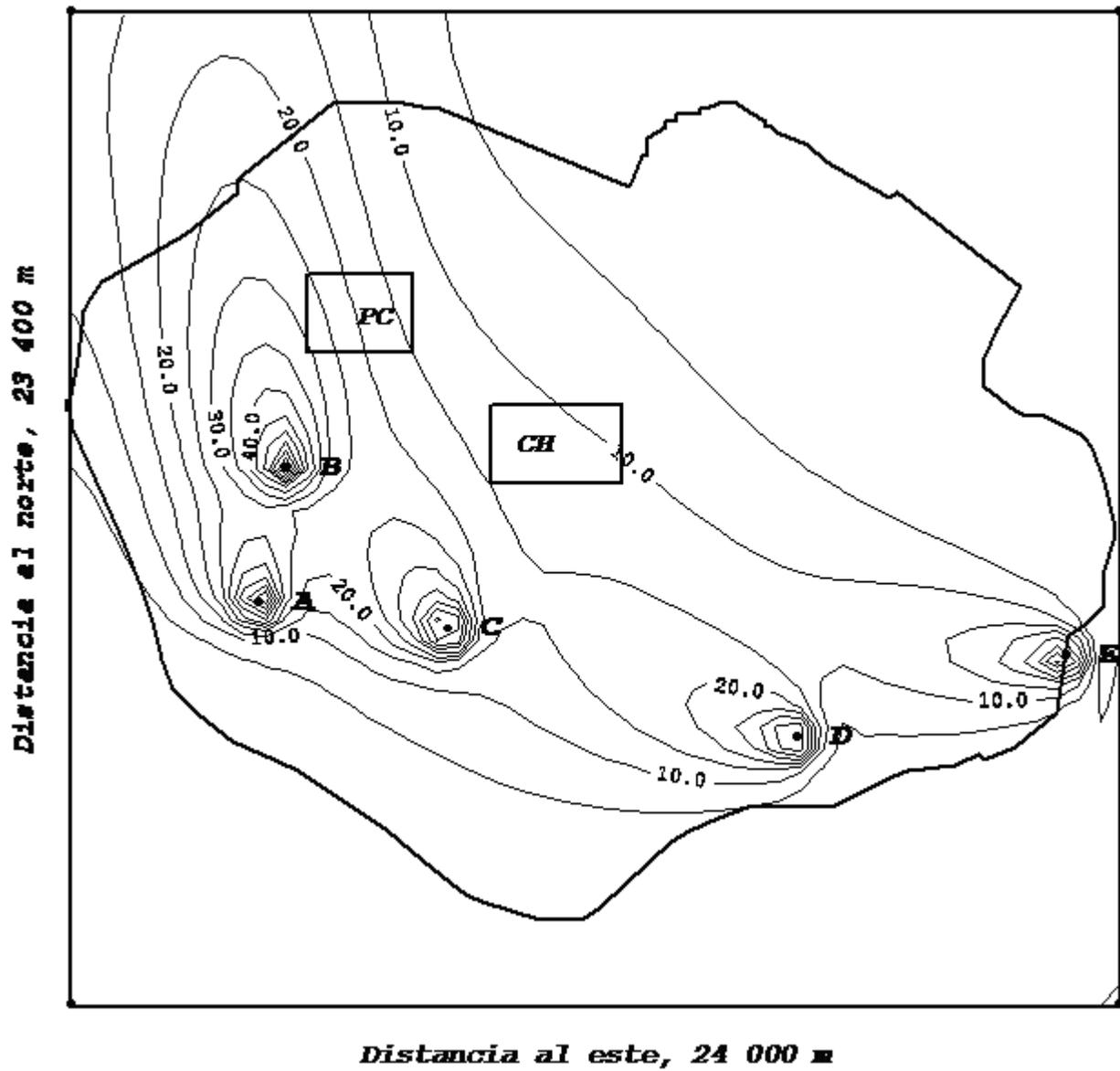


Figura 12.2: Isolíneas de la solución $\phi(r,t)$ del problema de transporte 3.1-3.5 en la ZMG para el viento tipo I (temporada húmeda).

Las isolneas de la solución $\phi(r, t)$ del problema de transporte 3.1-3.5 en el momento $t = 90 \text{ min.}$ se presentan en la figura 12.2 (para el viento tipo I, temporada húmeda) y en la figura 12.3 (para el viento tipo II, temporada seca).

En cada experimento fueron elegidas cinco fábricas como fuentes de bióxido de azufre. Las ubicaciones de las fábricas que contaminan significativamente las zonas PC y CH se indican en las figuras con los puntos A, B, C, D, E, F y H (A - fábrica en Zapopan Sur, B - aceitera próxima a la Plaza de México, C - fábrica en la Zona Industrial, D - fábrica en Tlaquepaque, E - ladrillera en Loma Dorada, Tonala, F - fábrica en el suroeste de la ZMG, H - fábrica en la Ciudad Granja).

Se puede observar que durante cada temporada, las emisiones afectan de manera importante a las zonas PC y CH y es posible notar que en presencia de las fuentes elegidas, la zona PC resulta más contaminada que la CH . Sin embargo, en la práctica, es de gran interés e importancia tener información sobre la contribución de cada fuente (cada fábrica) en el nivel promedio de contaminación $J(\phi)$ (veáse las fórmulas 7.1 y 7.3) en cada una de las zonas (PC y CH). Es preciso notar que tal contribución es difícil de estimar usando sólo soluciones del modelo directo 3.1-3.5.

De otra parte, es bastante fácil calcular dicha contribución mediante soluciones del modelo adjunto 6.1-6.4 usando las fórmulas 7.1 o 7.3. Con este fin, se hallan soluciones del modelo adjunto 6.1-6.4 tanto para la zona PC como para la zona CH . Recordamos que el modelo adjunto se corre en el intervalo $[0, T]$ en la dirección de tiempo opuesta (es decir, del momento “final” $t = T$ al momento “inicial” $t = 0$), donde $T = 360 \text{ min.}$ En las siguientes figuras , se presentan isolneas de la solución $g(r, t)$ del problema 6.1-6.4 calculada para la zona PC con el viento tipo I para los momentos $t = T - 60 \text{ min.}$ (figura 12.4) y $t = T - 90 \text{ min.}$ (figura 12.5)

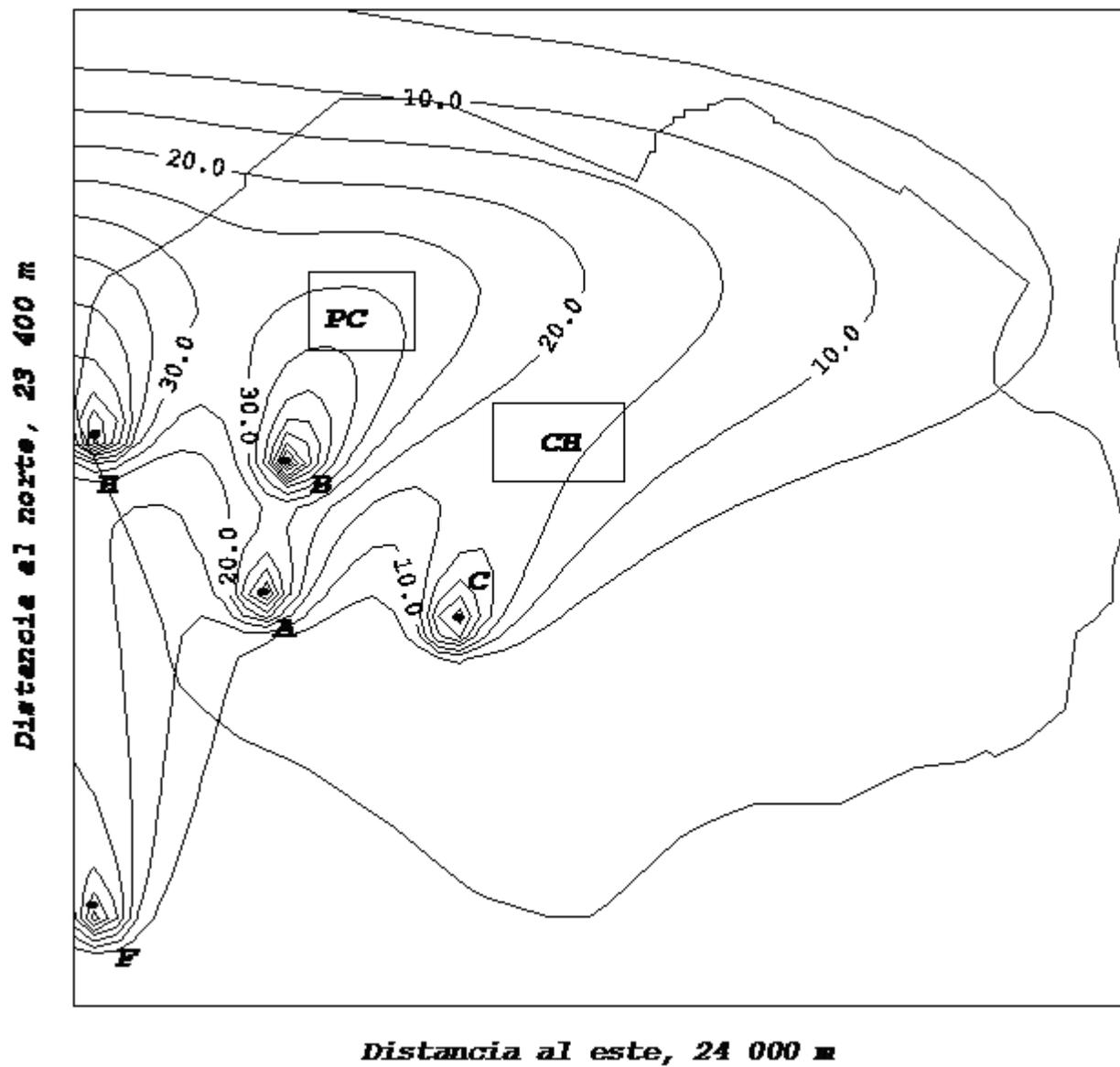


Figura 12.3: Isolíneas de la solución $\phi(r,t)$ del problema de transporte 3.1-3.5 en la ZMG para el viento tipo II (temporada seca).

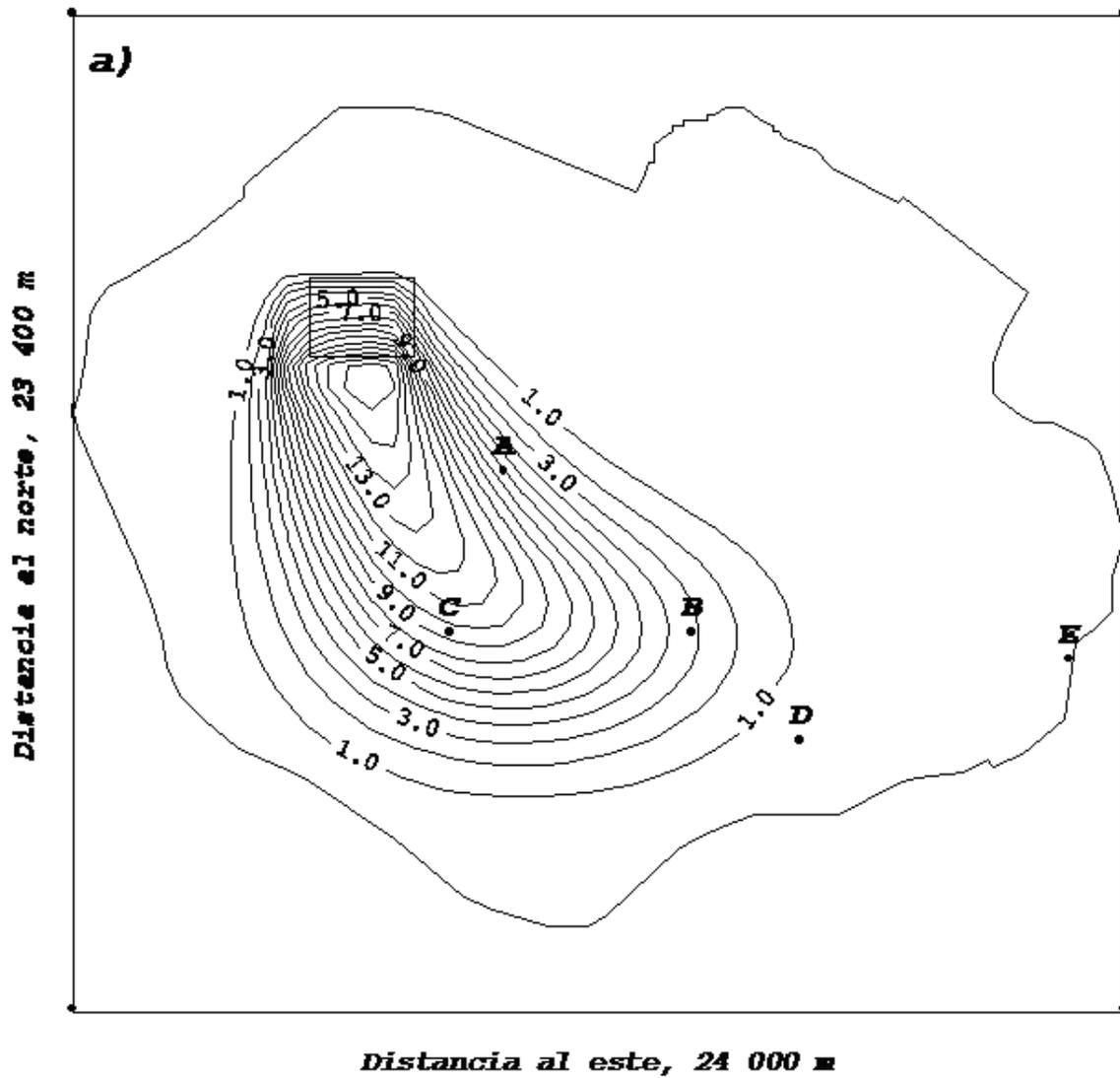


Figura 12.4: Isolíneas de la solución $g(r,t)$ del problema adjunto 6.1-6.4 para la zona PC y el viento tipo I (temporada húmeda) para el momento $t = T - 60 \text{ min}$.

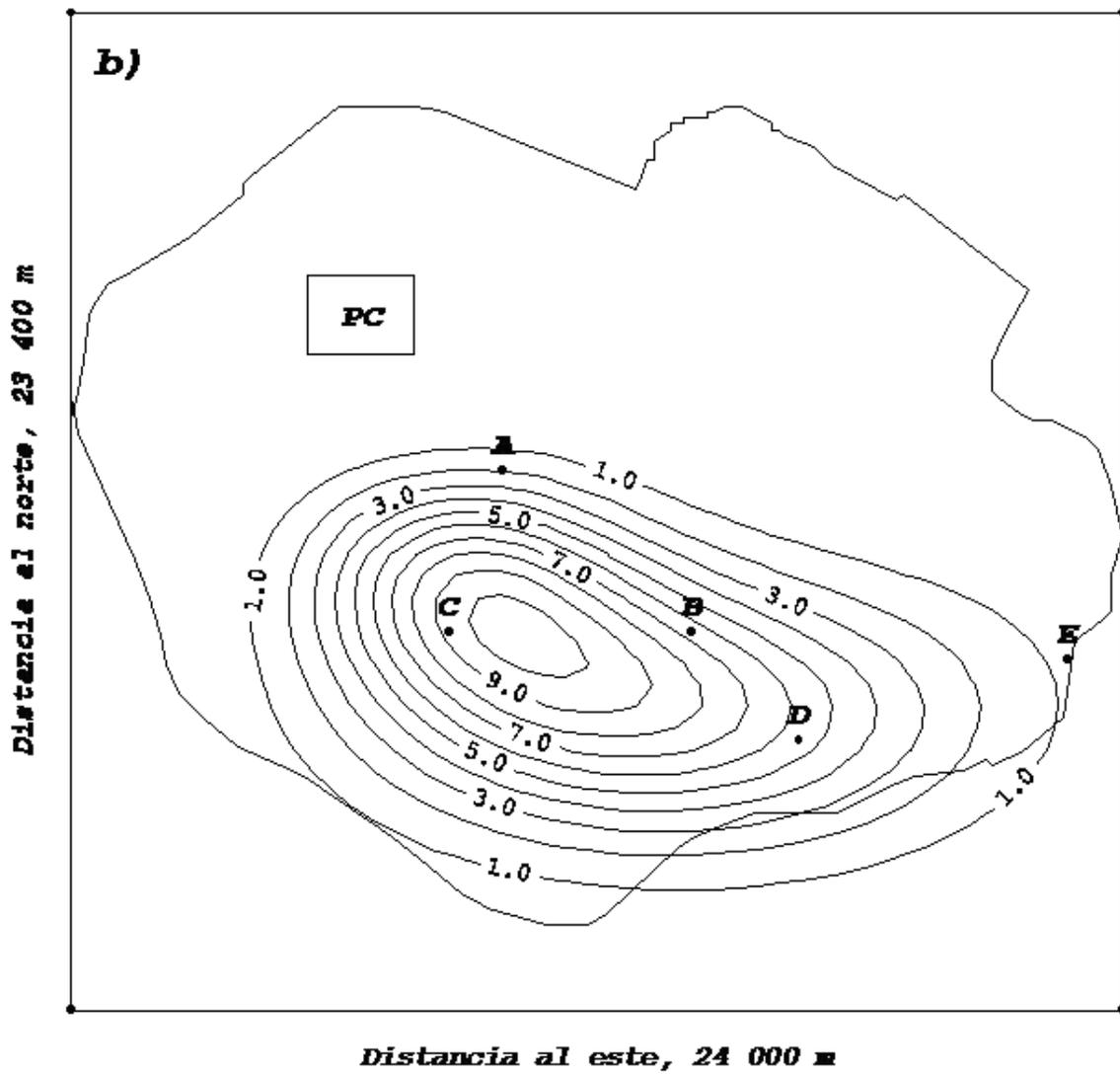


Figura 12.5: Isolíneas de la solución $g(r, t)$ del problema adjunto 6.1-6.4 para la zona PC y el viento tipo I (temporada húmeda) para el momento $t = T - 90 \text{ min}$

Para el viento tipo II, las isoclinas correspondientes $g(r, t)$ en los mismos dos momentos se presentan en las figuras 12.6 y 12.7

Según las fórmulas 7.1 y 7.3, el nivel de contaminación en la zona PC (o en la zona CH) depende de la tasa de emisión $Q_i(t)$ de la i -ésima fábrica a través de los valores $g(r_i, t)$ de la solución del modelo adjunto en el punto de ubicación r_i de la fábrica. Así, para cada i , ($i = 1, 2, \dots, N$), función no negativa $g(r_i, t)$ sirve en la fórmula 7.1 como una función de peso para la tasa de emisión $Q_i(t)$ y su comportamiento temporal es de gran importancia para determinar las fábricas que contaminan más la zona elegida.

Las curvas en las figuras 12.8 y 12.9 muestran el comportamiento temporal de dichas funciones de peso $g(r_i, t)$ para cada fábrica. Se puede ver que para cada r_i , la función $g(r_i, t)$ varía con tiempo y es distinto del cero sólo en cierto intervalo de tiempo. Se puede observar que la contribución de una u otra fábrica en la contaminación de la zona PC depende del viento. Por ejemplo, se deduce de la figura 12.8 que dentro de la temporada húmeda, la fábrica C ubicada en la Zona Industrial contamina la zona PC más que otras, mientras que la fábrica A ubicada en Zapopan Sur contamina menos que otras.

La figura 12.9 muestra que dentro de la temperatura seca, la fábrica que contamina más la zona PC es la B ubicada cerca de la Plaza de México y la fábrica H ubicada en la Ciudad Granja contamina menos. Así, las emisiones de la fábrica A (ó H) prácticamente no contribuyen en el funcional 7.1 para la zona PC dentro de la temporada húmeda (temporada seca).

También, las figuras 12.8 y 12.9 muestran que todas las funciones de peso tienen valores nulos dentro del intervalo $(0, 160)$, es decir, un contaminante transportado por los vientos alcanza la zona PC después de un periodo de casi 3 horas a partir del momento de su emisión. Este periodo cambia de una fábrica a otra y depende de la dirección de los vientos y de la

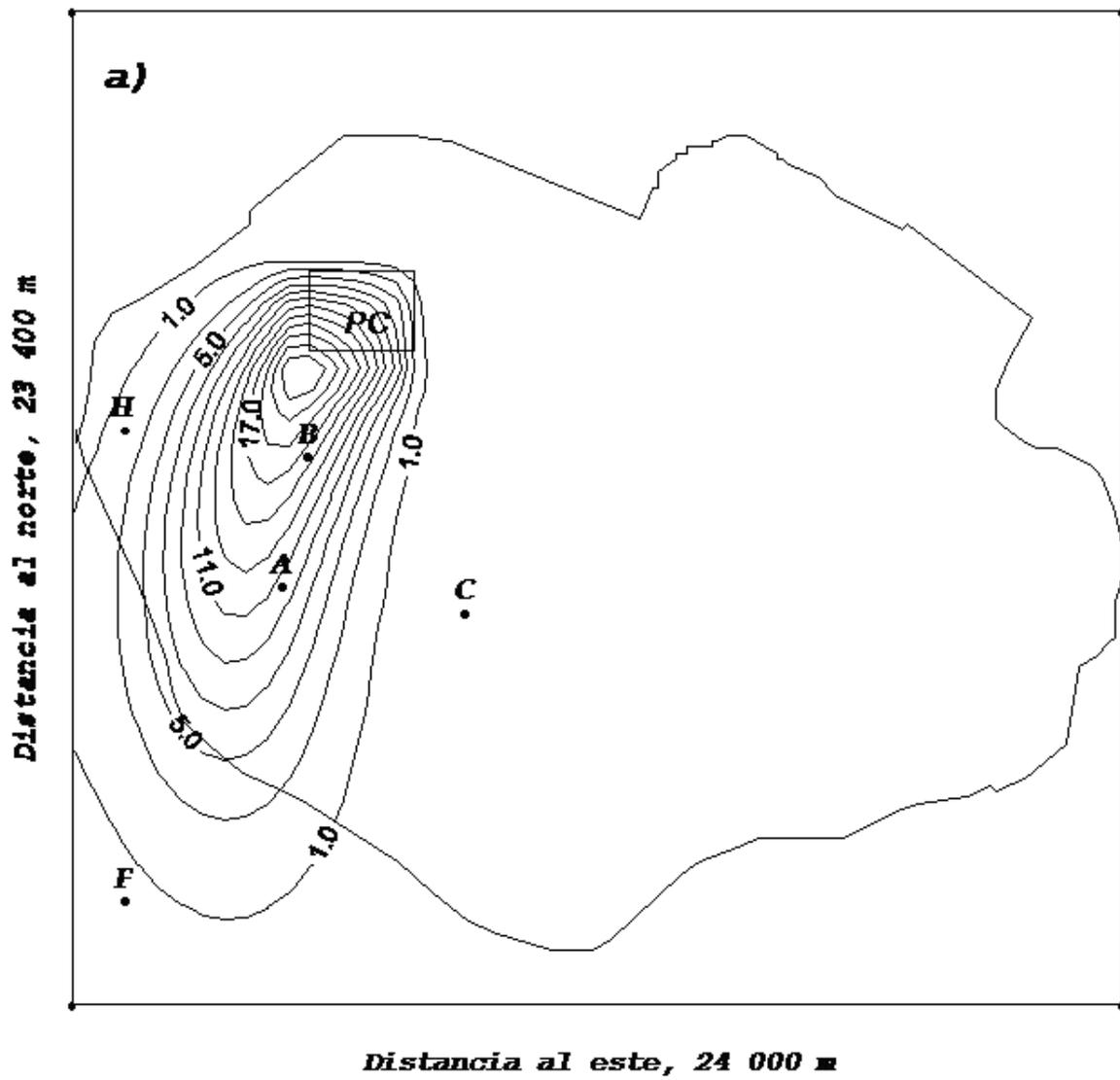


Figura 12.6: Isolíneas de la solución $g(r, t)$ del problema adjunto 6.1-6.4 para la zona PC y el viento tipo II (temporada seca) para el momento $t = T - 60 \text{ min}$.

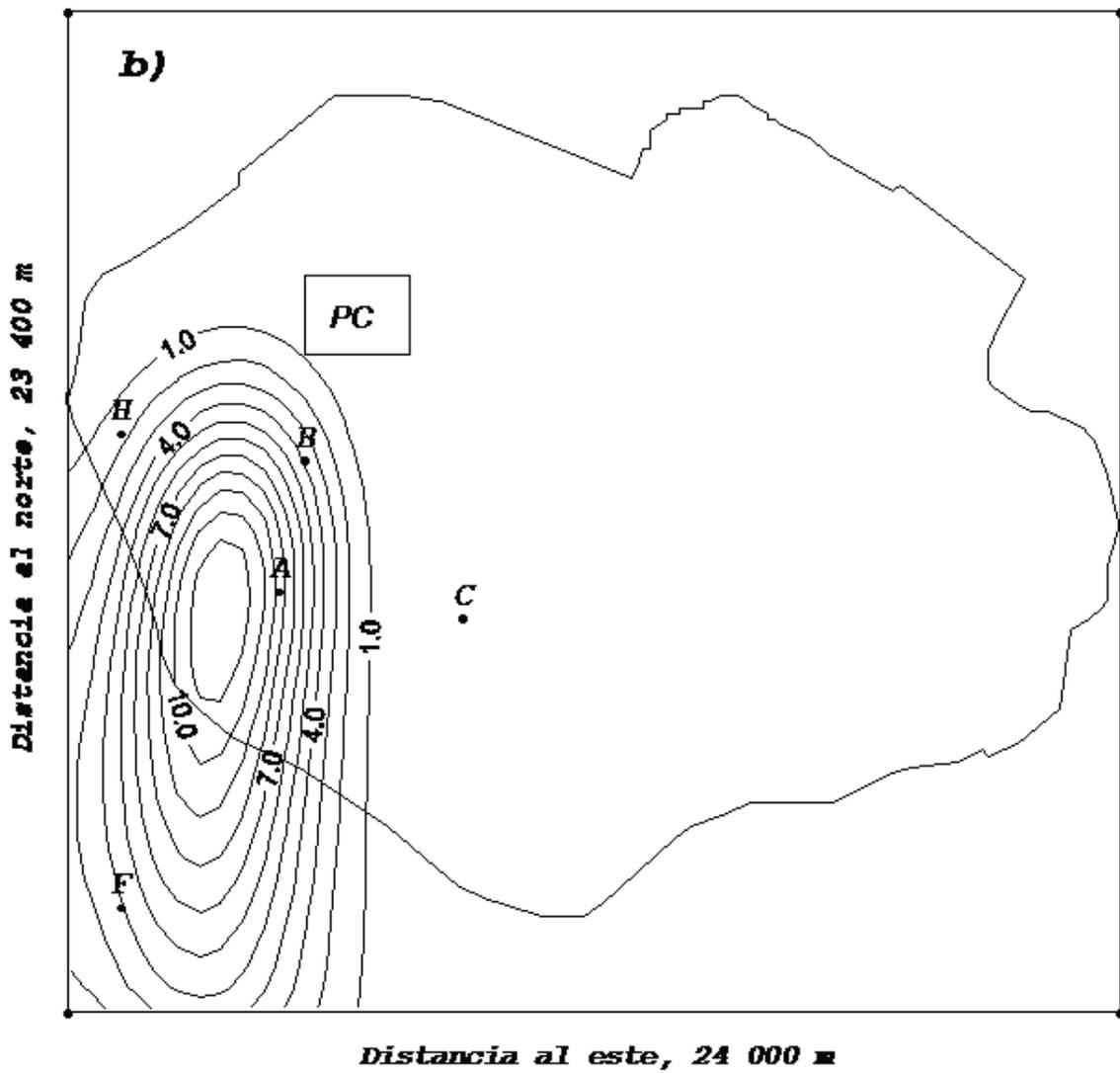


Figura 12.7: Isolneas de la solución $g(r,t)$ del problema adjunto 6.1-6.4 para la zona PC y el viento tipo II (temporada seca) para el momento $t = T - 90 \text{ min}$.

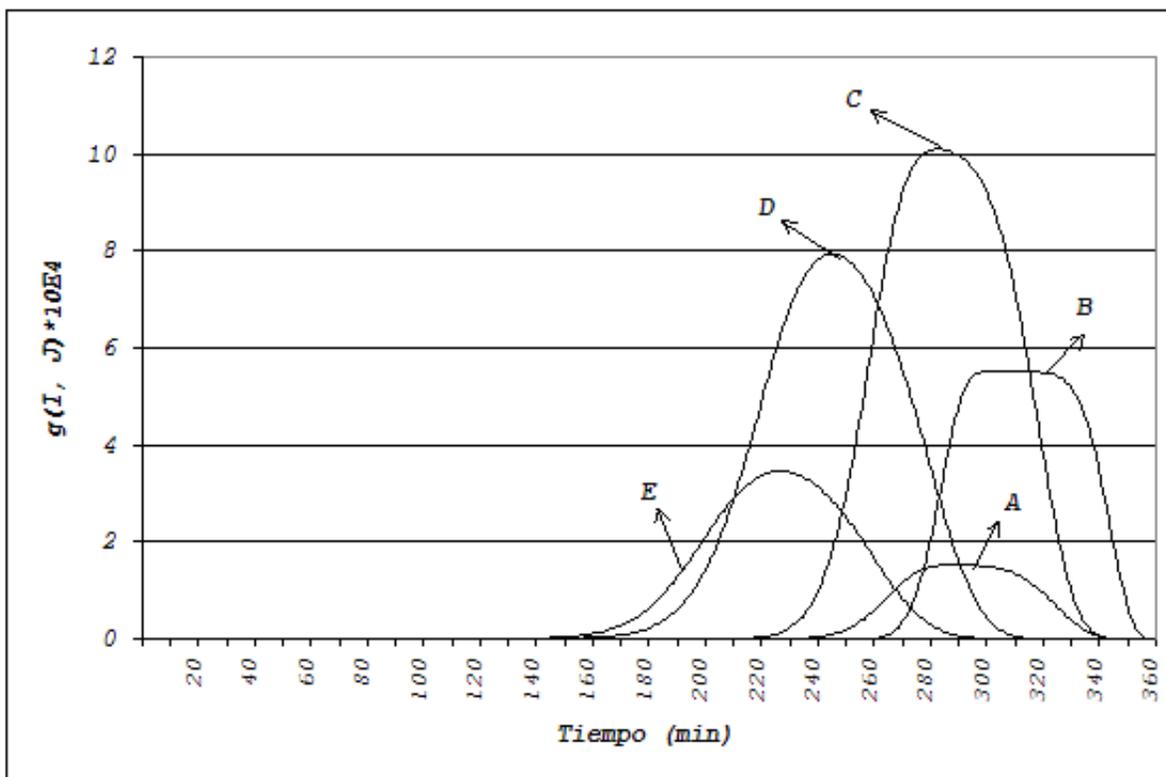


Figura 12.8: Comportamiento temporal de las funciones de peso $g(r_i, t)$ en el intervalo $[0, T]$ para la zona PC y el viento tiempo I ; $T = 360 \text{ min}$.

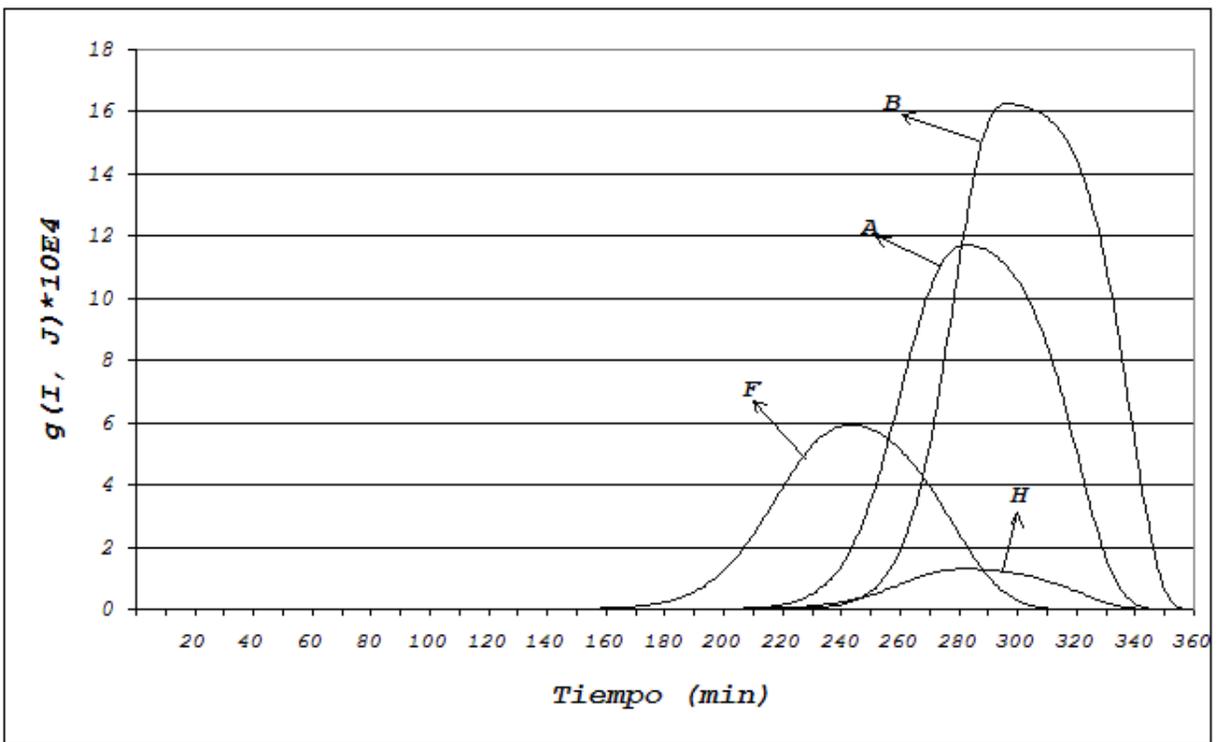


Figura 12.9: Comportamiento temporal de las funciones de peso $g(r_i, t)$ en el intervalo $[0, T]$ para la zona PC y el viento tiempo II; $T = 360 \text{ min}$.

ubicación mutua de la fábrica y la zona.

Para la zona CH (“Centro Histórico”), las isolíneas de la solución $g(r, t)$ del problema adjunto 6.1-6.4 se presentan en las figuras 12.10 y 12.11 para los vientos tipo I (temporada húmeda) y en las figuras 12.12 y 12.13. Las figuras 12.14 y 12.15 muestran el comportamiento de las funciones de peso para las fábricas seleccionadas.

Se puede observar que para la temporada húmeda, la fábrica C no contamina la zona CH , ya que su función de peso es prácticamente nula durante todo el periodo (véase la línea C en la figura 12.14), mientras que las fábricas B , A y E son responsables por la contaminación de la zona. A su vez, para la temporada seca, de las cinco fábricas sólo las fábricas A y C contaminan la zona CH , ya que las funciones de peso para las otras tres fábricas (B , H y F) tienen valores prácticamente nulos dentro de todo el periodo $(0, T)$. Además, la figura 12.15 muestra que la fábrica C juega el papel principal, porque su función de peso tiene valores dominantes. Así, las soluciones del modelo adjunto proporcionan información tanto cualitativa como cuantitativa sobre la contribución de cada fábrica en el nivel de contaminación de la zona. Dicha información es muy útil para estimar la situación ecológica en la ZMG y para aplicar las estrategias apropiadas de control de las emisiones industriales Parra-Guevara y Skiba (2000).

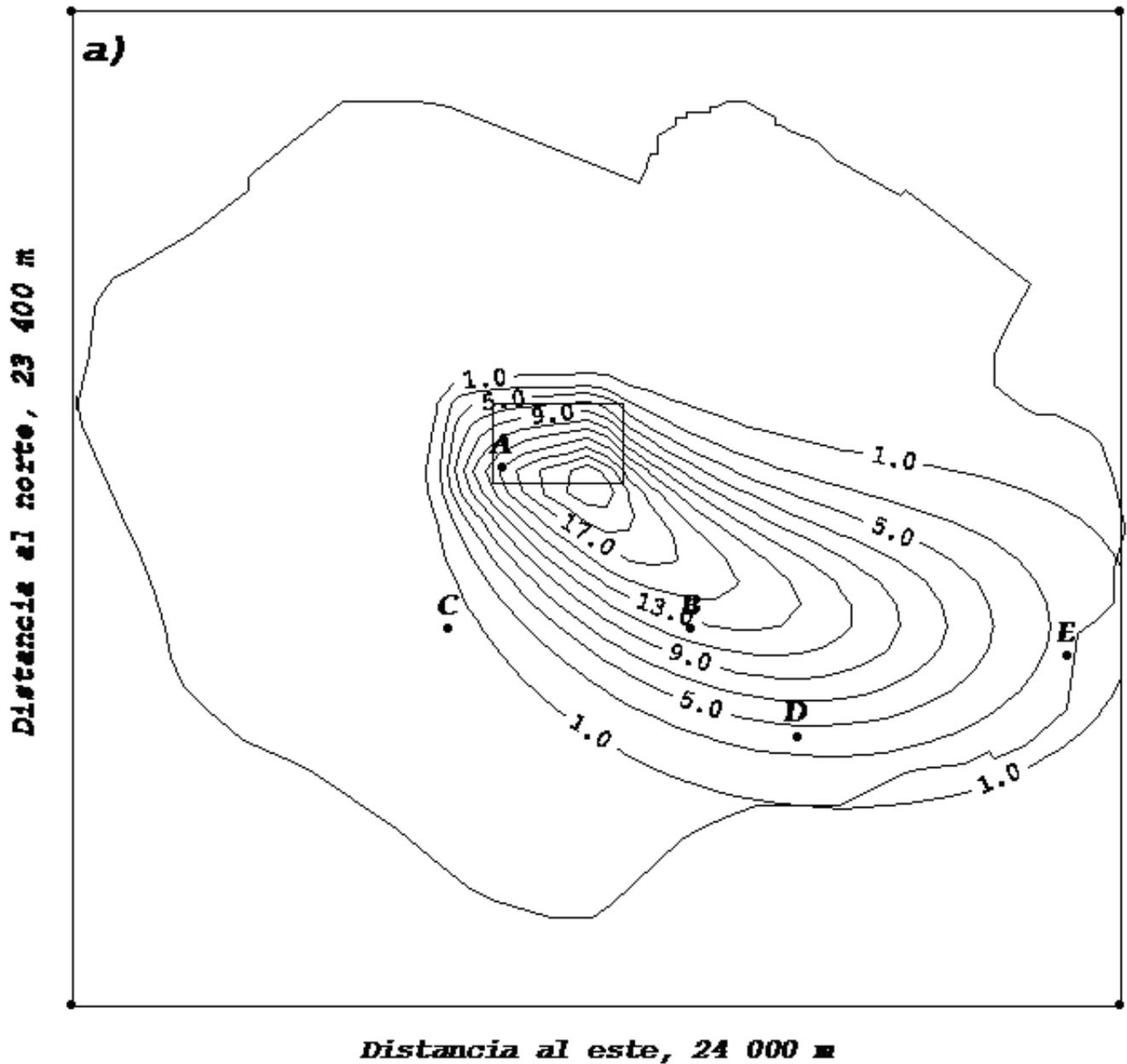


Figura 12.10: Isolíneas de la solución $g(r,t)$ del problema adjunto 6.1-6.4 para la zona CH y el viento tipo I (temporada húmeda) en el momento $t = T - 60 \text{ min}$.

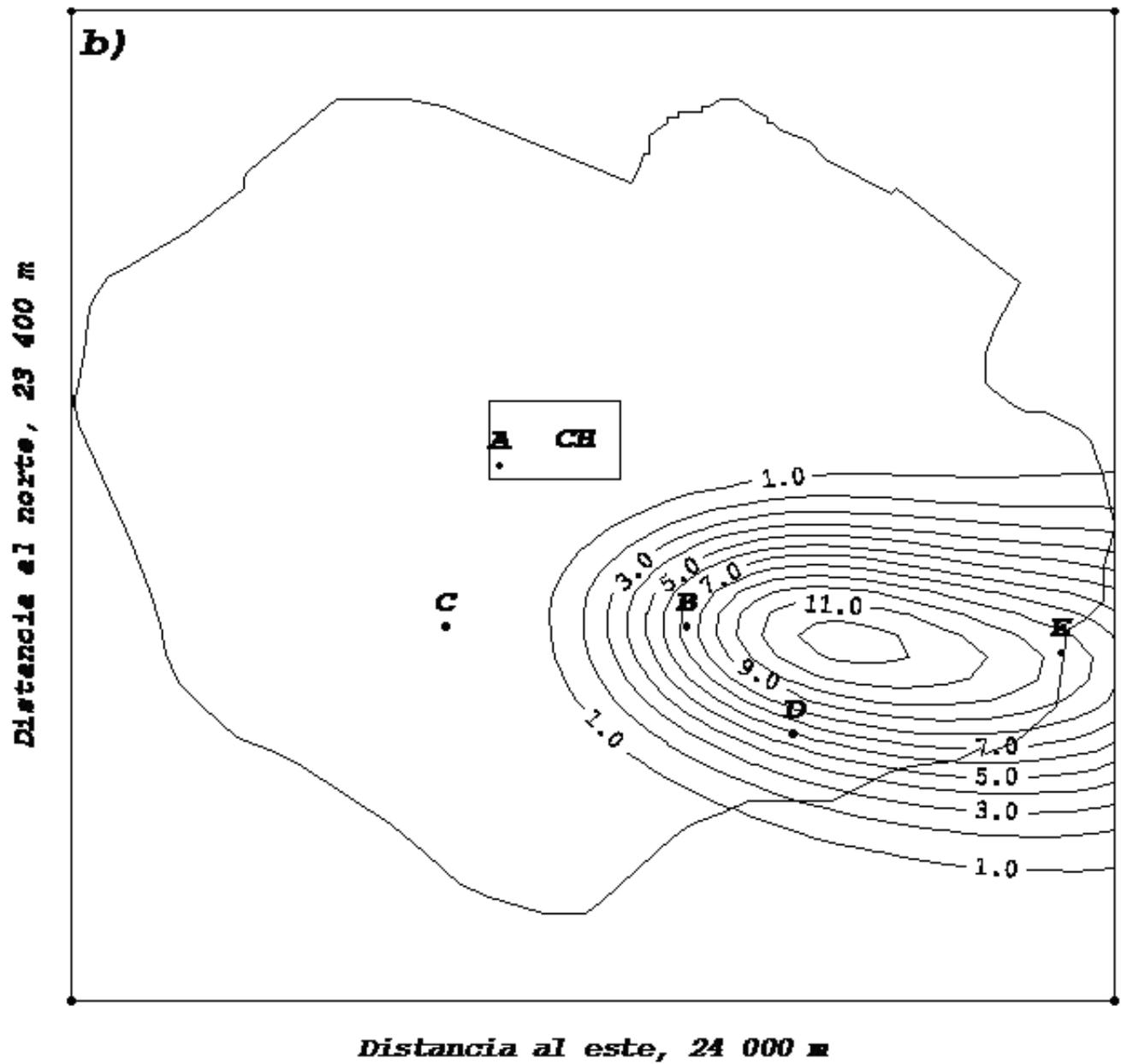


Figura 12.11: Isolíneas de la solución $g(r, t)$ del problema adjunto 6.1-6.4 para la zona CH y el viento tipo I (temporada húmeda) en el momento $t = T - 90 \text{ min}$.

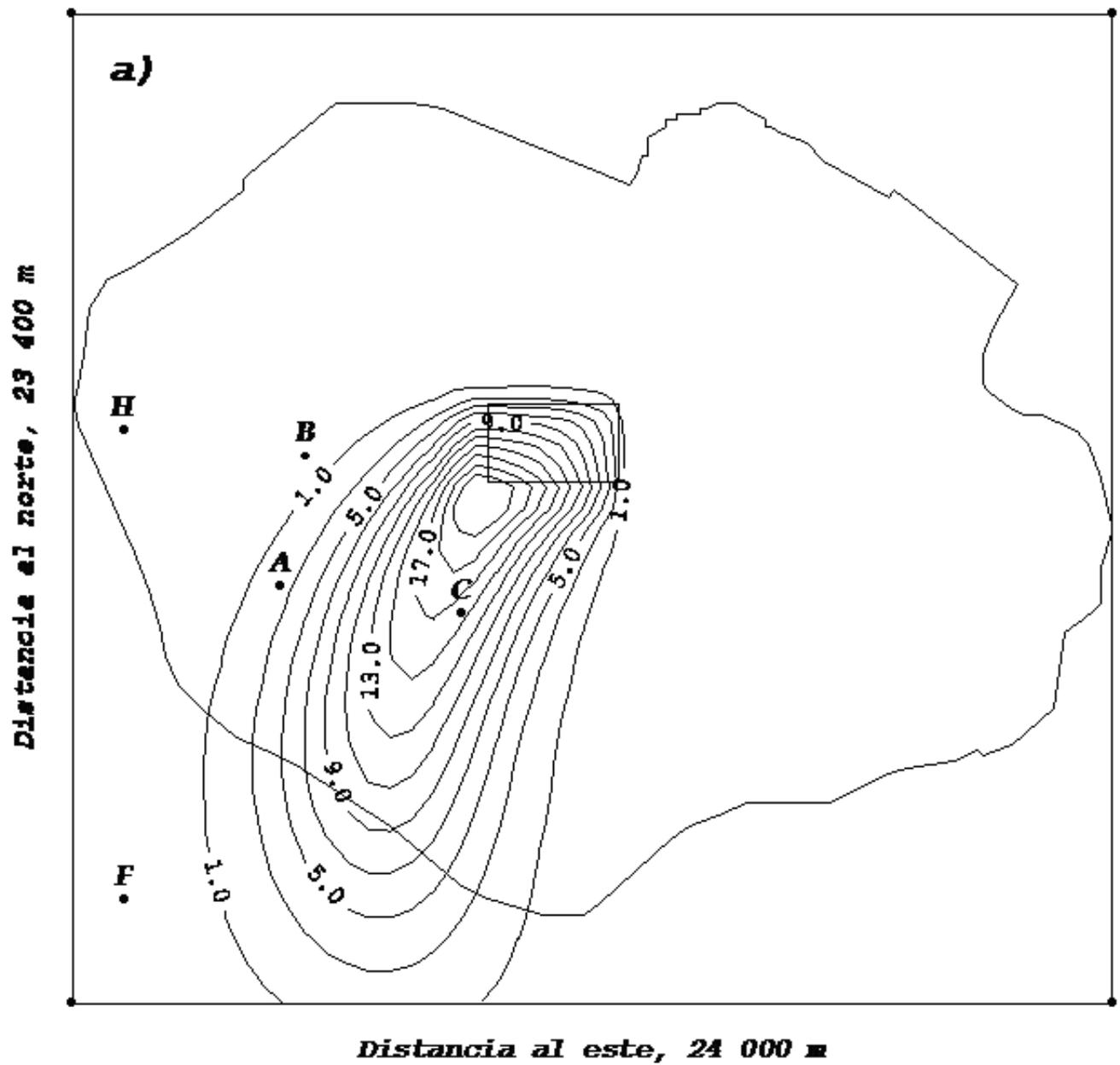


Figura 12.12: Isolíneas de la solución $g(r,t)$ del problema adjunto 6.1-6.4 para la zona CH y el viento tipo II (temporada seca) en el momento $t = T - 60 \text{ min}$.

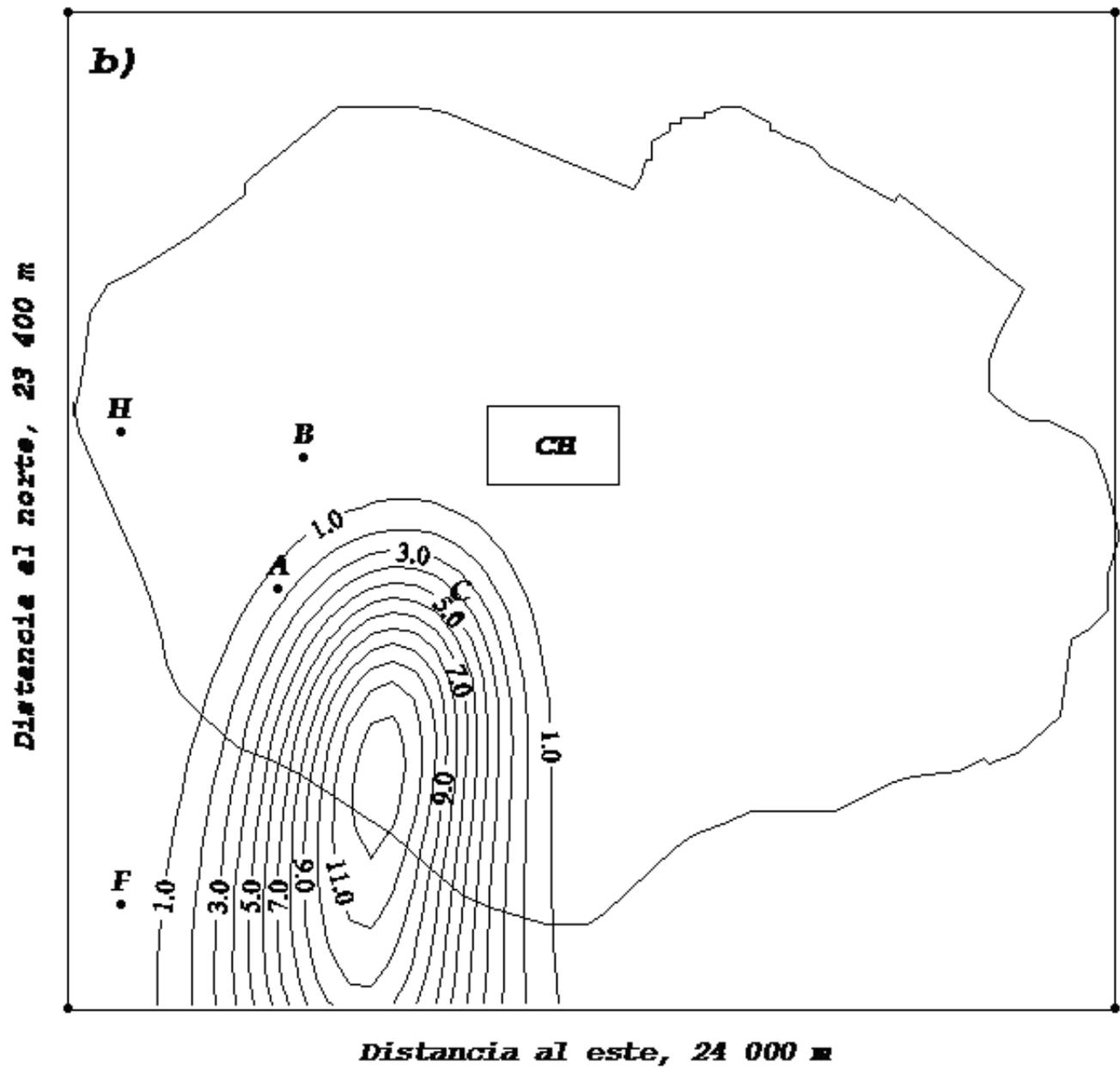


Figura 12.13: Isolneas de la solución $g(r,t)$ del problema adjunto 6.1-6.4 para la zona CH y el viento tipo II (temporada seca) en el momento $t = T - 90 \text{ min}$.

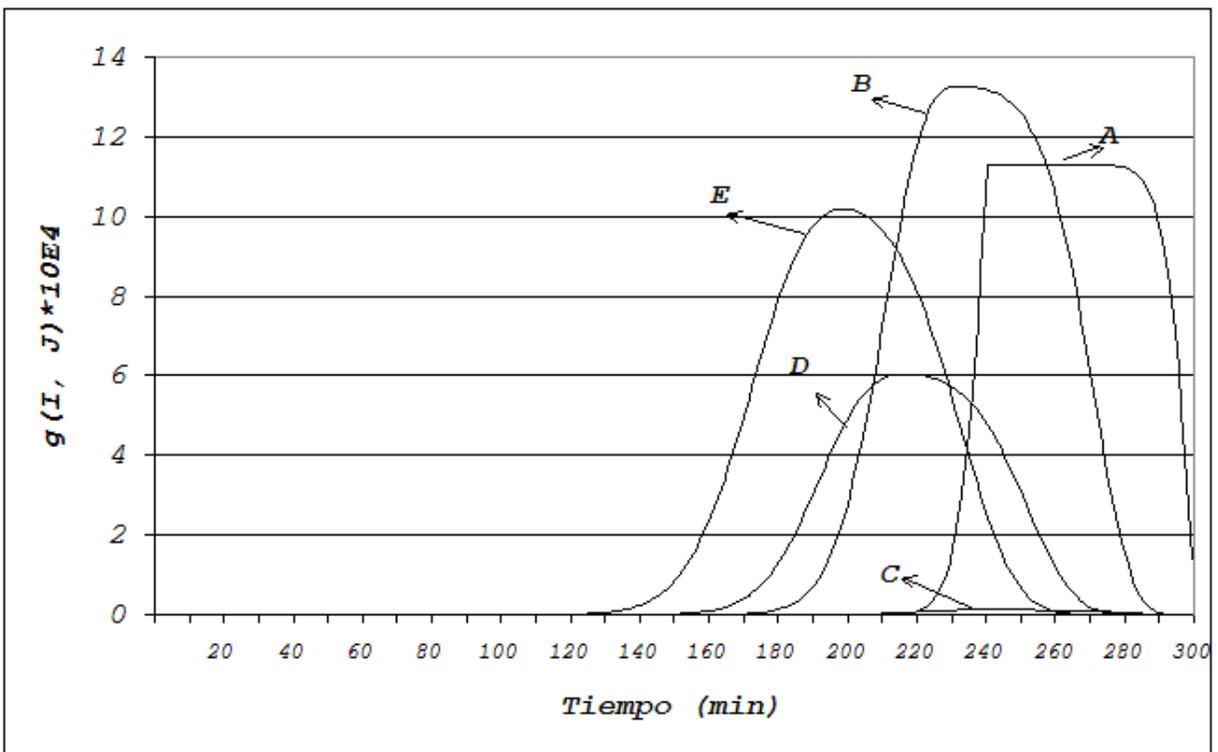


Figura 12.14: Comportamiento temporal de las funciones de peso $g(r_i, t)$ en el intervalo $[0, T]$ para la zona CH y el viento tiempo I; $T = 360 \text{ min}$.

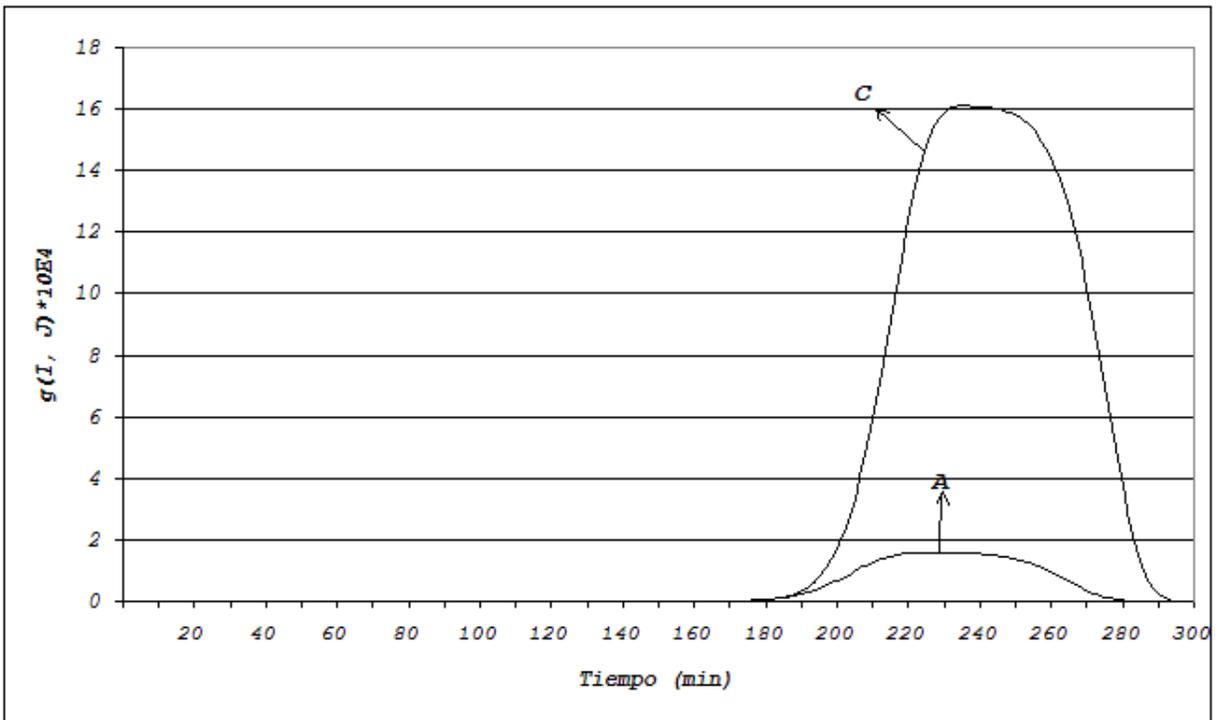


Figura 12.15: Comportamiento temporal de las funciones de peso $g(r_i, t)$ en el intervalo $[0, T]$ para la zona CH y el viento tiempo II; $T = 360 \text{ min}$.

Capítulo 13

Conclusiones

En el presente trabajo se estudio el problema de transporte de contaminación y su adjunto, los cuales se considerann en un área limitada de la atmósfera cuando existe un flujo de contaminación a través de las fronteras horizontales abiertas. A diferencia de otros modelos, en este modelo se usan las condiciones especiales en la frontera abierta y la ecuación adjunta. Debido a las condiciones especiales de frontera, ambos problemas, principal y adjunto están bien formulados matemáticamente (según Hadamard), es decir que cada solución del problema directo o adjunto existe, es única y estable a errores en el forzamiento y condición inicial. Además, dichas condiciones están también bien formuladas desde el punto de vista de la física.

Otra característica que se puede destacar, es que el empleo del modelo directo y del adjunto enriquecen la información que se puede obtener, ya que aumenta su capacidad de estudio y permite analizar la sensibilidad de las soluciones del modelo con respecto a variaciones en el número de fuentes de contaminación, en sus posiciones, en las tasas de emisión de cada fuente, en los parámetros externos del modelo (coeficientes σ , μ , viento, etc.) y en la distri-

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

Se derivaron los estimadores directo y adjunto equivalentes a la concentración media de contaminante aéreo en una zona ecológicamente sensible. El estimador directo 4.1 se basa en la utilización de la solución del problema de transporte de contaminantes atmosféricos. El estimador adjunto 7.1 al contrario de 4.1 no requiere resolver el problema de transporte de contaminante, y explícitamente relaciona la concentración promedio del contaminante atmosférico en la zona con las tasas de emisión de las fuentes de contaminación localizadas en el dominio D (por ejemplo fábricas). Las soluciones del problema adjunto sirven como las funciones de influencia de cada fábrica, y permiten determinar la contribución de cada una de las fábricas en el nivel promedio de contaminante en una zona ecológicamente sensible, en donde se realiza el monitoreo. Esta doble estimación satisfactoriamente complementa el monitoreo de la calidad del aire. En general, la estimación directa 4.1 es preferible cuando se requiere la información detallada sobre todo el dominio D o una gran parte del mismo. El problema adjunto es conveniente y económico cuando se realiza el análisis de la concentración de contaminante (la calidad de aire) en una, o varias zonas ecológicamente sensibles. A menudo el análisis limitado es preferible, pues es más económico y bastante informativo para conocer la situación ecológica en toda el área.

En este trabajo se presentan esquemas numéricos absolutamente estables y balanceados de segundo orden de aproximación en diferencias finitas basados en el método de separación

para resolver el problema de transporte y su adjunto.

El método de estimación del impacto de emisiones industriales se planteó y se aplicó para la Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG). Este método se basa en soluciones del modelo de transporte y difusión de contaminantes y su adjunto, realizados para la ZMG. En los experimentos numéricos descritos en este trabajo se consideraron dos tipos de viento climatológico (temporada húmeda y seca). Para cada tipo de viento se calcularon y se aplicaron los coeficientes de difusión turbulenta, μ . Además fueron estimados los parámetros de degradación de la concentración de la contaminación por procesos de depositación seca y por precipitación que se usan en los experimentos numéricos. Las estimaciones directa y adjunta de la concentración media de la contaminación atmosférica se calcularon para dos de las zonas más importantes del territorio urbano de Zona Metropolitana de Guadalajara: el Parque “Los Colomos”, y el Centro Histórico. En estas estimaciones se consideraron fuentes puntuales (emisoras de bióxido de azufre). Los experimentos fueron realizados con el fin de probar los esquemas numéricos y programas computacionales; estudiar el papel de la solución adjunta en determinar la contribución de cada fuente sobre el nivel de contaminación en las zonas ecológicamente sensitivas elegidas.

En cuanto al estudio de la calidad del aire para el periodo 2002-2004 y su comparación con el estudio previo del periodo 1994-1999 (Lopez y Guerrero, 2004). Se observa que en 1994 se registro un 70 % de los días con la calidad de aire no satisfactoria a mala, en 1995 son 74 %, en 1996 es 77 % y en 1998 y 1999 es 68 %. Esto muestra una mejoría para el periodo 2002-2004, teniendo una notable reducción del porcentaje de los días con calidad no satisfactoria a mala. Además se concluye que se ha logrado una reducción importante en lo que a bióxido de azufre, bióxido de nitrógeno y monóxido de carbono se refiere. Sin embargo la actual calidad del aire requiere atención y medidas de control, dado que más de 27 millones de habitantes

(en todo el país) están expuestos a concentraciones de ozono y partículas que frecuentemente exceden las normas de calidad del aire establecidas por la Secretaría de Salud, (SEMARNAT e INE, 2006).

En el análisis realizado por (SEMARNAT e INE, 2006) se muestra que el mejoramiento de la calidad de los combustibles, a la par de la introducción de nuevas tecnologías vehiculares, reduciría en 91 %, 50 %, 28 % y 45 % las emisiones a nivel nacional de SO_2 , NO_x , HC y $PM_{2,5}$ respectivamente, para el año 2020 con respecto al escenario base (sin control). Estas reducciones redundarían en una mejor calidad del aire que, a su vez, se asociaría con una reducción de cerca de 55,000 muertes prematuras, 166 mil casos de bronquitis crónica, 5.6 millones de días de trabajo perdidos y 7.8 millones de días de actividad restringida por enfermedades respiratorias, todo ello durante el periodo 2005-2030.

La principal aportación del trabajo fue el desarrollo de un modelo bidimensional simple de transporte de contaminación y su adjunto con el cual se puede iniciar ciertas acciones para la gestión ambiental. Este modelo se puede mejorar, esta en perspectiva de desarrollo a un modelo tridimensional que considerará la topografía de la zona, así como la parte dinámica (estimación y uso del viento real) con el fin de obtener un instrumento de gestión ambiental que permita la toma de decisiones y que sirva de bases para la normatividad ambiental en la región de interés. Este modelo podría ser un buen candidato para los retos que plantea (SEMARNAT e INE, 2006) en cuanto a las necesidades de modelaje para evaluar el impacto potencial de estrategias de control de emisiones a nivel nacional, para apoyar la toma de decisiones por parte de las autoridades ambientales de nuestro país.

Bibliografía

Baird, Colin. (2001). *Química Ambiental*. Reverté. España.

Boubel, R. W., Fox, D. L., Bruce, T. D. y Stern, A. C. (1994). *Fundamentals of Air Pollution*. Academic Press. USA.

Bravo, H. (1987). *La Contaminación del Aire en México*. Fundación Universo, México. 297-pp.

Chamberlain, A. C. (1953). *Aspects of travel and deposition of aerosols and vapor clouds*. AERE Harwell, Report R1261 HMSO, London.

Crank, J. y Nicolson, P. (1947). A practical method for numerical evaluation of solutions or partial differential equations of the heat conduction type. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, **43**, 50-67.

Davydova-Belitskaya, V. y Skiba, Yu. N. (1999). Climate of Guadalajara City (Mexico), its variation and change within lastest 120 years. *World Resour. Rev.*, **11**, 258-270.

Davydova-Belitskaya, V. Skiba, Yu. N., Bulgakov, S. y Martínez, A. (1999). Modelación matemática de los niveles de contaminación en la Cd. de Guadalajara, Jalisco, México.

- Parte I. Microclima y monitoreo de la contaminación. *Rev. Int. Contam. Ambient.*, **15**, 103-111.
- Davydova-Belitskaya, V., Skiba Yu. N., Martinez, A., Bulgakov S.N. (2001). Modelación matemática de los niveles de contaminación en la Ciudad de Guadalajara, Jalisco, México. Parte II. Modelo numérico de transporte de contaminantes y su adjunto. *Rev. Int. Contam. Ambient.*, **17** (2), 97-107.
- Díaz, S. (1946) *Geografía General y Física del Estado de Jalisco*. Talleres Gráficos de la U. de G. México.
- Godish, Thad (1991). *Air Quality. Second Edition*. Lewis Publishers. USA.
- Godunov, S.K., (1971). *Equations of Mathematical Physics*. Nauka, Moscow.
- González, R. (1995). *Proyecto piloto para la creación de una normatividad ambiental metropolitana*. Ecología Estatal de Jalisco. Gobierno del Estado. Jalisco.
- Hadamar, J. (1923). *Lectures on Cauchy's Problems in Linear Partial Differential Equations*. Dover.
- Hicks, B., Meyers, T. y Baldocchi, D. (1998). Aerometric measurement requirements for quantifying dry deposition. In: *Principles of Environmental Sampling*. ACS Professional Reference Book, American Chemical Society. 297-315.
- Hidy, G. M. (1994). *Atmospheric Sulfur and Nitrogen Oxides*. Academic Press. New York.
- Hill, M. (1997). *Understanding of Environmental Pollution*. Cambridge University Press. Cambridge

- Hobbs, P. (2000). *Introduction to Atmospheric Chemistry*. Cambridge University Press. Cambridge.
- Jacobson, Mark (2002). *Atmospheric pollution. History, science, and regulation*. Cambridge University Press. United Kingdom.
- Kato, T. (1966). *Perturbation theory for linear operators*. Springer-Verlag. New York.
- López-Coronado y Guerrero-Nuño (Compiladores y editores). (2004). *Ecología urbana en la Zona Metropolitana de Guadalajara*. Ed. Ágata y Universidad de Guadalajara. 35-59.
- Lumley, J. L. y Panofsky, H. A. (1964). *The structure of atmospheric turbulence*. Wiley. New York. 239-pp.
- Lynn, D. (1976). *Air pollution. Threat and response*. Addison-Wesley. USA.
- Lyusternik, L. y Sobolev, V. (1964). *Elements of functional analysis*. Ungar. USA.
- Manahan, S. E. (1991). *Environmental Chemistry*. Lewis Publisher. Chelsea.
- Marchuk G.I. y Skiba Yu. N. (1976). Numerical calculation of the conjugate problem for a model of the thermal interaction of the atmosphere with the oceans and continents. *Izvestiya, Atmosph. Oceanic Phys.* **12**, 279-284.
- Marchuk, G. I. (1986). *Mathematical Models in Environmental Problems*. Elsevier. New York.
- Marchuk, G. I. y Skiba, Yu. N. (1990). Role of adjoint functions in studying the sensitivity of a model of the thermal interaction of the atmosphere and ocean to variations in input data. *Izvestiya, Atmosph. Oceanic Phys.* **26**, 335-342.

- Marchuk, G. I., Agoshkov, V. I., Shutyaev, V. P. (1996). *Adjoint Equations and Perturbation Algorithms in Nonlinear Problems*. CRC Press. New York.
- Matveyev, L. T. (1984). *Fundamentals of General Meteorology. Physics of the atmosphere*. Leningrad. Gidrometeoizdat, 751-pp.
- Mestayer, P. y Anquetin S. (1995). *Climatology of Cities*. In: *Diffusion and Transport of Pollutants in Atmospheric Mesoscale Flow Fields*. Kluwer Academic Publishers. Boston. **1**. 165-190.
- Parra-Guevara, D. y Skiba, Yu. N. (2000). Transport of Industrial Pollutions. Part II: Control of Industrial Emissions. *Environ. Model. Assess.*, **5**, 177-184.
- Parra-Guevara, D. y Skiba, Yu. N. (2003). Elements of the Mathematical Modelling in the Control of Pollutants Emissions. *Ecological Modelling*. **167** (3), 263-275.
- Parra-Guevara, D. y Skiba, Yu. N. (2006). On optimal solution of an inverse air pollution problem: theory and numerical approach. *Mathematical and Computer Modelling*. **43**, 766-778.
- Secretaría de Medio Ambiente para el Desarrollo Sustentable (SEMADES), Gobierno de Jalisco. (2002). *Informe de Calidad del Aire. Evaluación "Enero-Diciembre 2002"*. Centro de Información Ambiental.
- Secretaría de Medio Ambiente para el Desarrollo Sustentable (SEMADES), Gobierno de Jalisco. (2003). *Informe de Calidad del Aire. Evaluación "Enero-Diciembre 2003"*. Centro de Información Ambiental.

- Secretaría de Medio Ambiente para el Desarrollo Sustentable (SEMADES), Gobierno de Jalisco. (2004). *Informe de Calidad del Aire. Evaluación "Enero-Diciembre 2004"*. Centro de Información Ambiental.
- Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales e Instituto Nacional de Ecología, 2006. *La investigación ambiental para la toma de decisiones*. Instituto Nacional de Ecología.
- Seinfeld, J. H. y Pandis, S. N. (1998). *Atmospheric Chemistry and Physics. From Air Pollution to Climate Change*. Jhon Willey & Sons, Nueva York.
- Shir, C. y Shich L. (1974). A generalized urban air pollution model and its application to the study of SO_2 distribution in the St. Louis Metropolitan Area. *J. Appl. Meteorol.* **13**, 185-204.
- Skiba, Yu. N. (1993). Balanced and absolutely stable implicit schemes for the mail and adjoint pollutant transport equations in limited area, *Rev. Int. Contam. Ambient.*, **9**, 39-51.
- Skiba, Yu. N. y Adem, J. (1995). A Balanced and absolutely stable numerical thermodynamic model for closed and open oceanic basins. *Geofis. Int.*, **34**, 385-393.
- Skiba, Yu. N, Adem, J. y Morales-Acoltzi, T. (1996). Numerical algorithm for the adjoint sensitivity study of the Adem ocean thermodynamic model. *Atmósfera.* **9**, 147-170.
- Skiba, Yu. N. (1997). Air pollution estimates. *World Resour. Rev.* **9**, 542-556.
- Skiba, Yu. N y Parra-Guevara, D. (2000). Industrial pollution transport, Part I: Formulation of the problem and air pollution estimates. *Environ. Model. Assess.*, **5**, 169-175.
- Skiba, Yu. N. (2001). *Introducción a los Métodos Numéricos*. UNAM. México.

- Skiba, Yu. N. y Davydova-Belitskaya, V. (2002). Air Pollution Estimates in Guadalajara City. *Environmental Modelling and Assessment*. **7**, 153-162.
- Skiba, Yu. N. (2003). On a Method of Detecting the Industrial Plants Which Violate Prescribed Emission Rates. *Ecological Modelling*. **159** (2-3), 125-132.
- Skiba, Yu. N. y Davydova-Belitskaya, V. (2003). On the Estimation of Impact of Vehicular Emissions. *Ecological Modelling*. **166** (1-2), 169-184.
- Skiba, Yu. N. (2005). *Métodos y esquemas numéricos. Un análisis computacional*. UNAM. México.
- Skiba, Yu. N., Parra-Guevara, D. y Davydova-Belitskaya, V. (2005). Air Quality Assessment and Control of Emission Rates. *Environmental Monitoring and Assessment*. **111** (1-3), 89-112.
- Stockwell, W. y Calvert, J. (1983). The mechanism of $HO - SO_2$ reaction. *Atmos. Environ.*, **17**, 2231-2235.
- Turner, D. B. (1994). *Workbook of atmospheric dispersion estimates: an introducción to dispersion modeling*. Lewis Publishers, London. 179-pp.
- Wark, K. y Warner, C. F. (1996). *Contaminación del aire. Origen y control*. Limusa-Noriega Editores, 650-pp.
- Williamson, S. (1973). *Fundamentals of Air Pollution*. Addison-Wesley. USA.