

Nº 22
26.1



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

**APLICACION DE MODELOS MATEMATICOS COMO
HERRAMIENTA DE EVALUACION DE ALTERNATIVAS
PARA EL CONTROL DE LA CONTAMINACION
ATMOSFERICA EN LA CIUDAD DE MEXICO**

T E S I S

PARA OBTENER EL TITULO DE:

INGENIERO QUIMICO

P R E S E N T A :

AARON CORDOVA OJEDA

MEXICO, D. F.

1992

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

INDICE

PREFACIO	1
DEDICATORIAS	ii
AGRADECIMIENTOS	iv
INDICE	v
INDICE DE TABLAS Y FIGURAS	vii
NOMENCLATURA	viii
1 INTRODUCCION	1
1.1 <i>Objetivo del trabajo</i>	2
1.2 <i>Antecedentes</i>	3
1.3 <i>Descripción de la tesis</i>	5
2 CONTAMINACION ATMOSFERICA	7
2.1 <i>Clasificación de contaminantes</i>	8
2.2 <i>Fuentes de emisión</i>	10
2.3 <i>Receptores</i>	12
2.3.1 <i>Efectos sobre la salud</i>	12
2.3.2 <i>Efectos sobre el medio ambiente</i>	14
2.3.3 <i>Legislación</i>	16
3 DISPERSION ATMOSFERICA	18
3.1 <i>Factores meteorológicos</i>	18
3.1.1 <i>Gradiente térmico</i>	19
3.1.2 <i>Velocidad y dirección del viento</i>	20
3.1.3 <i>Altura de la capa de mezcla</i>	21
3.2 <i>Topografía y características de emisión</i>	21
3.3 <i>Ecuaciones fundamentales</i>	24
3.3.1 <i>Ecuación de continuidad</i>	24

3.3.2	Ecuación de transporte de momento	26
3.3.3	Ecuación de transporte de escalares	29
3.4	<i>Turbulencia</i>	31
4	MODELOS MATEMATICOS	33
4.1	<i>HOTMAC</i>	34
4.1.1	Ecuaciones fundamentales	34
4.1.2	Malla de cálculo y condiciones a la frontera	37
4.1.3	Algoritmo de cálculo	41
4.2	<i>RAFTAD</i>	42
4.2.1	Ecuaciones fundamentales	43
5	EJEMPLO DE APLICACION	45
5.1	<i>Planteamiento</i>	46
5.2	<i>Resultados</i>	53
5.3	<i>Conclusiones</i>	57
6	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	65
	APENDICE 1 Notación tensorial	68
	APENDICE 2 Método numérico de solución	70
	APENDICE 3 Variables de entrada	74
	BIBLIOGRAFIA	79

INDICE DE TABLAS Y FIGURAS

Número de tabla		pág
2.1	Normas Mexicanas de Calidad del Aire	16
Número de figura		
3.1	Gradiente térmico	20
3.2	Efecto valle-montaña	23
3.3	Balance de masa	25
3.4	Balance de fuerza externa	27
3.5	Tensor de esfuerzos	28
3.6	Balance de escalares	29
4.1	Malla desplazada	42
5.1	Cuenca de México	47
5.2	Topografía del dominio de cálculo	48
5.3	Malla de cálculo. Celdas modificadas	49
5.4	Topografía y campo de vientos. Malla gruesa	51
5.5	Topografía y campo de vientos. Malla fina	52
5.6	Campos de viento. Malla gruesa	55
5.7	Campos de viento. Malla fina	56
5.8	Perfil vertical de velocidad de viento. Ajusco.	59
5.9	Perfil vertical de dirección de viento. Ajusco	60
5.10	Perfil vertical de velocidad de viento. Zócalo	61
5.11	Perfil vertical de dirección de viento. Zócalo	62
5.12	Perfil vertical de velocidad de viento. Xochihuacan	63
5.13	Perfil vertical de dirección de viento. Xochihuacan	64

NOMENCLATURA

		Unidades
A	Area	m ²
A, B, C	Coefficientes de agrupamiento	adimensionales
A, B, C	Coefficientes del método numérico	adimensionales
a	Coefficiente de cálculo, ec (4.27)	adimensional
B ₁	Constante empírica: 16.6	adimensional
b	Coefficiente de cálculo, ec (4.28)	adimensional
C	Concentración	ppm
c	Constante numérica de difusión: 0.01	adimensional
Cp	Capacidad calorífica a presión constante	J/kg °K
D, E, F	Coefficientes del método numérico	adimensionales
F ₁ , F ₂	Variables empíricas: 1.8 y 1.33	adimensionales
F	Flujo de escalares	según ecuación
F	Flujo total	según ecuación
f	Factor de coriolis	adimensional
f	Fuerza	m/s ²
G	Flujo de calor	W/m ²
g	Aceleración de la gravedad	m/s ²
H	Flujo de calor sensible	W/m ²
h	Humedad relativa	adimensional
i, j, k	Vectores unitarios en tres direcciones	adimensionales
K	Coefficiente de difusión	m/s ²
k	Constante de Karman: 0.4	adimensional
K _N	Coefficiente de viscosidad turbulenta	m ² /s ²
K _H	Coefficiente de difusividad turbulenta	m ² /s
l	Longitud de mezclado	m
LE	Flujo de calor latente	W/m ²
M	Masa	kg
m	Peso molecular	kg/mol
N	Número de partículas	adimensional
N	Número de puntos de cálculo	adimensional
Pr	Número de Prandtl	adimensional
p	Presión	mb
Q	Flujo de emisión de contaminantes	ppm/s
q	Velocidad turbulenta	m/s
R	Constante de los gases ideales: 8314.3	J/°K kmol
R _a	Constante aire seco: 287.1	J/°K kg
R	Energía por radiación	W/m ²

Sc	Número de Schmidt	adimensional
\bar{S}_M	Función del número de Richardson	adimensional
S_f	Término fuente	según ecuación
S_i, S_q	Coefficientes empíricos: 0.2 y 0.2	adimensionales
T	Tiempo total	s
T	Temperatura	$^{\circ}C$
T	Factor de escalamiento numérico	m^2/s
t	Tiempo	s
u	Componente de velocidad del viento en x	m/s
u_i	Vector de velocidad	m/s
V	Velocidad horizontal	m/s
v	Componente de velocidad del viento en y	m/s
w	Componente de velocidad del viento en z	m/s
x	Eje horizontal de coordenadas	m
x_i	Ejes de coordenadas	m
y	Eje horizontal de coordenadas	m
z	Coordenada vertical	m

SIMBOLOS GRIEGOS

α	Inverso al número de Prandtl	adimensional
β	Coefficiente de expansión térmica	$1/^{\circ}C$
γ	Coefficiente de expansión	adimensional
$\delta_{i,j}$	Función delta de Dirac	adimensional
ξ	Número aleatorio, distribución gaussiana	adimensional
θ	Temperatura potencial	$^{\circ}C$
λ	Parámetro de relajación	adimensional
μ	Viscosidad molecular	m/s^2
ζ	Parámetro de altura	adimensional
π	Constante: 3.1416	adimensional
ρ	Densidad	kg/m^3
σ_{ij}	Tensor de esfuerzos	$kg/m s^2$
σ	Variancia	adimensional
ϑ	Variabes (vectoriales y escalares)	según ecuación
Φ	Gradiente	adimensional
ϕ	Variable escalar	según ecuación
Ψ	Término de corrección por estabilidad atmosférica	adimensional

SUBINDICES

D	Dominio de cálculo
entrada	Entrada
g	Nivel del terreno
h	Humedad
i, j	Notación tensorial
k	Pseudopartícula
L	Longitud de onda larga
Lx	Escala lagrangiana
l	Fase líquida
m	Momento
max	Valor máximo
N	Valor neto de onda larga
n, N	Número de puntos de cálculo
p	Partícula o presión
q	Velocidad de mezclado
S	Longitud de onda corta
s	Suelo
salida	Salida
t	Temperatura
u _i	Velocidad de viento
v	Valor virtual
vap	Vapor
x, y, z	Coordenadas cartesianas
o	Rugosidad y condición de referencia
#	Propiedad escalar
*	Valor en la pared

SUPERINDICES

g	Condición geostrópica
*	Valor corregido

OPERADORES

δ...	Incremento diferencial
Δ...	Incremento

<...> Valor promedio en el plano horizontal
— Valor promedio normal
... Fluctuaciones
...↑ Ascendente
...↓ Descendente

1 INTRODUCCION

Cuando el hombre apareció en la Tierra y se comienzan a formar los primeros grupos humanos, aparece la contaminación atmosférica. Cuando el hombre aprendió a manejar el fuego, acostumbraba utilizarlo dentro de sus viviendas con el fin de preparar sus alimentos y calentarse, produciéndose humo que viciaba el ambiente. Posteriormente, con el aumento de la población y la formación de ciudades, la contaminación atmosférica se hizo más notable, debido al gran número de viviendas, negocios de producción de alimentos y talleres de extracción, fundición y manufactura de metales, que emitían gases a la atmósfera.

Con la invención de la máquina de vapor comenzó la época conocida como *Revolución Industrial*, en la cual la contaminación atmosférica adquiere grandes proporciones, ya que para producir el vapor (fuente de energía utilizada para mover maquinaria), se debían quemar grandes cantidades de carbón como combustible. Es a partir de esta época que se acelera el crecimiento de las ciudades y aumenta el número de industrias; y junto con ello también aumenta la emisión de contaminantes a tal grado que en nuestro siglo, en varias ciudades del mundo, se han llegado a suscitar episodios de contaminación atmosférica, en los cuales seres humanos han perdido la vida.

La contaminación es un problema difícil que requiere de cada vez mayor número de especialistas que se dediquen a su investigación y establecer las soluciones más adecuadas. Es necesario se busquen alternativas más limpias para la obtención de energía, se controlen o modifique procesos industriales altamente contaminantes y se reduzca el parque vehicular o sus emisiones.

De lo anterior se deduce el gran interés de la humanidad por tratar de resolver este problema, y el interés de este estudio por el uso de modelos matemáticos para el análisis del problema de contaminación atmosférica, principalmente para la Ciudad de México.

1.1 Objetivo del trabajo

Hoy en día la Zona Metropolitana de la Ciudad de México (ZMCM) por estar densamente poblada (alrededor de 20 millones de habitantes), con un gran número de vehículos automotores (3 millones) y amplias zonas industriales, además de estar ubicada en una zona con deficiente ventilación natural, presenta graves problemas de contaminación atmosférica. Es por tal motivo que el Instituto Mexicano del Petróleo (IMP) junto con el Laboratorio Nacional de los Alamos (ANL), la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Universidad Autónoma Metropolitana (UAM), Secretaría de Desarrollo Urbano y Ecología (SEDUE), Instituto de Investigaciones Eléctricas (IIE) y Departamento del Distrito Federal (DDF); realizan actualmente un proyecto llamado ESTUDIO GLOBAL DE LA CALIDAD DEL AIRE EN LA CIUDAD DE MEXICO, en el cual se pretende hacer uso de la tecnología más moderna, para determinar el estado actual de la contaminación atmosférica en la ZMCM y establecer medidas de control.

Este proyecto esta constituido de varias partes:

MODELOS Y SIMULACION
CARACTERIZACION Y MONITOREO
EVALUACION DE ESTRATEGIAS

El trabajo que se describe en esta tesis forma parte de la sección correspondiente a MODELOS Y SIMULACION, y su objetivo principal es hacer un análisis de la estructura matemática (ecuaciones

diferenciales, condiciones a la frontera, y método de solución numérica) de los modelos meteorológicos y de dispersión que se usarán dentro de este proyecto con el fin de entenderlos, y poder modificarlos de ser necesario.

1.2 Antecedentes

Los modelos de calidad de aire son una herramienta mediante la cual se pueden relacionar las emisiones de contaminantes con sus concentraciones en el aire atmosférico. Estos modelos son bases importantes para la elaboración de planes de lucha contra la contaminación. Entre los estudios para los que puede ser útil la aplicación de estos modelos están:

- Planificación y localización de futuras fuentes
- Elaboración de planes de emergencia durante episodios
- Evaluación de técnicas y estrategias de control
- Elaboración de legislación sobre emisiones

Los modelos de calidad del aire en su generalidad, están formados por los siguientes modelos o submodelos:

Modelo meteorológico. Descripción de los campos de viento, temperatura, humedad, etc.

Modelo de emisiones. Posición y emisión de fuentes contaminantes.

Modelo de dispersión. Transporte y difusión de material contaminante.

Modelo de reacción química. Evaluación de las transformaciones químicas de contaminantes atmosféricos.

Los modelos que se analizan en este trabajo, HOTMAC (High Order Turbulence Model for Atmospheric Circulation) y RAPTAD (Random Particle And Diffusion) son modelos matemáticos de tipo meteorológico y de difusión respectivamente.

Los modelos meteorológicos se dividen generalmente en dos grupos: de *diagnóstico* y de *pronóstico*. Los primeros están basados en el análisis estadístico de datos obtenidos por una red de monitoreo, y los segundos en la descripción fundamental del transporte y procesos físicos atmosféricos (Seinfeld, 1978). HOTMAC pertenece al grupo de pronóstico, y predice campos de viento, humedad y temperatura a partir de las ecuaciones diferenciales de transporte turbulento correspondientes.

Entre los modelos de calidad del aire ó atmosféricos más simplificados se tienen a los *gaussianos* cuyo nombre es debido al uso de una distribución normal para representar el fenómeno de difusión de contaminantes. A pesar de su simplicidad y múltiples suposiciones contenidas, han demostrado ser útiles principalmente para estudios preliminares (Turner, 1969).

En los *modelos de caja* se representa la dispersión dentro de un volumen cuyo límite superior es la altura de la capa de mezcla (zona de la atmósfera donde existe turbulencia provocada por la rugosidad y el calentamiento del suelo), y se emplean para representar áreas de varios kilómetros cuadrados con varias fuentes emisoras, utilizando datos de velocidad del viento y variación de la altura de la capa de mezcla. La principal suposición que hacen estos modelos es la concentración homogénea, por mezclado instantáneo, de los contaminantes dentro del volumen de la caja. Por lo tanto, éstos modelos no dan resolución espacial y no pueden ser usados para situaciones donde existan variaciones en los patrones meteorológicos y de emisión.

Otro tipo de modelos son los de *trayectoria*, que utilizan coordenadas móviles y hacen uso de una columna hipotética de aire localizada dentro de la capa de mezcla, que se mueve debido a la influencia del viento y al pasar sobre las fuentes emisoras recibe a los contaminantes.

Los modelos de *mall* o diferenciales, están basados en las ecuaciones de dispersión atmosférica, las resuelven en un sistema fijo de coordenadas. La región que modelan la representan en arreglos de celdas de dos o tres dimensiones. Entre mayor sea el número de celdas empleado se tiene una descripción más detallada del área de estudio pero se requiere un mayor esfuerzo computacional.

Uno de los modelos que se analizan en este trabajo, HOTMAC, puede ser considerado de este tipo, ya que resuelve las ecuaciones fundamentales de transporte para una malla tridimensional. Este modelo fue creado por Tetsuji Yamada, y se empleó por el Laboratorio Nacional de los Alamos, Nuevo México, para predecir el comportamiento de posibles fugas de los almacenes de armas químicas ubicados en los Estados Unidos (Yamada et al, 1989). Este modelo ya ha sido empleado para otros casos y sus predicciones comparadas con los datos obtenidos en el proyecto ASCOT (Atmospheric Studies in Complex Terrain), observándose resultados satisfactorios; Yamada (1981).

HOTMAC fue diseñado para zonas con topografía compleja siendo esta una de las razones por las cuales fue elegido para ser usado en la ZMCM.

El otro modelo estudiado en este trabajo es el RAPTAD, el cual también fue escrito por Yamada. Este modelo utiliza *pseudopartículas* (nubes de contaminantes) que se transportan en la dirección del viento dispersándose radialmente al azar, y presentan en su interior una distribución estadística normal de concentración de contaminantes gaseosos.

Como antecedentes y ejemplos de aplicación de éstos modelos, se recomienda revisar la siguiente bibliografía: Williams y Streit (1990), Yamada et al (1989), Yamada (1978 y 1981) y, Yamada y Bunker (1987).

1.3 Descripción de la tesis

Esta tesis está orientada hacia el estudio matemático de los modelos HOTMAC y RAPTAD, y la aplicación de éstos en la evaluación de alternativas para controlar la contaminación atmosférica en la ZMCM. Para esto es necesario entender primero el fenómeno de la contaminación y por tal razón en el capítulo dos se establecen las características generales y los elementos que la componen.

En el capítulo tres se establecen las bases teóricas y matemáticas (flujo de fluidos) que describen el fenómeno de la dispersión de los contaminantes en la atmósfera para posteriormente, en el capítulo cuatro, estudiar los modelos matemáticos de interés. Es en ese

capítulo donde se hace el análisis y descripción de las ecuaciones diferenciales, condiciones de frontera, método numérico de solución, malla de cálculo y otros aspectos matemáticos de interés.

En el capítulo cinco se presenta un ejemplo de aplicación en el cual se analiza una alternativa para el mejoramiento de la calidad del aire en la ZMCM.

Finalmente en el capítulo seis aparecen las conclusiones obtenidas de este estudio y algunas recomendaciones para la realización de futuros estudios.

2 CONTAMINACION ATMOSFERICA

En este capítulo se presentará un esquema sobre el proceso de contaminación atmosférica y los principales elementos que lo componen.

En todo proceso de contaminación ambiental siempre existen tres elementos importantes que son: *la fuente de contaminación, el medio de transporte de los contaminantes y el receptor.*

Se entiende como *fente de contaminación* a todo aquel proceso que emite contaminantes, los cuales al ser lanzados a la atmósfera pueden encontrarse con *sumideros* y ser removidos del aire (por el suelo, seres vivos, cuerpos de agua), sufrir reacciones químicas que los transforman en otras especies o permanecer indefinidamente en el aire. El tiempo promedio que permanecen presentes en el aire antes de desaparecer se conoce como *vida media*.

El medio de transporte de los contaminantes atmosféricos es el aire, éste los desplaza mediante mecanismos de convección (transporte por arrastre del viento) y difusión (transporte debido a gradientes de concentración). El estudio de los medios de dispersión y su modelación son el objetivo de este trabajo, y en el capítulo siguiente se analizará detenidamente este parámetro.

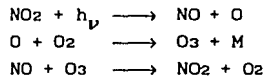
Los contaminantes al ser transportados en la atmósfera tienen contacto con *receptores*, los cuales son todo aquello que es dañado por la contaminación; los seres humanos, animales y vegetales, así como objetos inanimados (especialmente aquellos que se encuentran al aire libre como esculturas, obras arquitectónicas, murales, etc.).

2.1. Clasificación de contaminantes.

La Ley General del Equilibrio Ecológico y Protección al Ambiente, en su artículo tercero indica que la *contaminación* es la presencia en el ambiente de uno o más contaminantes o de cualquier combinación de ellos que cause desequilibrio ecológico, definiendo además como *contaminante* a toda materia o energía, en cualquiera de sus estados físicos y formas que al incorporarse o actuar en la atmósfera, agua, suelo, flora, fauna o cualquier elemento natural, altere o modifique su composición y condición natural (SEDUE, 1987).

Los contaminantes se pueden clasificar por su *origen*, por su *estado físico* y por su *composición* (Tirado y Martínez, 1988).

Por su *origen* se clasifican en *primarios* y *secundarios*. Los *contaminantes primarios* son aquellos emitidos a la atmósfera como resultado de un proceso y están presentes en ella tal y como fueron emitidos. Los *contaminantes secundarios* son aquellos que son formados en la atmósfera como resultado de una transformación química y provienen de sustancias que pueden ser o no contaminantes y cuyas reacciones pueden ser o no fotoquímicas. Como un ejemplo típico tenemos al ozono (O₃), el cual se produce por una serie de reacciones químicas complejas entre sustancias existentes en el aire y la acción de la luz solar. Lo anterior se puede observar en la siguiente reacción de generación de ozono por disociación fotoquímica del dióxido de nitrógeno



donde M es un tercer cuerpo molecular, principalmente nitrógeno u oxígeno, y $h\nu$ se refiere a un fotón de energía solar (Stern et al, 1984). Es importante mencionar aquí que para el estudio de los procesos de formación de contaminantes secundarios, así como para la transformación de los primarios, se emplean actualmente los llamados *modelos matemáticos de química del aire*, dentro de los cuales deberán elegirse, posteriormente, los más adecuados para combinarse con los modelo HOTMAC y RAPTAD que aquí se analizan.

Por su *estado físico* se dividen en contaminantes *gaseosos* y *partículas*. Seinfeld (1978), define como partículas contaminantes a "cualquier sustancia, a excepción del agua pura, presente en la atmósfera en estado sólido o líquido bajo condiciones normales y cuyo tamaño es microscópico o submicroscópico pero siempre superior a las dimensiones moleculares ($0.0002 \mu\text{m}$)". Entre las diferentes clases de partículas en la atmósfera los términos que se utilizan son:

Polvo.- Partículas sólidas dispersas en un gas, originadas por desintegración mecánica de algún material.

Humo.- Pequeñas partículas originadas por la condensación de un vapor sobresaturado, conteniendo concentraciones relativamente elevadas de sustancias con baja presión de vapor (diámetros alrededor de $1\mu\text{m}$).

Niebla.- Suspensión de pequeñas gotitas líquidas formadas por la condensación de un vapor o por atomización. La diferencia entre niebla y humo es el diámetro de las partícula, que en la niebla es mayor, superior a $10\mu\text{m}$. Esta en general se presenta en bajas concentraciones y cuando esta muy concentrada se llama *neblina*.

Aerosol.- Es una nube de partículas microscópicas o submicroscópicas en el aire, tales como polvo, humo y niebla.

Por su *composición química* se dividen en contaminantes *orgánicos* e *inorgánicos*. Entre los contaminantes orgánicos se tiene a muchos productos derivados del petróleo (hidrocarburos), como los combustibles y solventes, los cuales debido a su alta volatilidad se evaporan fácilmente contaminando el aire atmosférico.

Otra manera importante de clasificar y estudiar los contaminantes atmosféricos es de acuerdo a la fuente que los emite. De las cuales presentamos a continuación una breve descripción.

2.2 Fuentes de emisión

Las fuentes de emisión se pueden clasificar por su movilidad en *estacionarias* y *móviles* y por su origen en *naturales* y *antropogénicas* (Stern et al, 1984).

Recibe el nombre de *fente estacionaria* todo aquel punto de emisión cuya localización no cambia con el tiempo. Entre este tipo de fuentes tenemos a toda la industria de transformación como: la industria química, la de resinas, plásticos, barnices y pinturas, manufactura de ácidos, jabones y detergentes, fertilizantes de fosfato, la industria del petróleo, metalúrgica, industria cementera y de materiales de construcción, de papel, madera, etc.

Las *fuentes móviles* son aquellas capaces de desplazarse de un lugar a otro; dentro de este grupo el ejemplo típico son los automóviles, los cuales están provistos de una fuente de poder que se basa en el ciclo de Otto o el de Diesel y utilizan como fuente de energía la quema de hidrocarburos (los más comunes son la gasolina y el diesel). La mayor parte de sus contaminantes son emitidos por el escape como resultado de la combustión; las emisiones de CO, NO_x, SO_x, e hidrocarburos, son características de todos los combustibles fósiles y su emisión se agudiza cuando los motores de los vehículos se encuentran en mal estado (Parker 1983).

Las *fuentes naturales* de contaminación atmosférica se definen como aquellas que no son causadas por las actividades de los seres humanos, como ejemplo tenemos; las erupciones volcánicas, los incendios forestales, las tormentas de arena, los procesos de degradación biológica, los océanos, etc.

Mientras que las *fuentes antropogénicas* son todas aquellas generadas por la actividad humana, y se subclasifican en: *industriales*, de

servicios y personales (Stern et al, 1984)

La industria representa una fuente muy importante de contaminación. En México contribuye aproximadamente con un 15% de las emisiones totales (Bravo 1987), mientras que en los Estados Unidos lo hace con un 20% (Bach 1972). Una gran parte de la contaminación debida a la industria proviene del procesamiento de materiales en bruto, tal como la obtención de metales a partir de minerales, madera de árboles, combustibles del petróleo crudo y roca de cantera. Otra parte es emitida por aquellas industrias que generan productos secundarios, tal es el caso de la obtención de piezas mecánicas a partir de metales, muebles de la madera, pinturas de sólidos y solventes, asfalto a partir de piedra y productos de la petroquímica secundaria.

Actualmente se requiere de una serie de servicios que nos permiten vivir más cómodamente, como la energía eléctrica y el manejo de los desechos (aguas negras y basura); pero los mecanismos de generación de dichos servicios representan una fuente importante de contaminación. La energía eléctrica nos proporciona calefacción, refrigeración de alimentos e iluminación, para obtenerla se emiten al medio una gran cantidad de contaminantes. Para dar un ejemplo: en la carboeléctrica de Río Escondido, Coahuila, durante la generación de 1400 MW, utilizando carbón como combustible, se emiten a la atmósfera 587 Kg/hr de cenizas, 3000 Kg/hr de óxidos de azufre y 7500 Kg/hr de óxidos de nitrógeno (Cruikshank et al, 1990).

En el caso de la disposición de desechos, si éstos son líquidos pueden emitir olores desagradables y microorganismos patógenos y, si se trata de desechos sólidos, el funcionamiento de incineradoras de basura es acompañado por la emisión de gases como CO, hidrocarburos, partículas y los inevitables NO_x (Parker, 1983).

Se consideran como *fuentes personales* las fuentes de contaminación como: automóviles, hornos, chimeneas, estufas caseras, asados al aire libre, quemas de basura y fogatas, cuyo origen esta relacionado directamente con la actividad doméstica. Las fuentes personales en los Estados Unidos representan mayor contribución de contaminantes que las industriales y de servicios juntas (Stern et al, 1984), y lo mismo se observa en la ciudad de México donde la contribución únicamente por automóviles representa el 80% de las emisiones totales (Bravo, 1987).

2.3 Receptores

Como ya ha sido mencionado anteriormente los *receptores* son todo aquello que es dañado por la contaminación (Stern et al, 1984). Son receptores todos los seres vivos: humanos, animales y vegetales, y lo son también aquellos materiales sensibles al efecto de los contaminantes.

2.3.1 Efectos sobre la salud

Muestras dramáticas de que la contaminación atmosférica puede matar, son los episodios de Donora, Poza Rica, Londres y Mause Valey, donde la concentración de uno o más contaminantes alcanzaron concentraciones suficientemente altas para producir la muerte de seres humanos (Seinfeld, 1978). El efecto de la contaminación ambiental, en general se acentúa más en niños, ancianos, y quienes sufren padecimientos crónicos como bronquitis, enfisemas y enfermedades del corazón. Además la exposición continua a altas concentraciones de contaminantes produce padecimientos; los de mayor incidencia en las ciudades son: bronquitis, irritación e infección de los ojos, y alteraciones en la fisiología pulmonar y cambios de la química sanguínea.

Entre los principales contaminantes que se han logrado identificar en el aire como reponsables de los daños a la salud humana son: CO, SO_x, NO_x, oxidantes fotoquímicos, y plomo.

A continuación se presentan brevemente las características de los principales contaminantes atmosféricos y sus efectos sobre los seres humanos (ver Sienfeld, 1978, Stern et al, 1984, Dobbins, 1979 y Parker, 1983).

Monóxido de carbono.- Es un gas inodoro, incoloro y altamente tóxico, su fuente principal son los vehiculos automotores. Los efectos del CO se presentan a nivel sanguíneo, ya que por ser un gas poco soluble en las mucosas orgánicas que cubren las vías respiratorias, logra penetrar junto con el oxígeno hasta lo más profundo de los pulmones donde es difundido por los alvéolos y compite con el oxígeno por uno de los

cuatro átomos de hierro que forman la hemoglobina. El CO tiene una afinidad 210 veces mayor al Fe que el O₂, formándose carboxihemoglobina (COHb), cuya presencia en la sangre repercute en una disminución del transporte de oxígeno. Los efectos por intoxicación de CO dependen de las cantidades absorbidas; para concentraciones del 5% de COHb se observa pérdida de la habilidad para estimar intervalos de tiempo, retardo del tiempo de reacción y reducción de la sensibilidad visual en la oscuridad, para concentraciones de 10 a 20% se observan vértigos, fatiga, y cefalea (dolor de cabeza)

Oxidos de azufre.- Los más importantes son el dióxido de azufre (SO₂) y el trióxido de azufre (SO₃). El SO₂ es el contaminante asociado a los episodios de Londres y Tokio y su principal fuente es la combinación, durante la combustión, del oxígeno del aire con el azufre que se encuentra presente en combustibles como el diesel, carbón y combustóleo. El SO₂ es un gas altamente soluble en la humedad de las mucosas que cubren las vías respiratorias y es absorbido por éstas produciendo constricciones. El trióxido de azufre (SO₃) se genera a partir del SO₂ por efecto de la luz solar y también se produce en pequeñas cantidades en los procesos de combustión. El SO₃ en medios húmedos genera ácido sulfúrico (H₂SO₄), el cual es un ácido inorgánico fuerte que destruye los tejidos y genera constricción de las vías respiratorias; Parker (1983) y SEDUE (1987).

Oxidos de nitrógeno.- Los principales son el monóxido y el dióxido de nitrógeno; se generan por la combustión de materiales en presencia del aire. Estos son los principales causantes de la formación del *smog* o *neblinismo*. Sus principales fuentes son los vehículos automotores y los equipos industriales de combustión. Bajo condiciones atmosféricas el monóxido se transforma en dióxido de nitrógeno, que es un gas tóxico que se transforma en nitrosaminas dentro de los pulmones (de las cuales algunas pueden ser carcinogénicas), o pasa a la sangre y forma metahemoglobina, la cual impide el transporte de oxígeno en los glóbulos rojos. Los efectos de este gas, van desde una irritación moderada hasta una congestión grave y la muerte. Para exposiciones prolongadas de 1 ppm se sabe que el NO₂ irrita los alvéolos pulmonares produciendo síntomas parecidos al enfisema (Parker, 1983).

Oxidantes fotoquímicos.- Se conoce así a todos aquellos contaminantes secundarios generados en la atmósfera por reacciones químicas debidas a

la luz solar (reacciones fotoquímicas), entre ellos el más común es el ozono, O_3 , y algunos hidrocarburos oxigenados como el nitrato de peroxiacetileno (PAN), de peroxibencilo (PBzN), formaldehído (HCHO) y acroleína (CH_2CHCHO). El O_3 en concentraciones de 1ppm produce estrechamiento de los conductos profundos de los pulmones, aumentando la resistencia al paso del aire y acelerando el envejecimiento de los tejidos pulmonares por oxidación de las proteínas. Un efecto general del *smog fotoquímico* es la irritación de los ojos, aunque aún no se tienen identificados todos los compuestos, ni se conocen los mecanismos que producen este malestar.

Plomo.— Las fuentes principales de este contaminante atmosférico son los vehículos automotores a gasolina, la incineración de compuestos sólidos, de aceites de desecho y algunos procesos de manufactura. El plomo inhibe la generación de la hemoglobina, degrada las funciones renales, y altera el sistema nervioso, siendo los niños la población más sensible.

Las dos rutas de entrada del plomo a nuestro organismo son: la respiración y la ingestión. Se ha observado que la concentración de plomo en la sangre tiene relación con la concentración de plomo en el aire; se puede retener hasta un 60% del plomo que se respira, de éste, el 5% es retenido por los tejidos sanguíneo y blandos (higado, pulmones y riñones) donde se acentúan sus efectos, y el 95% pasa al sistema óseo. La eliminación del plomo del organismo es un proceso muy lento y principalmente ocurre por la orina, el excremento y en cantidades menores el sudor, los cabellos y las uñas.

2.3.2 Efectos sobre el medio ambiente

Una gran cantidad de vegetales, forrajes y cultivos de flores, son afectados por los contaminantes del aire. Los daños se observan en las hojas, la disminución de las cosechas y en el tamaño de los frutos, así como en la destrucción de las flores. Los contaminantes gaseosos penetran con el aire por los estomas durante la respiración de la planta, destruyendo la clorofila y frenando la fotosíntesis (Seinfeld, 1978). Otros contaminantes como el hollín, polvos y humos, ensucian y bloquean los estomas impidiendo la respiración y el paso de la luz. Algunas especies son muy sensibles a ciertos tipos de

contaminantes, por lo que representan un parámetro útil para evaluar la calidad del aire. Las principales sustancias que han logrado ser identificadas responsables de los daños a los vegetales, son: el etileno, nitrato de peroxiacetileno (PAN), lluvia ácida, fluoruros, ozono y oxidantes orgánicos.

La contaminación también afecta directamente a muchos materiales, como metales, productos pétreos y materiales de origen orgánico (madera, telas, piel y pinturas). El daño producido por la contaminación en las construcciones arquitectónicas es considerable, el mármol y en general los materiales de construcción son ensuciados por el hollín y carcomidos por el efecto de la lluvia ácida, ésta última junto con oxidantes como el ozono atacan de manera considerable a los metales, la ropa, muebles, libros, zapatos y otros artículos fabricados con materiales de origen orgánico.

Además la presencia de los contaminantes en el aire produce alteraciones en la atmósfera, éstas son: reducción de la visibilidad, formación de neblina y reducción en la incidencia de luz solar.

La *reducción de la visibilidad* es el efecto más fácilmente observable de la contaminación atmosférica, se debe a la presencia de partículas y gases que reflejan o absorben la luz que incide sobre ellos. El grado de visibilidad depende del tamaño y concentración de las partículas, así como de su índice de refracción.

La *producción de neblina* se ha observado que es más frecuente en las ciudades que en el campo, a pesar de que en éstas, existe menor humedad relativa y de que la temperatura del aire tiende a ser más alta. Este fenómeno es debido a la presencia de partículas en el aire urbano que funcionan como núcleos de condensación. Las principales sustancias responsables de la generación de neblina son los óxidos de azufre y de nitrógeno; Seinfeld (1978).

La presencia de partículas contaminantes en la atmósfera absorbe, difracta y refleja la luz solar antes de llegar a la superficie de la tierra, teniendo como resultado una *reducción de la radiación solar* que incide sobre ésta. Esta reducción en el aire contaminado puede representar de un 10 a 20% de la incidencia total durante la primera y la última hora del día que es cuando el ángulo de inclinación solar es

menor y la luz cubre una mayor trayectoria de aire contaminado.

Ahora bien, una vez mencionados los efectos de la contaminación atmosférica, es importante señalar las acciones legislativas que han sido promovidas para su control.

2.3.3 Legislación

Los criterios de calidad del aire están basados en estudios epidemiológicos y estadísticos realizados en diversos países. Estos estudios consisten en tomar datos sobre el estado de salud de habitantes expuestos a diferentes tipos de contaminantes, de trabajadores expuestos en atmósferas laborales extremas y de animales y vegetales bajo condiciones de experimentación; de todos estos datos se obtienen los valores límite que los seres humanos, animales y vegetales pueden soportar sin sufrir consecuencias. Estos valores se conocen como *criterios de calidad de aire* (Stern et al, 1984), y a partir de ellos los gobiernos de cada país establecen las *normas de calidad del aire*, las cuales son concentraciones *deseables* que se pretende no rebasar dentro de la atmósfera del país correspondiente, a fin de asegurar el bienestar de sus pobladores. En la tabla 2.1 se presentan las Normas Mexicanas de Calidad del Aire (Bravo, 1987).

Tabla 2.1 Normas Mexicanas de Calidad del Aire

CONTAMINANTE	TIEMPO DE EXPOSICION horas	CONCENTRACION	
		ppm	$\mu\text{g}/\text{m}^3$
Partículas suspendidas totales (PST)	24	—	275
Dióxido de azufre (SO_2)	24	0.13	341
Monóxido de carbono (CO)	8	13	14920
Dióxido de nitrógeno (NO_2)	1	0.21	395
Ozono (O_3)	1	0.11	216

Finalmente, una vez establecidas las normas de calidad, es necesario iniciar acciones que conduzcan a obtener la calidad del aire que se establece en estas normas. Dentro de estas acciones quizá la más importante es el establecimiento de *normas de emisión* mediante las cuales se establecen las concentraciones máximas que pueden ser emitidas por un proceso industrial o actividad humana.

Con el fin de conocer el efecto global que sobre la calidad del aire tendrá el imponer una norma de emisión, es conveniente realizar una *evaluación de alternativas*. Por lo tanto, en capítulo siguiente se presentan las bases para la elaboración de modelos matemáticos que permitan realizar correctamente esta evaluación de manera rápida y económica.

3 DISPERSION ATMOSFERICA

En este capítulo se analizan los factores físicos que afectan la dispersión de contaminantes en la atmósfera, así como las bases de flujo de fluidos en que se sustentan las ecuaciones de los modelos HOTMAC y RAPTAD que se presentan en el capítulo siguiente.

Se entiende por dispersión al transporte de una especie o propiedad en un medio. En este caso las especies de interés son los contaminantes y el medio es el aire. La dispersión se lleva a cabo mediante los mecanismos de *difusión* y *convección*: el primero es debido a un gradiente y el segundo a un flujo. El peso que tiene cada uno de estos mecanismos en el transporte de contaminantes está determinado por factores como: *meteorología, topografía y características fisicoquímicas de la emisión* (Aguirre, 1991).

3.1 Factores meteorológicos

Los factores meteorológicos más importantes que actúan sobre la dispersión son: el *gradiente de temperaturas, la dirección y velocidad del viento, y la altura de la capa de mezcla* (Aguirre, 1991).

3.1.1 Gradiente térmico

Se le da este nombre a la diferencia de temperaturas que existe entre las capas de aire en la atmósfera. Este gradiente (perfil de temperaturas), es provocado por la diferencia que existe entre la temperatura de la superficie de la Tierra y la atmósfera, debido a que la radiación solar que incide sobre el planeta es captada en diferentes grados por la atmósfera y la superficie del suelo de acuerdo con las propiedades fisicoquímicas de cada medio.

Durante el día, de toda la radiación solar que llega a nuestro planeta, aproximadamente el 66% es absorbido (19% por la atmósfera y 47% por la superficie de la Tierra) y el 34% restante es reflejado (25 % por las nubes, 7% por la atmósfera y 2% por la Tierra); Seinfeld (1978). Como se observa, la mayor cantidad de la energía es retenida por el suelo, que presenta mayor temperatura y calienta las capas de aire cercanas. Este gradiente de temperaturas provoca movimiento vertical de las masas de aire, por efecto de diferencia de densidades, ya que el aire caliente tiende a ascender mientras que el frío a descender (Oke, 1987).

Durante la noche el suelo se enfría al irradiar, en onda larga, la energía almacenada, pudiendo llegar a ser menor su temperatura que la del aire, provocando un perfil de temperaturas inverso al que se presenta en el día, lo que es conocido como *inversión térmica* (ver figura 3.1). Este fenómeno se caracteriza por la ausencia de movimiento vertical del aire, lo que produce reducción en la intensidad de mezclado y mayor concentración de contaminantes. Cabe señalar que fue bajo esta condición meteorológica que se suscitaron los episodios de Mouse Valley, Donora y Londres (Stern et al, 1984).

La *inversión térmica* es un fenómeno natural que no es producido por la contaminación, como generalmente se cree, pero que sí puede ser agravado por esta, ya que retarda el proceso natural de calentamiento por radiación solar al formar una espesa capa de contaminantes, de unos cuantos metros de altura, que disminuye el paso de la radiación hacia la superficie terrestre.

El gradiente térmico esta relacionado con la llamada *estabilidad atmosférica*, la cual se define como la capacidad de la atmósfera para eliminar o acrecentar los movimientos convectivos del aire originados por gradientes térmicos (Aguirre, 1991).

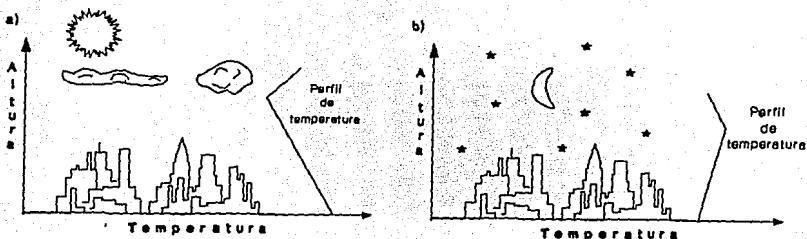


Fig 3.1 Gradiente térmico con inversión nocturna:
a) el día y b) la noche

Comparando el gradiente adiabático seco ($-0.986 \text{ } ^\circ\text{C}/100\text{m}$) y el gradiente térmico medido en una determinada zona, se observa que: si el valor del gradiente medido es menor al teórico, existirá movimiento entre las capas atmosféricas y por lo tanto menor estabilidad; si el gradiente medido es mayor, habrá menor movimiento del aire; y será nulo cuando el gradiente térmico sea igual a cero o positivo. En este último caso, la temperatura aumenta con la altura existiendo una inversión térmica.

Para representar el gradiente térmico atmosférico generalmente se emplea la denominada *temperatura potencial*, la cual es la temperatura ambiente referida (bajo condiciones adiabáticas) a una presión estandar correspondiente a nivel del mar, esto es:

$$\theta = T_v (p_0/p)^\gamma \quad (3.1)$$

donde $\gamma = R_d/C_p$ y $R_d \equiv R/m_{vap}$

3.1.2 Velocidad y dirección del viento

Estos factores son de gran importancia en el comportamiento de los contaminantes, ya que de la velocidad del viento depende la rapidez de

su dispersión y de la dirección la trayectoria que estos tomen. Los vientos son generados por el efecto de los gradientes térmicos y la rotación de la Tierra. En este estudio, los vientos de interés son aquellos que se encuentran dentro de la capa límite planetaria, y que son determinados por los *gradientes horizontales de presión* y las *fuerzas de fricción*, de *gravedad* y de *Coriolis* (Seinfeld, 1978).

3.1.3 Altura de la capa de mezcla

También es conocida como *capa límite planetaria* y se encuentra situada en la tropósfera; desde la superficie de la tierra hasta la altura en la cual desaparecen los efectos turbulentos provocados por los gradientes térmicos y la rugosidad del suelo. Esta zona se caracteriza por el constante movimiento del aire, razón por la cual es donde se efectúa el transporte (vertical y horizontal) y dispersión de los contaminantes (Oke, 1987).

El espesor de la capa límite varía de manera cíclica en periodos de un día, debido a que está directamente relacionado con el calentamiento de la superficie de la tierra por acción de la radiación solar; razón por la cual durante el día crece hasta alcanzar su nivel máximo (1000 a 2000 m después del medio día), y durante la noche disminuye a su altura mínima (menos de 100 m) antes de salir el sol, e incluso puede llegar a ser nula cuando existe inversión térmica (Oke, 1987). La dispersión de los contaminantes está directamente relacionada con el espesor de la capa de mezcla, ya que su concentración disminuye conforme aumenta la altura de la capa; a mayor elevación, mayor volumen para diluir los contaminantes y por lo general, mayor turbulencia.

3.2 Topografía y características de emisión

La topografía produce dos efectos distintos: la generación de vientos y su alteración. Los ríos, océanos, montañas, desiertos y valles poseen diferentes características que producen gradientes horizontales de temperatura y presión, causantes a su vez del movimiento de aire: *viento* (Hidy, 1972). Por otra parte la formación y características del terreno (topografía) son factores muy importantes en la modificación

local de los patrones globales de viento, los cuales al tener contacto con árboles, edificios, montes o rugosidad del suelo, se transforman en vórtices turbulentos o corrientes de efecto local.

La topografía puede ser un factor decisivo en la dispersión, ya que de ella depende la rápida dilución (por generación de turbulencia) o el estancamiento de los contaminantes (formación de zonas muertas o recirculaciones). En el modelo meteorológico que aquí se estudia la topografía es tomada en cuenta haciendo una reproducción del terreno de interés por modelado directo dentro del dominio de cálculo (ver inciso 4.1.1).

Uno de los principales efectos de la topografía sobre el proceso de dispersión de contaminantes, y de especial interés para el estudio de la contaminación en la Cuenca de México, es el efecto *valle-montaña*, el cual produce corrientes locales que contribuyen al aumento de la concentración dentro de la cuenca.

Al hablar de la importancia de los factores meteorológicos en el inciso 3.1.1 se señaló la existencia de gradientes térmicos y su relación directa con la llamada estabilidad atmosférica, por lo que aquí sólo mencionaremos que, al existir un gradiente térmico similar en la cima de una montaña y en el fondo de un valle, la distribución de presiones determina durante el día la circulación del viento que sube del valle hacia la montaña, mientras que por la noche se observa el efecto contrario, regido por los gradientes térmicos, que produce una corriente descendente montaña-valle (ver figura 3.2).

En el ejemplo de aplicación que se presenta en el capítulo cinco, se observa claramente la influencia de la topografía sobre el campo local de vientos y se discute la influencia del efecto montaña-valle.

La concentración de los contaminantes a nivel del piso es función de la micrometeorología de la zona, de la calidad de la emisión (concentración del contaminante en el efluente) y de la *altura efectiva de emisión*; ésta última es resultado de la altura física de la chimenea y de la altura que alcanza la emisión antes de perder su ímpetu e incorporarse al régimen de viento. El ímpetu es función de la temperatura y velocidad que presentan los contaminantes al ser emitidos por la fuente y (Echois, 1976).

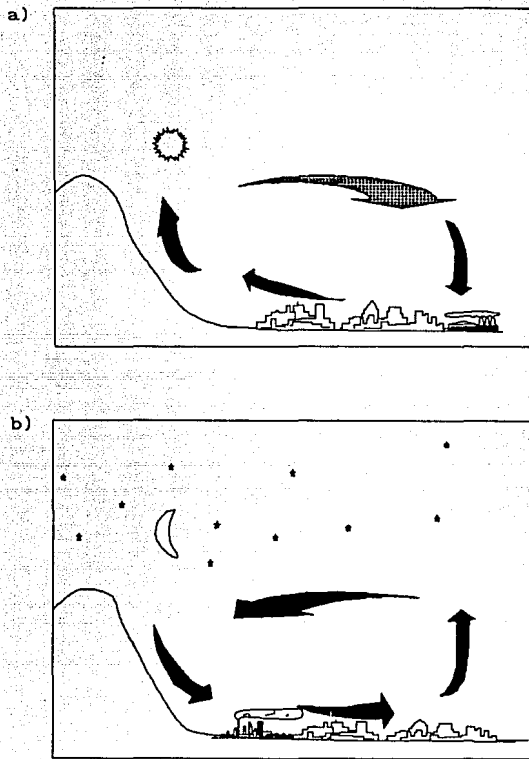


Fig 3.2 Efecto valle-montaña: a) día; b) noche

En este trabajo (modelo RAPTAD), las características de emisión se emplean como dato de entrada del programa de cómputo: gasto, concentración, temperatura y punto de emisión; y la altura efectiva se estima indirectamente al evaluar el término de flotación (diferencia de densidades por temperatura).

3.3 Ecuaciones fundamentales

Las ecuaciones generales que describen el flujo de cualquier fluido son: *conservación de masa, transporte de momento y transporte de escalares*, siendo estos últimos cualquier propiedad del fluido que se transporta junto con este. La forma instantánea de cada una de estas ecuaciones en notación tensorial (ver apéndice 1) es:

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_1}(\rho u_1) = 0 \quad (3.2)$$

Ecuación de momento

$$\frac{\partial \rho u_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_1) = \frac{\partial \sigma_{1j}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_1} + g_1 \quad (3.3)$$

Ecuación de transporte de escalares

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[K \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right] + S_j \quad (3.4)$$

3.3.1 Ecuación de continuidad

Para establecer el fundamento de cada uno de los principios de conservación representados por las ecuaciones anteriores, se realiza un balance del parámetro en cuestión. Para el caso de la conservación de masa (principio de continuidad) se considera el volumen de control presentado en la figura 3.3, en donde la variación de masa en una dirección se representa como:

$$\left[\rho u_1|_1 - \rho u_1|_2 \right] \delta y \delta z = \left[\rho u_1|_1 - \rho u_1|_1 - \frac{\partial \rho u}{\partial x} \Big|_1 \delta x - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho u}{\partial x^2} \Big|_1 (\delta x)^2 - \dots \right] \delta y \delta z = \frac{\delta M}{\delta t} \quad (3.5)$$

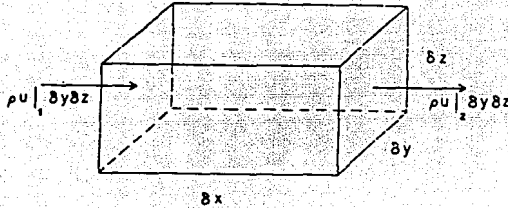


Fig 3.3 Balance de masa

donde el flujo de salida, $\rho u|_2$, es expresado en forma unidimensional mediante una expansión en serie de Taylor y $\delta M/\delta t$ es el incremento o decremento de la masa en el tiempo. Despreciando en la expresión anterior los términos de la serie de ordenes mayores a uno se obtiene la siguiente ecuación:

$$-\left. \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right|_1 \delta x \delta y \delta z \approx \frac{\delta M}{\delta t} \quad (3.6)$$

y como: $M = \rho V$, la expresión anterior se puede escribir:

$$-\left. \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right|_1 \delta x \delta y \delta z \approx V \frac{\delta \rho}{\delta t} \quad (3.7)$$

suponiendo que el volumen no varía con el tiempo.

Ahora bien, al considerar los flujos que cruzan por los lados $\delta x \delta y$ y $\delta x \delta z$, la ecuación para el flujo total de masa a través del volumen de control es:

$$-\left. \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right|_1 \delta x \delta y \delta z - \left. \frac{\partial \rho v}{\partial y} \right|_1 \delta x \delta y \delta z - \left. \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right|_1 \delta x \delta y \delta z \approx V \frac{\delta \rho}{\delta t} \quad (3.8)$$

Dividiendo los dos miembros entre el volumen, se tiene

$$-\left. \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right|_1 - \left. \frac{\partial \rho v}{\partial y} \right|_1 - \left. \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right|_1 \approx \frac{\delta \rho}{\delta t} \quad (3.9)$$

y considerando incrementos de tiempo y espacio suficientemente pequeños tal que sus límites tiendan a cero, se tiene que:

$$\lim_{\substack{\delta x, \delta y \rightarrow 0 \\ \delta z, \delta t \rightarrow 0}} \left[-\left. \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right|_1 - \left. \frac{\partial \rho v}{\partial y} \right|_1 - \left. \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right|_1 \right] = \lim_{\substack{\delta x, \delta y \rightarrow 0 \\ \delta z, \delta t \rightarrow 0}} \frac{\delta \rho}{\delta t} \quad (3.10)$$

o, en forma equivalente

$$-\frac{\partial \rho u}{\partial x} - \frac{\partial \rho v}{\partial y} - \frac{\partial \rho w}{\partial z} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (3.11)$$

La expresión anterior es conocida como ecuación de conservación de masa o también llamada *ecuación de continuidad*. En notación tensorial se recupera la ecuación (3.1).

3.3.2 Ecuación de transporte de momento

La ecuación de transporte de momento, o movimiento, se realiza a partir de la segunda ley de Newton, la cual establece que las variaciones de movimiento son el resultado de la suma de todas las fuerzas que actúan sobre un sistema, esto es

$$\frac{D u_i}{D t} = \sum f_i \quad (3.12)$$

Para el caso de la atmósfera, las fuerzas presentes que tienen influencia sobre el movimiento son los gradientes de presión, la fuerza de Coriolis, la fuerza de fricción y el campo gravitatorio.

Para establecer la forma de variación e influencia de cada una de estas fuerzas, se realizará un análisis en el volumen de control de la figura 3.4, donde se tienen dos presiones contrarias aplicadas

unidireccionalmente en las caras $\delta y \delta z$; la diferencia de presión puede ser entonces expresada mediante la expansión de la serie de Taylor de la forma siguiente (Pielke, 1984)

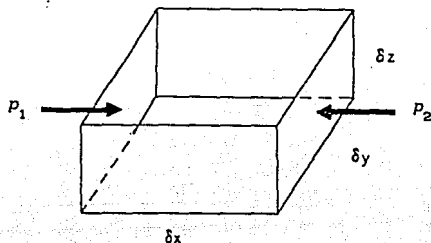


Fig 3.4 Balance de fuerzas externas

$$p_2 - p_1 = \left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_1 \delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right|_1 (\delta x)^2 + \dots + O((\delta x)^3) \quad (3.15)$$

si la presión aplicada en el área total, A , la expresamos por unidad de masa, M , se obtiene como resultado la fuerza aplicada en la dirección x , esto es

$$f_p = \frac{(p_2 - p_1)A}{M} = \frac{\partial p}{\partial x} \left|_1 \frac{\delta x A}{M} + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right|_1 (\delta x)^2 \frac{A}{M} + \dots \right. \quad (3.14)$$

sustituyendo $A = \delta y \delta z$ y $M = \rho V = \rho \delta x \delta y \delta z$ en la ecuación anterior

$$f_p = - \frac{1}{\rho} \left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_1 + \frac{1}{2\rho} \left. \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right|_1 \delta x + \dots \quad (3.15)$$

considerando incrementos en tiempo y espacio suficientemente pequeños que sus límites tiendan a ser cero se tiene que

$$f_p = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \left[- \frac{1}{\rho} \left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_1 - \frac{1}{2\rho} \left. \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right|_1 \delta x - \dots \right] = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (3.16)$$

En forma similar se establece un balance para otras fuerzas externas (fuerza de coriolis y gravedad) y para las fuerzas internas, que se refieren a la disipación o creación de momento por movimientos moleculares. Los efectos de estas últimas son expresados en términos de la viscosidad de gas o líquido y la deformación del campo de momento.

Las fuerzas internas son también conocidas como fuerzas de superficie (suponiendo superficies imaginarias de un volumen de control), y se les asocian siempre dos direcciones: la dirección en la cual la fuerza actúa y la dirección normal a la superficie sobre la que actúa; si estas dos direcciones son iguales se trata de una fuerza *normal* y si son perpendiculares se trata de un *esfuerzo cortante* (ver figura 3.5); (Cebeci y Bradshaw 1984).

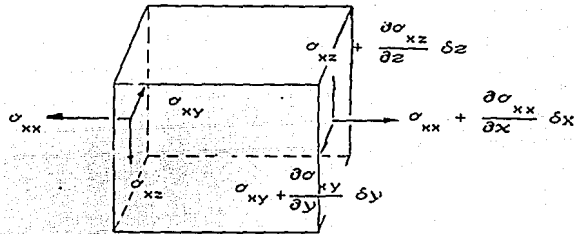


Fig. 3.5 Tensor de esfuerzos

En forma general, la ecuación (3.12) puede entonces escribirse como

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + g_i + f_i \quad (3.17)$$

donde σ_{ij} es el tensor de esfuerzos; g_i es la fuerza de gravedad y f_i cualquier otra fuerza.

$$\sigma_{ij} = \mu \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \sigma_{ij} \quad (3.18)$$

3.3.3 Ecuación de transporte de escalares

El siguiente balance es válido para cualquier propiedad de un fluido, que se transporte junto con él, y que este representada por una cantidad escalar. A partir del volumen de control de la figura 3.6 se puede establecer que:

$$\text{Difusión} + \text{Convección} \mp \text{Generación} = \text{Variación neta} \quad (3.19)$$

donde el transporte difusivo es igual a la diferencia entre los flujos, F , de entrada y salida, en la dirección x , que puede ser escrita (siguiendo el procedimiento del inciso 3.3.1) como:

$$(F_x|_1 - F_x|_2)\delta y\delta z = - \frac{\partial F}{\partial x} \Big|_1 \delta x\delta y\delta z \quad (3.20)$$

en donde $F\delta x\delta y\delta z$ puede ser sustituida por \mathcal{F} , que será evaluada a partir de la ecuación general de difusión (ley de Fourier para calor, y ley de Fick para masa), esto es:

$$\mathcal{F}_x = - K_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (3.21)$$

de donde el término difusivo, ecuación (3.20), podrá ser reescrito en el límite, como:

$$(F_x|_1 - F_x|_2)\delta x\delta y = - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (3.22)$$

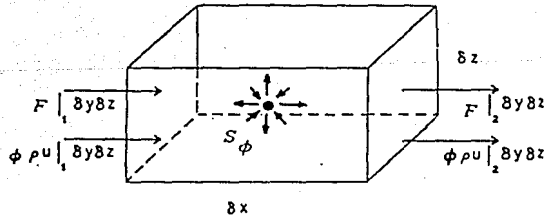


Fig 3.6 Balance de escalares

En forma similar, el transporte convectivo estará dado por la diferencia en los flujos, $\rho u \phi$, de entrada y salida. De donde la ecuación (3.19), sobre el eje x, puede ser escrita como

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \phi}{\partial x} u = - \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + S_x \quad (3.23)$$

siendo S_x el término correspondiente a la generación o pérdida.

Aplicando el balance anterior para las tres direcciones de flujo se tiene que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \phi}{\partial x} u + \frac{\partial \rho \phi}{\partial y} v + \frac{\partial \rho \phi}{\partial z} w = & - \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] \\ & - \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] + S_x \end{aligned} \quad (3.24)$$

que, en forma tensorial, recupera la ecuación (3.4).

En las ecuaciones fundamentales de transporte, ecuaciones (3.2), (3.3) y (3.4), pueden distinguirse cuatro clases de términos:

Término temporal.- Representa la variación con respecto al tiempo de alguna propiedad del fluido ($\partial / \partial t$).

Término convectivo.- También conocido como término advectivo, representa el transporte debido a la velocidad de flujo.

Término difusivo.- Representa el transporte debido a la existencia de gradientes.

Término fuente.- Dentro de este término se incluyen todos aquellos efectos que trastornan el flujo y no queden incluidos dentro de los términos anteriores, como pueden ser: fuerzas de cuerpo que afecten el flujo de momento (fuerza gravitacional o flotación), pérdidas de calor dentro de la ecuación de temperatura (sistema no adiabático), creación o destrucción de una especie química (proceso de combustión), etc.

Finalmente, debido a la naturaleza turbulenta de la atmósfera, es necesario considerar este comportamiento dentro de las ecuaciones fundamentales de transporte (3.2 a 3.4) y obtener expresiones matemáticas que describan dicho comportamiento.

3.4 Turbulencia

Para representar el comportamiento de flujo turbulento se sustituirá el valor instantáneo de cada variable por un valor medio estadístico y un valor de fluctuación con respecto a la media, esto es:

$$\begin{aligned} u_1 &= \bar{u}_1 + u_1' \\ \rho &= \bar{\rho} + \rho' \\ h &= \bar{h} + h' \end{aligned} \quad (3.25)$$

donde el valor medio se define estadísticamente como:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \phi(t) dt \quad (3.26)$$

y la media de las fluctuaciones es igual a cero:

$$\bar{\phi}' = 0 \quad (3.27)$$

Al sustituir las ecuaciones (3.25) en las ecuaciones fundamentales y promediar en el tiempo, se obtiene:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_1} (\bar{\rho} \bar{u}_1 + \overline{\rho' u_1'}) = 0 \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} u_1 + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} u_j u_1 + \overline{\rho' u_j u_1'}) = \frac{\partial \bar{\sigma}_{1j}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_1} + \bar{g}_1 \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \phi + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} u_j \phi + \overline{\rho' u_j \phi'}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[K_j \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_j} \right] + \bar{S}_\phi \quad (3.30)$$

Estas ecuaciones forman un sistema abierto el cual requiere para su solución ser modelado matemáticamente. En el capítulo siguiente se presentan las ecuaciones de transporte del modelo HOTMAC y el sistema de cerradura empleado para su solución. Además se presentan otros aspectos matemáticos importantes de este modelo y del modelo RAPTAD empleado para estudiar la difusión.

4 MODELOS MATEMATICOS

En el capítulo anterior se estudiaron las ecuaciones fundamentales que rigen el fenómeno de flujo de fluidos, y por tanto describen el movimiento del aire en la atmósfera. En este capítulo se continuará este análisis presentando la forma en que los modelos HOTMAC y RAPTAD manejan estos principios de transporte y calculan los campos de velocidad y temperatura dentro de los cuales se distribuyen y reaccionan los contaminantes emitidos a la atmósfera.

En el Laboratorio Nacional de los Alamos, se desarrollaron dos modelos matemáticos con el objeto de predecir los campos de viento, humedad y temperatura, y la distribución de los contaminantes en la atmósfera. Estos modelos, y sus programas de cómputo correspondientes, son conocidos como: *HOTMAC* y *RAPTAD*; el primero *High Order Turbulence Model for Atmospheric Circulation* resuelve las ecuaciones de continuidad, momento, temperatura y humedad, mientras que el segundo *Random Particle Transport and Diffusion* predice el mecanismo de dispersión de especies gaseosas emitidas a la atmósfera.

4.1 HOTMAC

El modelo meteorológico *HOTMAC* (Modelo de Turbulencia de Orden Alto para Circulación Atmosférica), fue originalmente desarrollado por Yamada (1978) con el fin de contar con una herramienta que permitiera predecir las condiciones meteorológicas de zonas de complicada topografía. Este modelo ha sido empleado, entre otros, para los siguientes estudios (mencionados en Yamada et al, 1989): capa límite superficial (Mellor, 1973); flujo sobre arboledas altas (Yamada, 1982); transporte de contaminación atmosférica (Yamada, 1977); capa límite oceánica (Mellor y Durbin, 1975); flujo sobre lagunas de enfriamiento (Yamada, 1979); flujos de laboratorios (Briggs, Mellor y Yamada, 1977); flujo sobre terrenos complejos (Yamada, 1983); y varios estudios de capa límite atmosférica (Mellor y Yamada, 1974; Yamada y Mellor, 1975; Yamada, 1975; Yamada y Mellor, 1979; Yamada y Kao, 1986).

HOTMAC se basa en la solución numérica de las ecuaciones diferenciales de transporte, empleando un *modelo de turbulencia* de segundo orden, el cual se describe brevemente a continuación.

4.1.1 Ecuaciones fundamentales

Las ecuaciones de transporte de este modelo se plantean en tres dimensiones y con variación temporal, empleando una corrección de altura para introducir las variaciones de topografía dentro del área de estudio. La fórmula para modificar la componente vertical del dominio de cálculo es:

$$z^* = z_D \frac{z - z_g}{z_{\max} - z_g} \quad (4.1)$$

donde z_D y z_{\max} son las alturas del dominio de cálculo para el sistema corregido, z^* , y el sistema topográfico, z_g , respectivamente.

Incluyendo esta corrección de altura en las ecuaciones presentadas en el capítulo anterior, es posible escribir el sistema de ecuaciones que resuelve este modelo. Esto es, la ecuación de continuidad, empleando

la aproximación hidrostática (Yamada et al, 1989), es:

$$\frac{\partial \bar{u}_3^*}{\partial z^*} + \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1} + \frac{1}{z_{\max} - z_g} \left[\bar{u}_1 \frac{\partial z_g}{\partial x_1} \right] = 0 \quad (4.2)$$

Las ecuaciones de transporte de momento se resuelven solamente para el plano horizontal (componentes norte-sur y este-oeste del viento):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1} = & f(u - u_j^g)(1 - \delta_{1j}) + g \frac{z_D - z^*}{z_D} \left[1 - \frac{\langle \theta_v \rangle}{\theta_v} \right] \frac{\partial z_g}{\partial x_1} \\ & + \frac{\partial}{\partial x_1} \left[K_{1j} \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1} \right] + \frac{z^*}{z - z_g} \left[- \frac{\partial \bar{u}_1' \bar{u}_3'}{\partial z^*} \right] \end{aligned} \quad (4.3)$$

en donde el término fuente ha sido modificado para incluir el efecto de las fuerzas de Coriolis, u_j^g , y la contribución del efecto de flotación debido a la temperatura; si la temperatura promedio correspondiente a un plano horizontal, $\langle \theta_v \rangle$, es menor a la temperatura potencial virtual, θ_v , existe un término positivo en la ecuación (4.3) que representa el efecto de flotación.

El término de difusión que aparece en la ecuación de momento para flujo turbulento, ecuación (3.29), como un tensor de esfuerzos, ha sido escrito aquí en función de un coeficiente de difusión horizontal el cual se evalúa de acuerdo con el modelo nivel 2 discutido por Mellor y Yamada (1974):

$$K_{1j} = c (\Delta x_1) (\Delta x_j) \{ |\partial \bar{u}_1 / \partial x_j| + |\partial \bar{u}_j / \partial x_1| \} \quad (4.4)$$

y la constante c es determinada, por medio de experimentos numéricos, igual a 0.01.

Es importante mencionar que siguiendo la aproximación de Bousinesq, este modelo sólo considera la contribución vertical del flujo turbulento, $\bar{u}_1' \bar{u}_3'$, el cual se estima mucho mayor que los posibles efectos horizontales.

Los escalares incluidos en este modelo son la temperatura y la humedad, y las correspondientes ecuaciones de transporte son:

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left[K_1 \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_1} \right] + \frac{z}{z-z_g} \left[\frac{\partial}{\partial z} (-\bar{u}_3' \bar{\theta}') \right] + \frac{1}{\rho C_p} \frac{\partial R_N}{\partial z} \quad (4.5)$$

y:

$$\frac{\partial \bar{h}}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{h}}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left[K_1 \frac{\partial \bar{h}}{\partial x_1} \right] + \frac{z}{z-z_g} \frac{\partial}{\partial z} (-\bar{u}_3' \bar{h}') \quad (4.6)$$

Comparando la ecuación (3.30) del capítulo anterior con estas dos, podemos observar claramente la misma estructura. En la ecuación de energía térmica (temperatura potencial) existe un término fuente, el cual se evalúa a partir del flujo neto de radiación de onda larga, $R_N/\rho C_p$, mientras que en la ecuación correspondiente a la humedad (ecuación 4.6) no existe término fuente (Williams y Streit, 1990).

Las ecuaciones básicas de este modelo (ecuaciones 4.2, 4.3, 4.5 y 4.6) forman un sistema abierto de ecuaciones el cual no es posible resolver. De acuerdo con el modelo de turbulencia de orden alto seleccionado por Yamada (Mellor y Yamada, 1982), para cerrar este sistema, es necesario introducir dos expresiones diferenciales más, que permitan evaluar los términos turbulentos $\bar{u}_3' \bar{u}_1'$, $\bar{u}_3' \bar{\theta}'$ y $\bar{u}_3' \bar{h}'$. Las dos nuevas ecuaciones corresponden a la energía cinética turbulenta y su escala de longitud, esto es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (q^2/2)}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial (q^2/2)}{\partial x_1} &= \frac{\partial}{\partial x_1} \left[K_1 \frac{\partial (q^2/2)}{\partial x_1} \right] + \frac{z}{z-z_g} \left[-\bar{u}_1' \bar{u}_3' \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} \right] + \beta g \bar{u}_3' \bar{\theta}' \\ &+ \left[\frac{z}{z-z_g} \right]^2 \left[\frac{\partial}{\partial z} q_1 S_q \frac{\partial (q^2/2)}{\partial z} \right] - \frac{q^3}{B_1} \end{aligned} \quad (4.7)$$

y para la longitud de mezclado:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (q^2 l)}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial (q^2 l)}{\partial x_1} &= \frac{\partial}{\partial x_1} \left[K_1 \frac{\partial (q^2 l)}{\partial x_1} \right] + F_{11} \left[\frac{z}{z-z_g} (-\bar{u}_1' \bar{u}_3' \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z}) \right] + \beta g \bar{u}_3' \bar{\theta}' \\ &+ \left[\frac{z}{z-z_g} \right]^2 \left[\frac{\partial}{\partial z} q_1 S_1 \frac{\partial (q^2 l)}{\partial z} \right] - \frac{q^3}{B_1} \left[1 + F_2 \left(\frac{l}{Kz} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.8)$$

la estructura de estas dos nuevas ecuaciones es similar a la ecuación de transporte de escalares, incluyendo una serie de términos en los que se introducen, por medio de parámetros empíricos (F_1 , F_2 , S_1 , S_q y B_1),

los efectos turbulentos esperados. El valor de estas constantes empíricas (1.8, 1.33, 0.2, 0.2 y 16.6 respectivamente) y su deducción, han sido detallados en Mellor y Yamada (1982), por lo que aquí sólo es conveniente mencionar que la mayoría de los experimentos realizados para su evaluación corresponden a escalas de laboratorio.

La relación entre estas dos variables de modelación, q y l , y los parámetros básicos de análisis (u_1 , θ y h) se establece mediante la siguiente descripción de los términos turbulentos:

$$\overline{u_3' u_1'} = - l q \tilde{S}_K \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} \quad (4.9)$$

$$\overline{u_3' \phi'} = - \alpha l q \tilde{S}_K \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial z} \quad (4.10)$$

donde \tilde{S}_K es función del número de Richardson, y α relaciona los coeficientes de difusividad y viscosidad turbulenta ($\alpha = K_H/K_M$); sus valores se establecen en Yamada (1983).

De lo anterior, resulta un sistema cerrado de once ecuaciones simultáneas: continuidad, dos momentos horizontales, temperatura, humedad, energía cinética, longitud de mezclado y cuatro términos turbulentos; con el correspondiente número de incógnitas. Este sistema requiere para su solución, del establecimiento de la malla de cálculo y condiciones iniciales y de frontera, así como de la elección de la técnica numérica que deberá usarse para su discretización y final evaluación.

4.1.2 Malla de cálculo y condiciones de frontera

HOTMAC permite emplear mallas de cálculo anidadas (nested grid), de modo que pueden distinguirse diferentes niveles de resolución dentro de una misma área de estudio (para el caso de la Ciudad de México se han empleado dos mallas), las cuales permiten que las partes finas correspondan a las zonas donde se esperan mayores gradientes para las variables de interés, y la malla gruesa a donde se espera menor variación o bien donde, por no existir un interés particular en los resultados, es posible establecer una zona de amortiguamiento numérico.

Otra característica importante de la malla empleada en este modelo es el *desplazamiento* (staggered grid), el cual consiste en almacenar cantidades vectoriales y escalares en puntos diferentes de la malla, y obtener así mayor eficiencia computacional (ver Patankar, 1980).

Para considerar la forma de variación de la velocidad, humedad y temperatura (más rápida cerca de la superficie) se emplea una malla no uniforme en la vertical, con mayor número de celdas cerca de la superficie y menor al aumentar z ; Yamada (1978). Las capas inferiores (primeras cuatro) están uniformemente poco espaciadas y por encima de estas se emplea una distribución cuadrática.

Una vez establecida la malla de cálculo, debe delimitarse mediante las condiciones de frontera. Las condiciones de frontera que se establecen a continuación, corresponden solamente a la malla exterior (malla gruesa), ya que la malla o mallas interiores toman como condiciones propias de frontera los valores inmediatos correspondientes a la malla que las confina.

FRONTERA INFERIOR. Las condiciones de frontera a nivel del piso se determinan a partir de los perfiles de Dyer y Hicks (ver Yamada, 1978) para temperatura, humedad y viento; esto es:

$$\frac{V}{u_*} = \frac{1}{k} \left[\ln \left[(z + z_0)/z_0 \right] - \Psi_m(\zeta) \right] \quad (4.11)$$

$$\frac{\theta - \theta_g}{T_*} = \frac{Pr}{k} \left[\ln \left[(z + z_{0t})/z_{0t} \right] - \Psi_t(\zeta) \right] \quad (4.12)$$

$$\frac{h - h_g}{h_*} = \frac{Sc}{k} \left[\ln \left[(z + z_{0h})/z_{0h} \right] - \Psi_h(\zeta) \right] \quad (4.13)$$

en donde V representa la velocidad horizontal del aire, $(\bar{u}_1^2 + \bar{u}_2^2)^{1/2}$, y se emplea la definición tradicional de *efecto de pared* para considerar la rugosidad del terreno. Además se incluye un parámetro de corrección, Ψ , función de la altura, para introducir el efecto de la estabilidad atmosférica (ver Yamada, 1978).

Para establecer las condiciones de frontera de las variables de *cierre*, se sigue la formulación anterior, de la cual se desprende el empleo del

gradiente adimensional, Φ , llegando a:

$$q^2 = B_1^{2/3} u_*^2 (\Phi_* - \zeta)^{2/3} \quad (4.14)$$

$$q^2 l = k z q^2 \quad (4.15)$$

Debe hacerse notar que la temperatura en la frontera inferior es función del balance térmico entre el calor sensible y latente del aire (energía convectiva) y el calor retenido por el suelo (energía conductiva). De tal manera que para calcular θ_g es indispensable evaluar la temperatura de la capa superior del terreno, T_s , esta es:

$$T_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z_s} \left[K_s \frac{\partial T_s}{\partial z_s} \right] \quad (4.16)$$

en donde la coordenada z_s es, por convención, positiva hacia dentro del terreno, y K_s puede ser función de una o más características del suelo (humedad, composición, porosidad, etc). La solución de esta ecuación se fundamenta en el siguiente balance de energía:

$$R_s + R_{L\downarrow} - R_L^\uparrow = H_s + LE + G_s \quad (4.17)$$

que requiere para su evaluación de suposiciones adicionales y formulación extra, las cuales se detalladan en Yamada et al (1989).

FRONTERA SUPERIOR. Las condiciones límite para la frontera superior, teniendo en cuenta que al final de la capa de mezclado los efectos por rugosidad y temperatura del piso dejan de existir, se establecen como: las componentes horizontales de viento se igualan con los vientos geostrópicos; no existe turbulencia; y el gradiente de temperatura y el contenido de humedad son constantes e iguales a los valores promedio registrados por radiosondeo. Matemáticamente, lo anterior se expresa como:

$$u_1 = u_1^g, \quad \partial \bar{u}_1 / \partial z = 0 \quad (4.18)$$

$$q^2 = 0, \quad \partial(q^2 l) / \partial z = 0 \quad (4.19)$$

$$\partial \bar{\theta} / \partial z = \text{constante} \quad (4.20)$$

$$\partial \bar{h} / \partial z = 0 \quad (4.21)$$

FRONTERAS LATERALES. Las condiciones límite para las fronteras laterales son evaluadas a partir de las ecuaciones diferenciales correspondientes (ecuaciones 4.3, 4.5 a 4.8), las cuales se resuelven considerando que no existen variaciones horizontales.

Es importante mencionar aquí, que los valores obtenidos para cada variable durante el proceso de cálculo se suavizan mediante la siguiente expresión:

$$\phi_{i,j} = (1-\lambda)\phi_{i,j} + 0.25 \lambda (\phi_{i+1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j-1}) \quad (4.22)$$

donde ϕ en esta ecuación representa solamente u_1 , q^2 , y q^2_1 , y el parámetro de relajación λ deberá seleccionarse de acuerdo con el problema particular (0.5 si no se tiene mayor información). Y para el caso de las fronteras laterales se emplearan sólo los tres puntos vecinos.

CONDICIONES INICIALES. Para resolver numéricamente un sistema de ecuaciones se requieren, además de las condiciones de frontera (constantes en el tiempo de cálculo), las llamadas *condiciones iniciales* las cuales proporcionan valores supuestos a partir de los cuales se inicia el proceso numérico de evaluación. Los resultados del programa, no deben depender de los valores iniciales.

Para HOTMAC, se proporcionan las siguientes condiciones iniciales: el perfil vertical de vientos se supone logaritmico y uniforme en la horizontal. El perfil vertical de temperatura se estima en función de valores observados, suponiendo un gradiente vertical lineal y uniforme en la horizontal; mientras que, el contenido de vapor de agua se calcula empleando la ecuación de estado, a partir de la temperatura y presión en cada punto.

Los valores de energía cinética turbulenta y longitud de mezclado se evaluan de acuerdo con las ecuaciones derivadas del modelo de segundo orden descrito anteriormente.

4.1.3 Algoritmo de cálculo

Las ecuaciones 4.3 y 4.5 a 4.8 son resueltas mediante el método de solución numérica ADI (Alternating Direction Implicit method), el cual es numéricamente estable y se basa en la integración en una sola dirección a la vez. Los intervalos de tiempo empleados en cada interacción se establecen de acuerdo al criterio de Courant-Friedrichs-Lewy (Yamada et al, 1989).

Todas las ecuaciones a resolver pueden ser escritas en la forma siguiente:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = A_{11} \phi - B \phi + C \quad (4.23)$$

donde:

$$A_{11} \phi = -\frac{\partial}{\partial x_1} \left[K_1 \frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right] - \bar{u}_1 \frac{\partial \phi}{\partial x_1} \quad (4.24)$$

donde ϕ representa las variables de cálculo ($\bar{u}_1, \bar{\theta}, \bar{h}, q_1^2, q_1^2 l$), y las K_1 , coeficientes de viscosidad turbulenta, varían de acuerdo a la variable correspondiente. Las ecuaciones (4.23) se discretizan por el método de diferencias finitas, y para aumentar la exactitud y suprimir *inestabilidades* computacionales se utiliza una malla desplazada en la cual se ubican entre *nodos*, las velocidades medias y variables turbulentas; ver figura 4.1.

La discretización de ecuaciones y mecanismo de solución empleados en ADI se presentan mediante un ejemplo en el apéndice 2. Una vez resuelto el sistema de ecuaciones arriba mencionado, se calcula \bar{u}_3^* , a partir de la ecuación (4.2), asegurando así que se satisfice continuidad (Yamada, 1981).

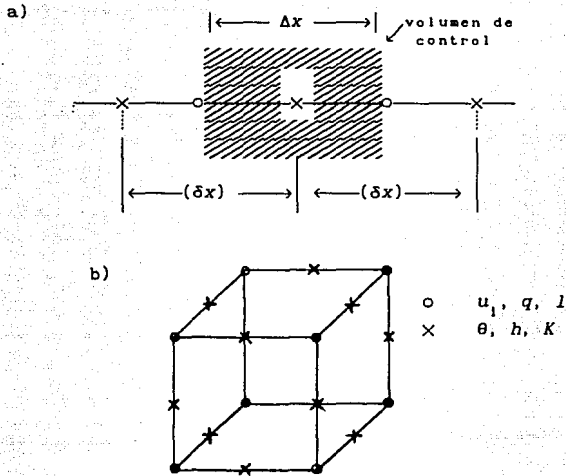


Fig 4.1 Malla desplazada: a) una dimensión; b) tres dimensiones.

4.2 RAPTAD

RAPTAD es un modelo estocástico de transporte y difusión de partículas, y ha sido empleado en combinación con HOTMAC para predecir la dispersión de gases contaminantes en la atmósfera. Esta basado en la teoría Monte Carlo para la generación de valores aleatorios y en el método Monte Carlo *kernel* (de núcleos) para la definición de *pseudopartículas*, dentro de las cuales se supone una distribución de concentración.

El método Monte Carlo ha sido empleado para estimar la distribución final de partículas emitidas a partir de una fuente y dependiendo del número de partículas, se obtienen diferentes distribuciones; entre mayor sea este número, *mejor* será la distribución final.

Una forma de reducir el número de partículas empleadas (tiempo de cálculo), sin perder precisión, es el empleo del método Monte Carlo kernel. Las llamadas pseudopartículas empleadas por este método, son núcleos (*puffs*) de contaminantes con una distribución de concentraciones preestablecida, cuyo centro representa a las partículas usadas en el método original Monte Carlo. En RAPTAD se asume una distribución gaussiana dentro de cada pseudopartícula.

4.2.1 Ecuaciones fundamentales

Este modelo emplea el campo de vientos generado por HOTMAC, para establecer la trayectoria de las partículas (gases) que se descargan dentro del área de estudio. La velocidad de transporte se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$u_{pi} = \bar{u}_i + u'_i \quad (4.25)$$

La velocidad media es proporcionada por HOTMAC, mientras que la velocidad turbulenta (fluctuaciones) es calculada a partir de términos estocásticos, como se observa en la siguiente expresión:

$$u'_i(t+\Delta t) = au'_i(t) + b\sigma_{ui}\xi + \delta_{i3}(1-a)t_{Lx1}\frac{\partial}{\partial x1}(\sigma_{ui}^2) \quad (4.26)$$

$$a = \exp\left[-\frac{\Delta t}{t_{Lx1}}\right] \quad (4.27)$$

$$b = (1 - a^2)^{1/2} \quad (4.28)$$

donde el parámetro ξ se estima aleatoriamente a partir de una distribución de media cero y variancia unitaria, y t_{Lx1} y σ_{ui} son la escala de tiempo y variancia relacionadas con las fluctuaciones de velocidad. La ecuación (4.26) incluye un término de corrección (último término) tendiente a disminuir el efecto de *acumulación* de partículas en áreas de baja energía (Legg y Raupach, 1982).

Para determinar la ubicación del centro de cada pseudopartícula, en el tiempo $(t+\Delta t)$, se utiliza la siguiente expresión:

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + u_{pi}\Delta t \quad (4.29)$$

La concentración en la posición (x, y, z) , se estima sumando la contribución por difusión de cada *puff* mediante la ecuación (escrita en coordenadas cartesianas):

$$\begin{aligned}
 C(x, y, z; t) = & \sum_{k=1}^N \frac{Q \Delta t}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sigma_{xk} \sigma_{yk} \sigma_{zk}} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(x_k - x)^2}{\sigma_{xk}^2}\right] \\
 & \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(y_k - y)^2}{\sigma_{yk}^2}\right] \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(z_k - z)^2}{\sigma_{zk}^2}\right] \right. \\
 & \left. + \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(z_k + z - 2z_g)^2}{\sigma_{zk}^2}\right] \right\} \quad (4.30)
 \end{aligned}$$

donde las desviaciones estandar para cada dirección y partícula se evalúan mediante la teoría de difusión homogénea de Taylor (ver Yamada et al, 1989).

Como se mencionó al iniciar el presente capítulo, este modelo ha sido empleado en varias ocasiones (Yamada y Bunker, 1987; Williams y Porch, 1991), pudiendo comprobar que para obtener una dispersión *satisfactoria*, el número de pseudopartículas necesarias, y por tanto el tiempo de cálculo empleado, es menor comparado con otros códigos similares (Yamada et al, 1989).

5 EJEMPLO DE APLICACION

El objetivo de este capítulo es presentar un ejemplo de aplicación de los modelos estudiados en los capítulos anteriores, con la finalidad de mostrar su potencialidad en el estudio de alternativas para controlar la contaminación atmosférica y analizar cualitativamente las características de flujo en la Cuenca de México.

Teniendo en cuenta que la topografía es una de las variables relevantes en el problema ambiental de la Ciudad de México, y siendo relativamente fácil modificarla dentro de los programas de cálculo, se decidió alterarla arbitrariamente para demostrar la manera de emplear estos modelos para la evaluación de alternativas.

Entre las muy diversas propuestas de dominio público planteadas a las autoridades del Distrito Federal, tendientes a mejorar la calidad del aire en la zona, se mencionó el modificar los patrones de flujo mediante *la eliminación de la Sierra del Ajusco*, lo que se consideró un ejercicio por demás atractivo para los fines de este trabajo.

Para realizar este experimento no se consideró necesario incluir el uso del programa RAPTAD, ya que las modificaciones topográficas tendrán repercusión directa sobre el patrón de vientos y comprendiendo este, es

posible inferir cualitativamente las modificaciones que sufrirán los patrones de dispersión y concentración de contaminantes.

5.1 Planteamiento

El modelo HOTMAC requiere como datos de entrada: la ubicación de la malla de cálculo, velocidad y dirección del viento en un punto, perfil de temperatura, presión atmosférica, día, hora y humedad relativa del suelo y del aire. También requiere información sobre características del terreno, como: coeficiente de fricción, altura promedio de los árboles (altura de copa y tronco), fracción arbolada de terreno, albedo y relación de bowen (calor sensible entre calor latente) para zonas urbanas y áreas verdes, coeficiente de difusión turbulenta, temperatura potencial media a nivel del mar, temperatura de los cuerpos de agua y densidad del suelo rural y urbano.

Además de los datos globales anteriores, es necesario identificar las áreas ocupadas por cuerpos de agua, áreas verdes y urbanas. La topografía se alimenta como dato de entrada, debiéndose proporcionar valores para los vértices y puntos medios de cada celda.

El ejemplo de aplicación consiste en efectuar dos *corridos* del modelo; la primera se realiza conservando los datos topográficos que describen el estado actual de la Cuenca de México (figura 5.1), mientras que para la segunda se altera la topografía recortando la parte más elevada de la cordillera del Ajusco, formándose un canal de 2682 msnm, ver figura 5.2. Esta modificación se realizó entre las coordenadas 466 y 478 utmx, y 2104 y 2146 utmy para todas las celdas de mayor altura; el número de celdas modificadas fue de 13, en la malla gruesa y 51 en la fina (ver figura 5.3).

Los datos de entrada de ambas corridas, excepto topografía, corresponden al experimento realizado en el Laboratorio Nacional de los Alamos (Williams y Porch, 1991) para predecir el campo de vientos de la ZMCM el 4 de febrero de 1988. Estos datos se presentan en el apéndice 3, donde se proporciona el nombre usado por los programas computacionales para estas variables y su significado físico.

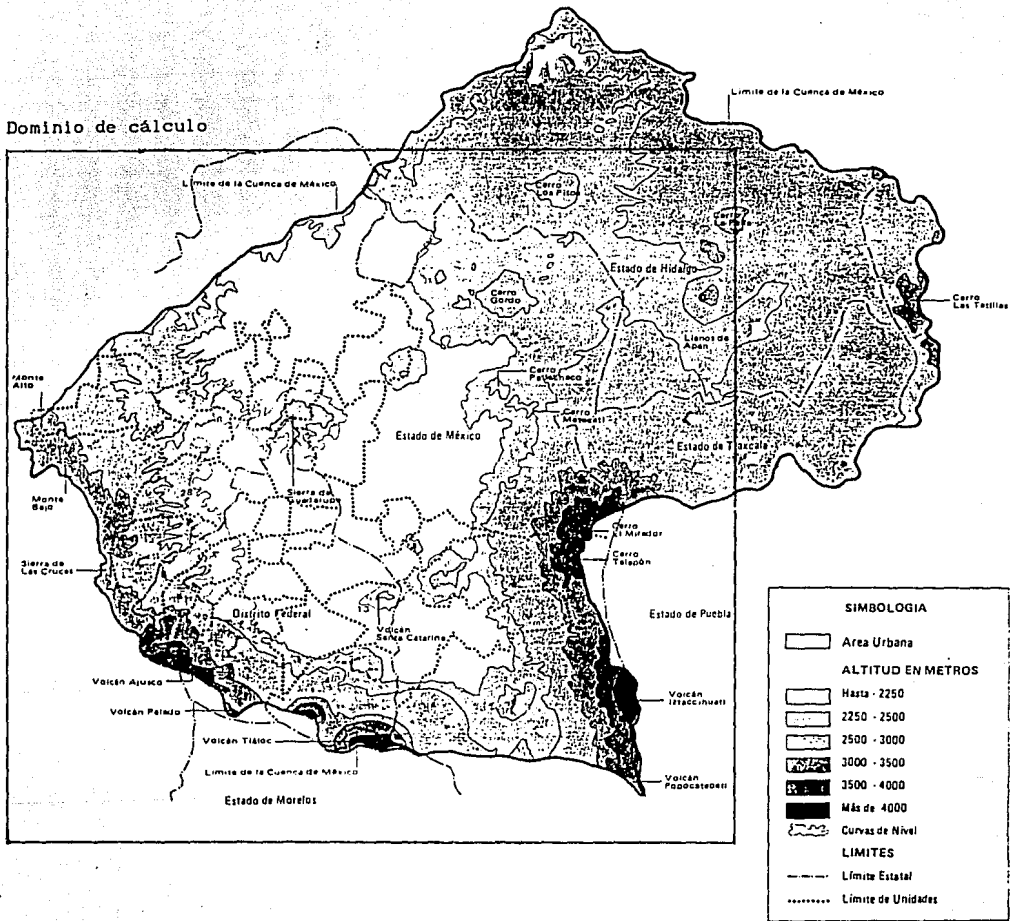


Fig 5.1 Cuenca de México.

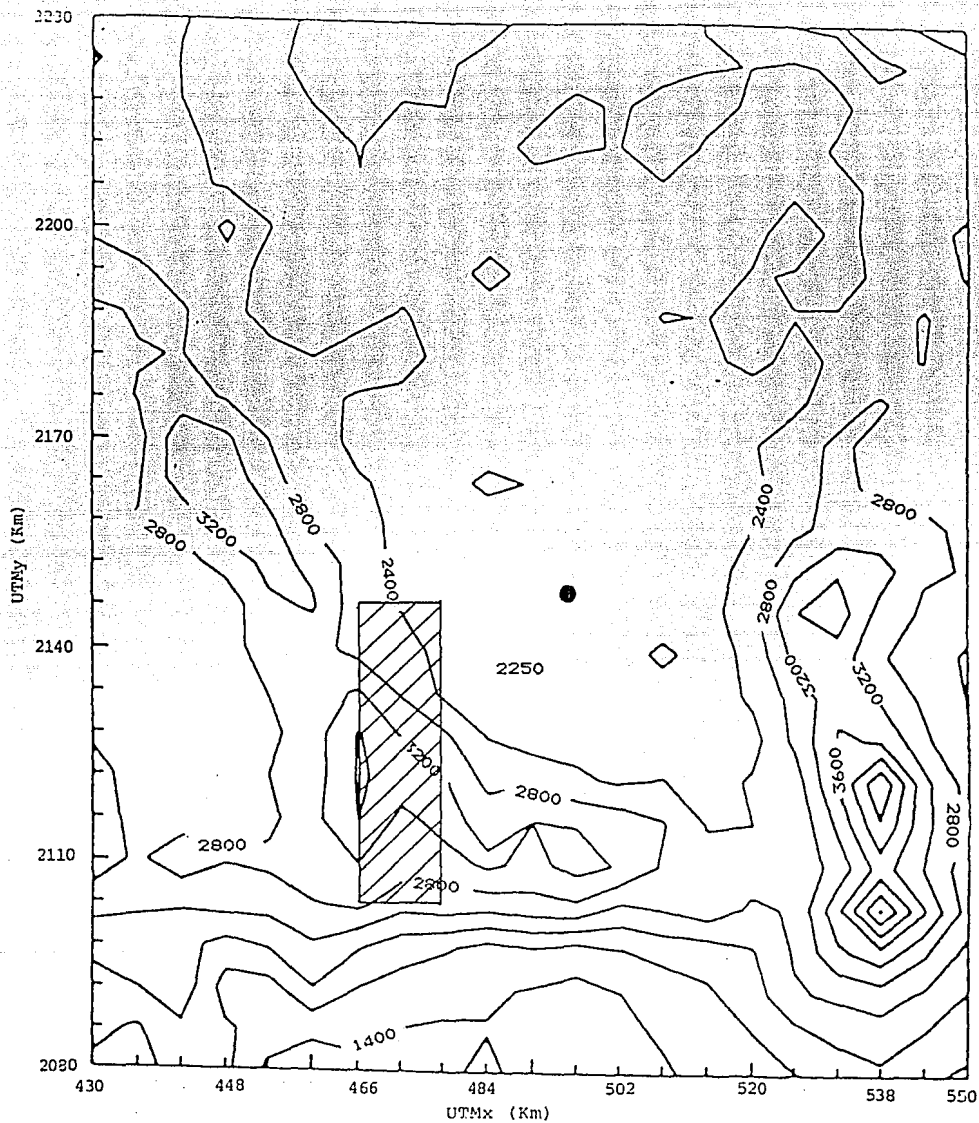


Fig 5.2 Topografía del dominio de cálculo

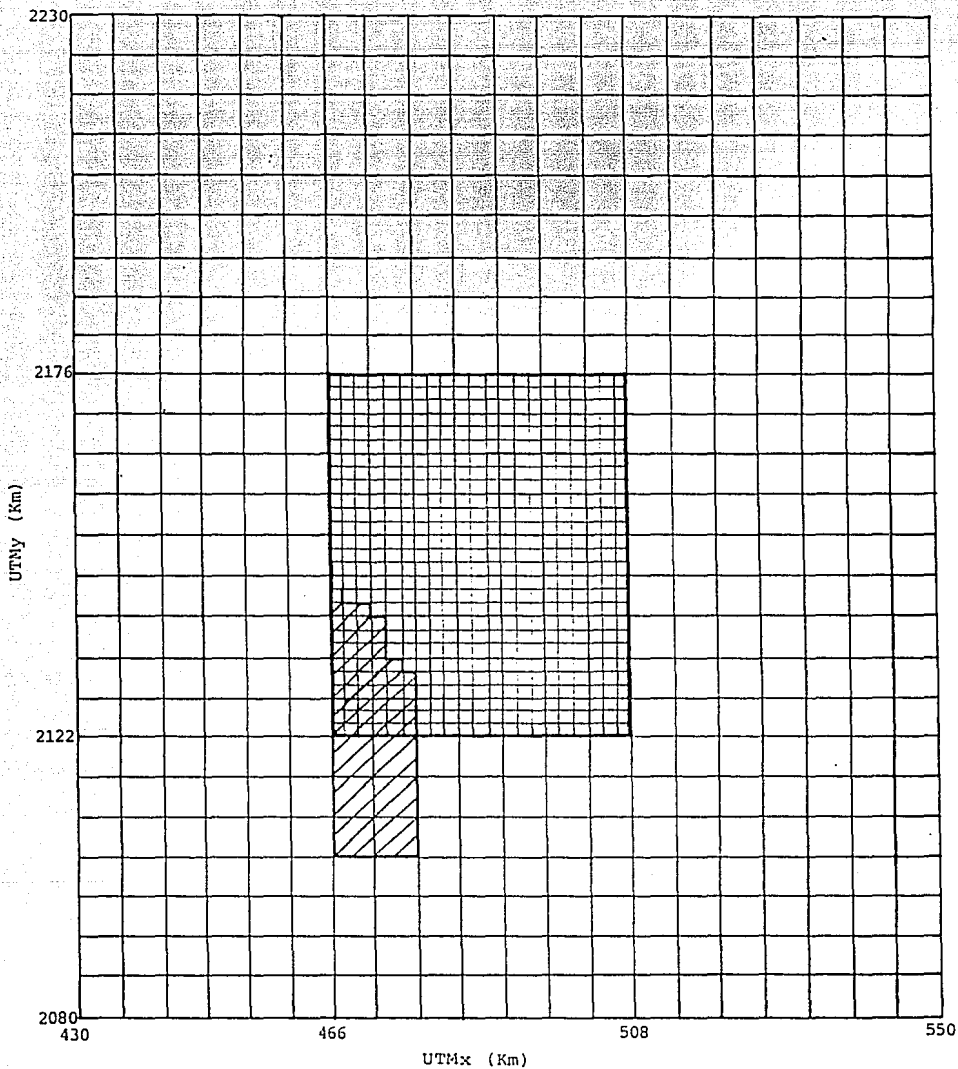



Fig 5.3 Mallas de cálculo.  Celdas modificadas.

En los datos de entrada, a la variable day0, correspondiente al día de cálculo, se asigna el número 34 (3 de febrero), ya que el programa arranca a las 18 hrs de ese día, para proporcionar los datos correspondientes a las 2:27 horas del 4 de febrero; 8:27 hrs después del arranque, una vez que el proceso ha sido estabilizado.

El campo de viento a 10 m de altura, correspondiente al día 4 de febrero, para las condiciones topográficas reales, se presenta en las figuras 5.4 y 5.5, en las cuales es fácil observar el efecto montaña-valle (ver inciso 3.2) de las cordilleras que rodean la Cuenca de México. En la figura 5.4 (malla gruesa) se distinguen las corrientes que descienden de la cordillera volcánica situada al este de la cuenca, de la sierra del Ajusco (al suroeste) y la cadena montañosa al oeste (sierra de las Cruces, Monte Bajo y Monte Alto). Estas cadenas montañosas generan corrientes hacia el centro de la cuenca, de hasta 10 m/s cuando descienden de la cordillera volcánica y de aproximadamente 5 m/s las provenientes del oeste.

Es importante mencionar en este punto la diferencia de escala que existe entre las velocidades dentro y fuera de la cuenca. En la parte interior se presentan velocidades menores de 1 m/s, mientras que la velocidad de descenso del viento hacia el valle de Cuernavaca registra valores de hasta 13 m/s. Lo cual viene a reafirmar la importancia de la topografía (efecto montaña-valle) dentro de esta zona y además permite establecer una relación entre la altura relativa y la velocidad de descenso (entre mayor es el valor de la relación de alturas, montaña/valle, mayor la velocidad).

La figura 5.5 detalla el campo de vientos obtenido para ese mismo día (malla fina), y en ella es posible observar claramente el efecto de la cordillera del Ajusco, que produce corrientes descendentes, hacia la cuenca de México, de 5m/s en las laderas de las montañas. También es posible observar el efecto montaña-valle en las laderas de la Sierra de Guadalupe que produce velocidades de hasta 1.5 m/s hacia el norte, y el flujo convergente hacia el centro de la planicie, en donde se observan velocidades muy bajas que provienen de las montañas que rodean a la cuenca.

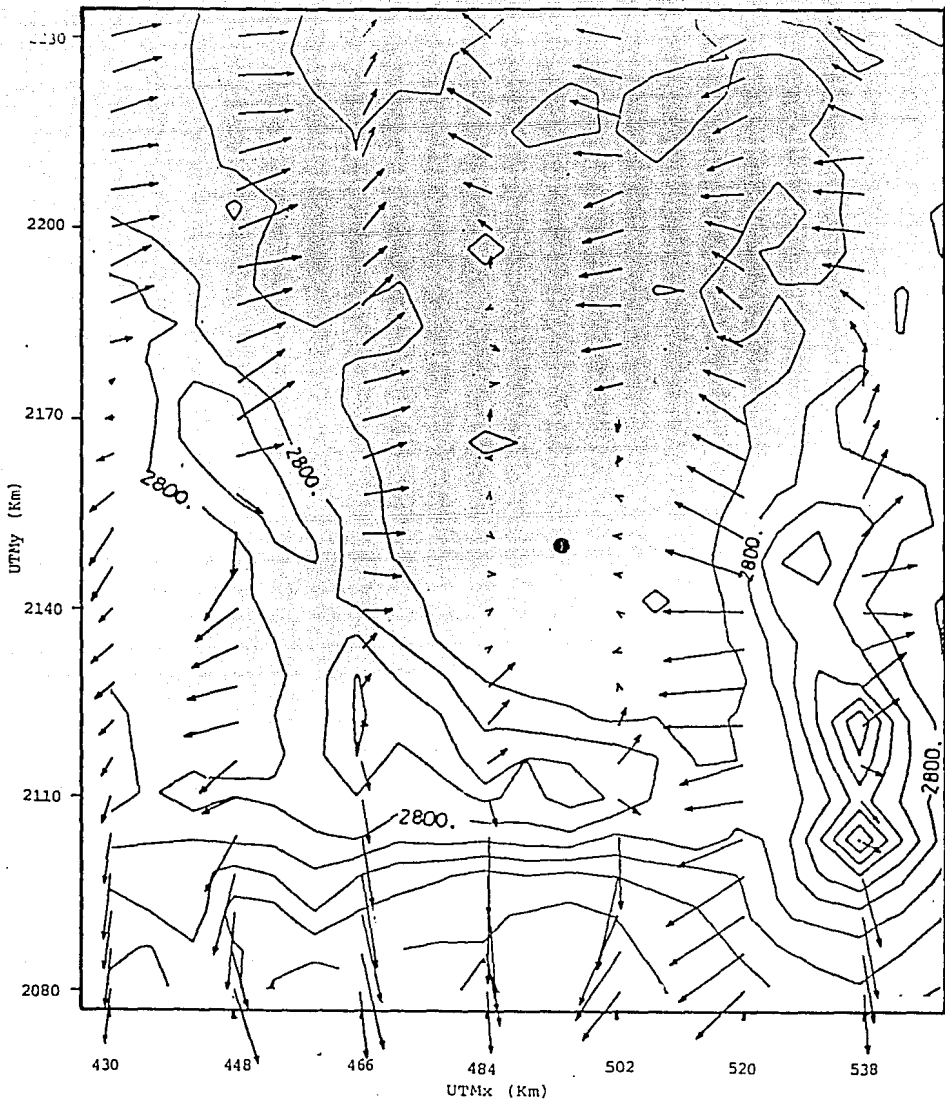


Fig 5.4 Topografía y campo de vientos. Malla gruesa, 4 de febrero de 1988, 2:27 hrs.

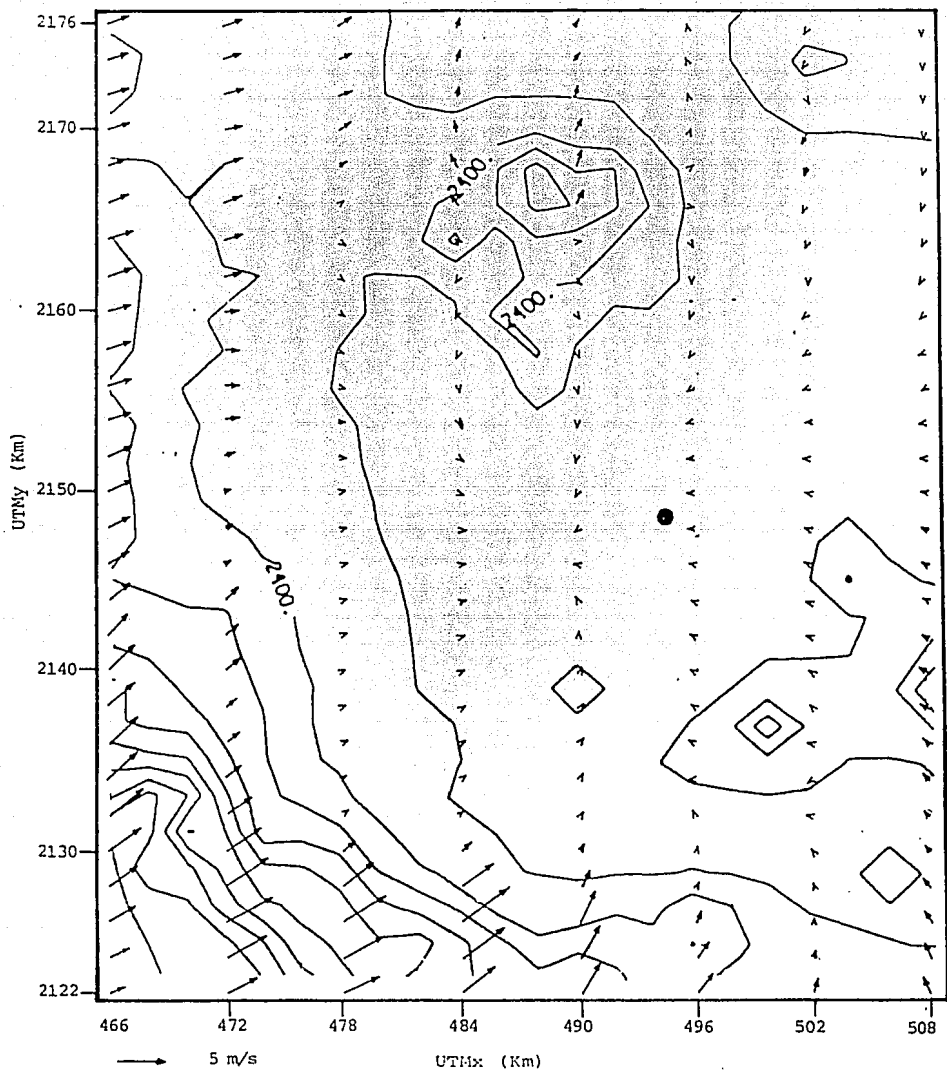


Fig 5.5 Topografía y campo de vientos. Malla fina, 4 de febrero de 1988, 2:27 hrs.

5.2 Resultados

El programa proporciona datos de las componentes de viento (u , v y w), temperatura potencial y humedad relativa, así como energía cinética y longitud de mezclado turbulento para 8736 nodos de la malla gruesa y 9856 de la malla fina.

Considerando que, para el ejemplo seleccionado, la alternativa en estudio (modificación de topografía) deberá modificar principalmente los campos de viento en la ZMCM, sólo se analizarán aquí la distribución horizontal, perfiles verticales de velocidad y dirección del viento, de los cuales dependerá directamente la dispersión de los contaminantes emitidos en esta zona. Otros datos obtenidos del experimento del 4 de febrero son presentados por Williams y Porch (1991) quienes incluyen datos de concentración de monóxido de carbono y dióxido de azufre, obtenidos con RAPTAD empleando como datos de emisión un inventario actualizado a partir del realizado por JICA (1990) para la SEDUE.

La figura 5.6 representa el campo de viento a 10 m sobre el nivel del piso para la malla gruesa, antes y después de *remover* el Ajusto. La figura 5.6a es el campo de vientos correspondiente a la topografía original (igual a la figura 5.4), mientras que la figura 5.6b es después del experimento. Como era de esperarse el patrón global de flujo (vientos) no se altero, observándose los principales cambios sólo en las celdas modificadas y en la próximas inmediatas.

El campo de viento para la malla fina, también a 10 m de altura, se presenta en la figura 5.7, observándose en la segunda *corrida* (figura 5.7b) que para la zona modificada desaparece el efecto montaña-valle, las velocidades se ven notoriamente reducidas y en la esquina inferior izquierda se forma una corriente hacia el sur (180°).

El canal formado al modificar la topografía es de 12 km de ancho por 21 km de largo y la altura de las paredes que lo confinan varía de 300 a 600 m, lo que permite suponer que la variación observada de velocidades se debe al llamado efecto de cañon. Además de la reducción de la

intensidad del viento en la zona modificada, y celdas aledañas, es interesante hacer notar que el punto de convergencia de los vientos se ve desplazado 6 km hacia el sur de su localización anterior (aproximadamente, del Zócalo a la colonia Villa de Cortés).

Además de los cambios mencionados anteriormente, se observó, al analizar los valores de la velocidad a 10 m de altura, que esta aumenta o disminuye de acuerdo con su posición respecto al canal. Los vectores dirigidos originalmente hacia la zona modificada aumentan en magnitud, mientras que los demás disminuyen.

Con el fin de analizar las modificaciones que tridimensionalmente sufre el campo de vientos, cuando se modifica la topografía, se construyeron los perfiles verticales de velocidad en tres puntos del área de estudio. Las figuras 5.8 y 5.9 corresponden a un punto sobre el Ajusco, mientras que las figuras 5.10-5.11 y 5.12-5.13 corresponden a un punto sobre el centro de la ciudad (Zócalo) y al extremo superior derecho del área de cálculo (Xochihuacan) respectivamente.

En el punto de estudio situado sobre el Ajusco (466 utmx, 2122 utmy), se observa que el perfil de velocidades (figura 5.8), se modifica principalmente en las capas bajas. Entre 0 y 100 m, la velocidad es menor para el caso de topografía modificada, pero por encima de los 200 m la velocidad es prácticamente constante e igual para ambas corridas.

En los perfiles de dirección, figura 5.9, el efecto de la modificación topográfica es mucho más obvio; a nivel del piso, la dirección de flujo con la topografía original, es hacia la Cuenca de México (67° , este-noreste), y para el caso experimental es hacia el Valle de Cuernavaca (190° , sur-suroeste). Por encima de los 200 m de altura la dirección del viento es igual en ambas corridas (210° , suroeste).

Considerando simultáneamente las variaciones de velocidad y dirección, es posible establecer claramente en este punto geográfico, la sustitución del efecto montaña-valle (presente en la primera corrida), por el efecto cañón originado al modificar la topografía para la segunda corrida.

intensidad del viento en la zona modificada, y celdas aledañas, es interesante hacer notar que el punto de convergencia de los vientos se ve desplazado 6 km hacia el sur de su localización anterior (aproximadamente, del Zócalo a la colonia Villa de Cortés).

Además de los cambios mencionados anteriormente, se observó, al analizar los valores de la velocidad a 10 m de altura, que esta aumenta o disminuye de acuerdo con su posición respecto al canal. Los vectores dirigidos originalmente hacia la zona modificada aumentan en magnitud, mientras que los demás disminuyen.

Con el fin de analizar las modificaciones que tridimensionalmente sufre el campo de vientos, cuando se modifica la topografía, se construyeron los perfiles verticales de velocidad en tres puntos del área de estudio. Las figuras 5.8 y 5.9 corresponden a un punto sobre el Ajusco, mientras que las figuras 5.10-5.11 y 5.12-5.13 corresponden a un punto sobre el centro de la ciudad (Zócalo) y al extremo superior derecho del área de cálculo (Xochihuacan) respectivamente.

En el punto de estudio situado sobre el Ajusco (466 utmx, 2122 utmy), se observa que el perfil de velocidades (figura 5.8), se modifica principalmente en las capas bajas. Entre 0 y 100 m, la velocidad es menor para el caso de topografía modificada, pero por encima de los 200 m la velocidad es prácticamente constante e igual para ambas corridas.

En los perfiles de dirección, figura 5.9, el efecto de la modificación topográfica es mucho más obvio; a nivel del piso, la dirección de flujo con la topografía original, es hacia la Cuenca de México (67°, este-noreste), y para el caso experimental es hacia el Valle de Cuernavaca (190°, sur-suroeste). Por encima de los 200 m de altura la dirección del viento es igual en ambas corridas (210°, suroeste).

Considerando simultáneamente las variaciones de velocidad y dirección, es posible establecer claramente en este punto geográfico, la sustitución del efecto montaña-valle (presente en la primera corrida), por el efecto cañón originado al modificar la topografía para la segunda corrida.

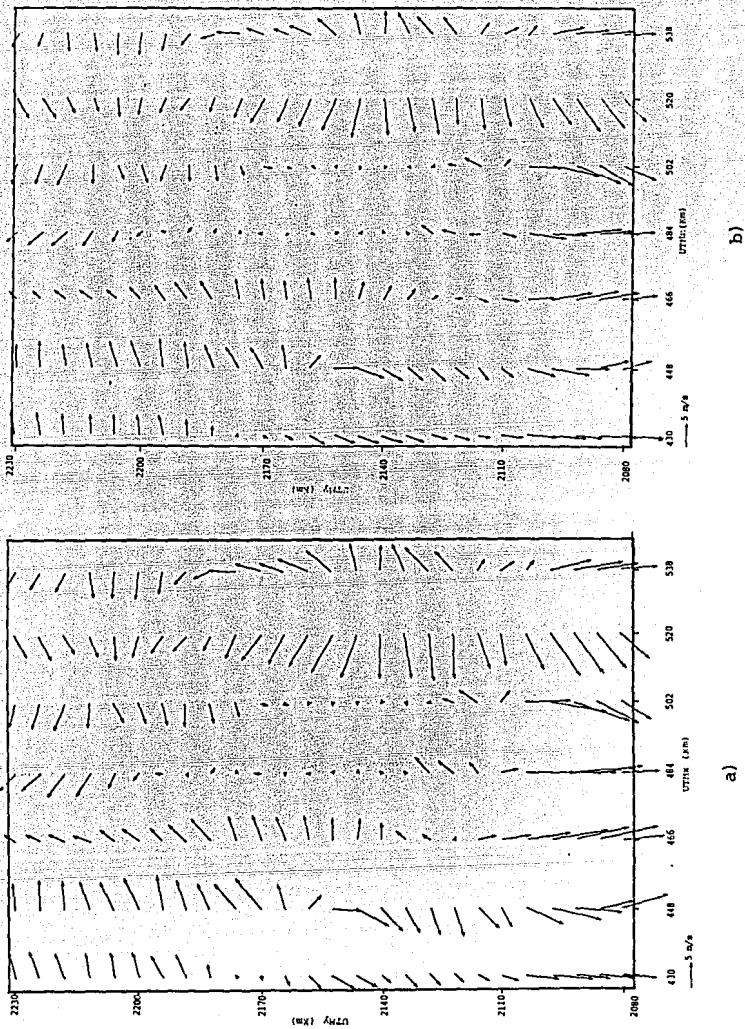
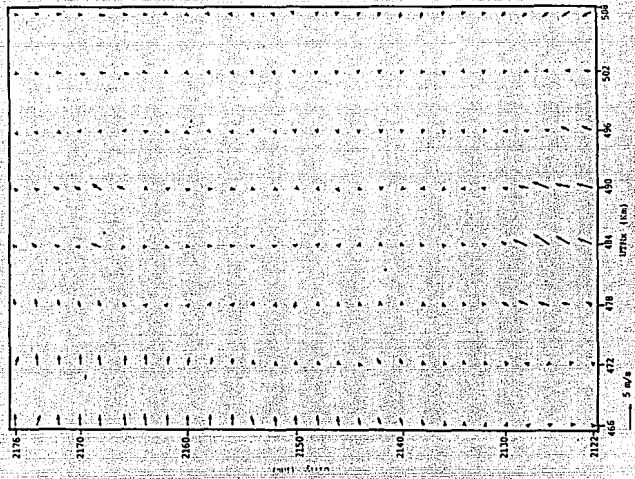
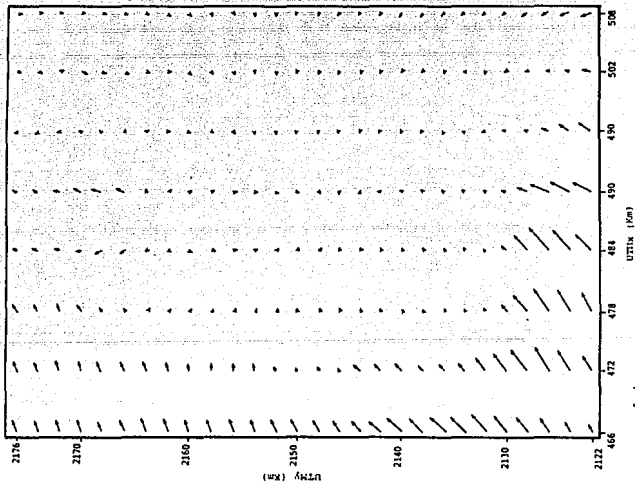


Fig 5.6 Campos de viento. Malla gruesa, 4 de febrero de 1988, 2:27 hrs.
 a) topografía real, b) topografía modificada.



a)



b)

Fig 5.7 Campos de viento. Malla fina, 4 de febrero de 1988, 2:27 hrs.
 a) topografía real, b) topografía modificada.

Alejándonos del Ajusco, hacia el centro de la ciudad, Zócalo (484 utmx, 2148 utmy), el efecto de la variación topográfica es aún claro. Con la topografía original, existe una corriente superficial, velocidad 2m/s y dirección este-sureste, cuya velocidad disminuye con la altura, para recuperarse y cambiar de dirección por encima de los 200 m (ver figuras 5.10a y 5.11a). Mientras que para el caso donde se simula que el Ajusco ha sido removido, no es posible observar esta corriente superficial, y por encima de los 100m el viento ya tiene una dirección y velocidad uniformes con la altura.

Los campos de viento para el punto denominado Xochihuacan (538 utmx, 2230 utmy), se gráficán en las figuras 5.12 y 5.13. En la primera de estas figuras es posible observar una pequeña diferencia en la magnitud del viento superficial, la cual no es posible interpretar como resultado directo del efecto montaña-valle, ya que este punto esta a más de 120 km del área de cambios topográficos; siendo conveniente suponer que el desplazamiento del punto de convergencia de las corrientes dentro de la cuenca, modifica en este punto la velocidad del viento, aunque no así su dirección (ver figura 5.13).

5.3 Conclusiones

En el análisis de resultados, realizado en la sección anterior, se pudo observar el efecto montaña-valle y el estancamiento en el centro de la cuenca provocado por los vientos convergentes. Al modificar la topografía, se observaron cambios en este patrón de vientos: reducción del efecto montaña-valle y desplazamiento del punto de convergencia, además de la formación del llamado efecto de cañon.

De la variación del campo de vientos para las dos *corridas* realizadas en este ejemplo, es posible concluir que la topografía es un parámetro determinante dentro de la ZMCM, y que cualquier alternativa al problema de la contaminación que este ligada con ésta, deberá comprender un estudio detallado de dichas variaciones. Debe mencionarse que, para realizar el estudio sobre el efecto que la remoción del Ajusco tendría sobre la contaminación en la Cuenca de México, se requiere de una serie de *corridas* (diferentes horas del día y épocas del año) que permitan definir completamente los patrones de variación del viento, así como de

un estudio de evaluación del impacto ambiental sobre las zonas aledañas.

El tiempo de máquina empleado para cada una de las corridas de este ejemplo (8:27 horas de simulación) fue de 58.57 segundos, y se realizaron en la computadora TITAN P3000 del Instituto Mexicano del Petróleo.

Ante la imposibilidad de comparar los resultados obtenidos contra mediciones en el área de estudio, teniendo en cuenta que este modelo ya ha sido aplicado antes satisfactoriamente (ver entre otros: Yamada, 1981; Yamada y Bunker, 1987; Williams y Streit, 1990), y analizando el comportamiento cualitativo de los resultados obtenidos, se considera que las predicciones son adecuadas, por lo que resulta altamente recomendable emplear los modelos analizados en este trabajo para realizar el estudio de alternativas.

En este ejemplo sólo se pretendió demostrar que el modelo funciona y que es aplicable a la complicada topografía que conforma a la ciudad de México; y ya competará a posteriores trabajos hacer estudios para evaluar alternativas para controlar la contaminación del aire empleando estos modelos.

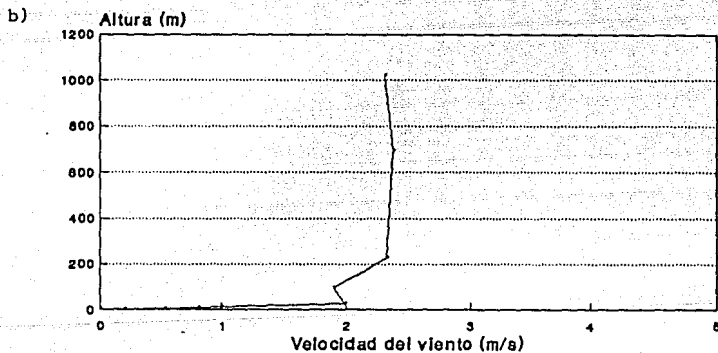
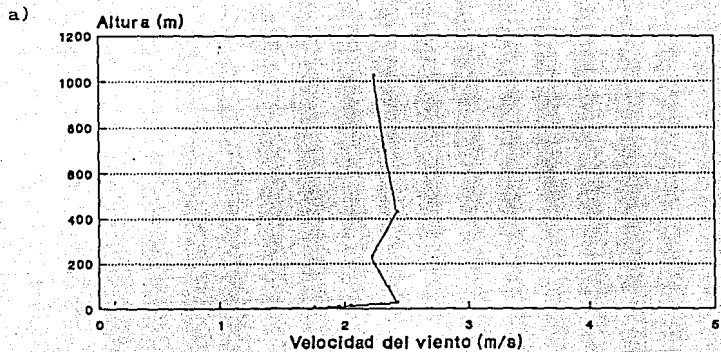


Fig 5.8 Perfil vertical de velocidad de viento. Ajusco:
 a) topografía real
 b) topografía modificada

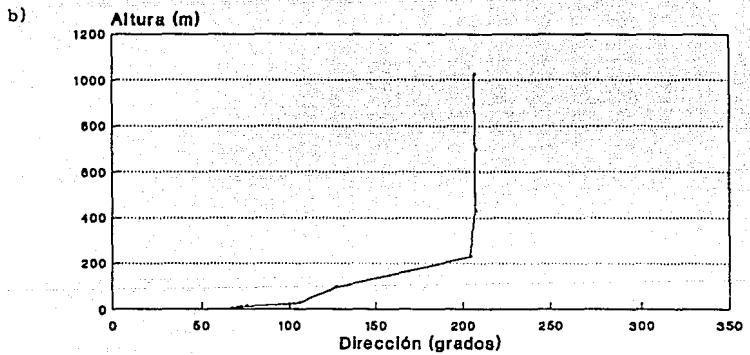
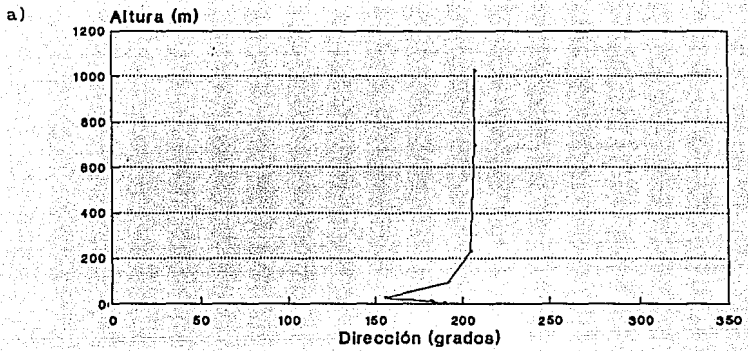


Fig 5.9 Perfil vertical de dirección de viento. Ajusco:
 a) topografía real
 b) topografía modificada

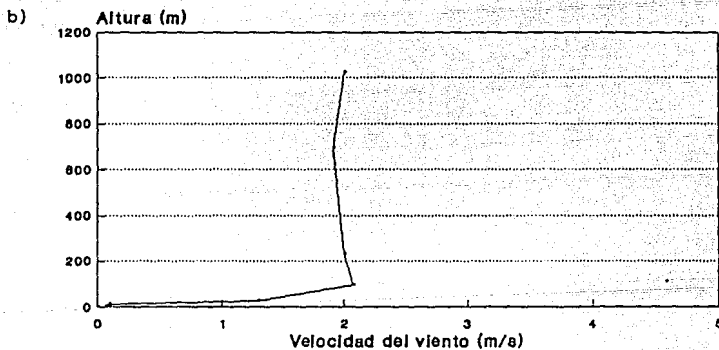
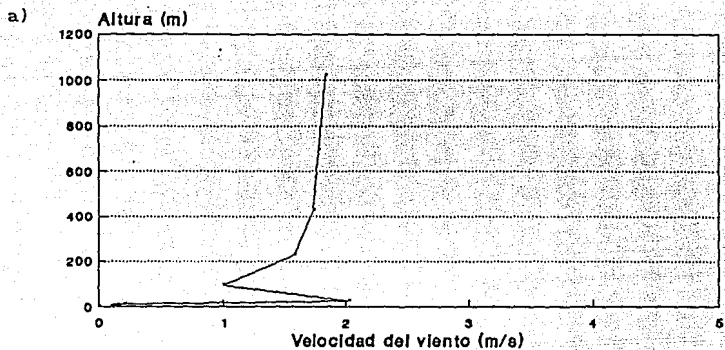


Fig 5.10 Perfil vertical de velocidad de viento. Zócalo:
 a) topografía real
 b) topografía modificada

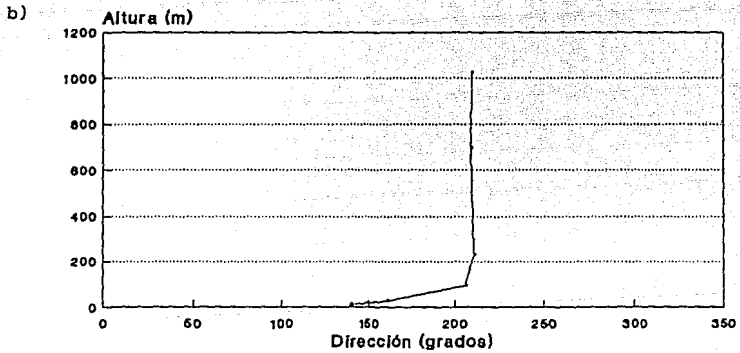
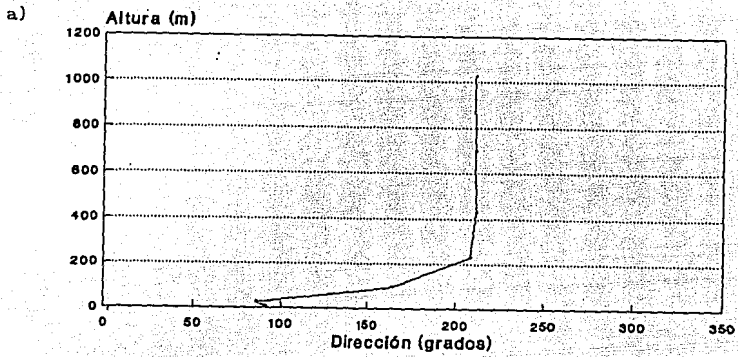


Fig 5.11 Perfil vertical de dirección de viento. Zócalo:
 a) topografía real
 b) topografía modificada

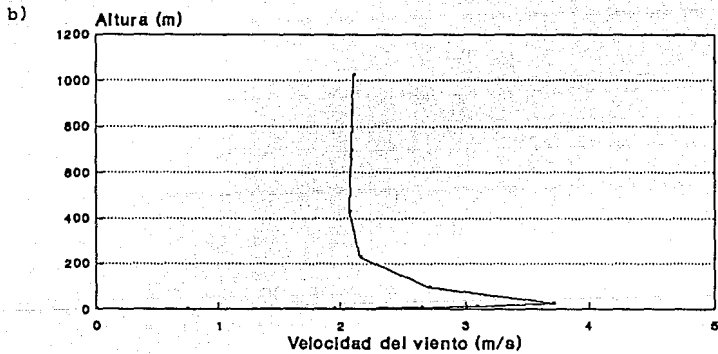
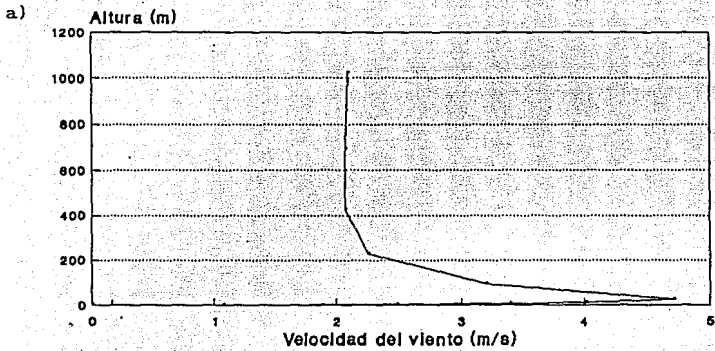


Fig 5.12 Perfil vertical de velocidad de viento. Xochihuacan:
 a) topografía real
 b) topografía modificada

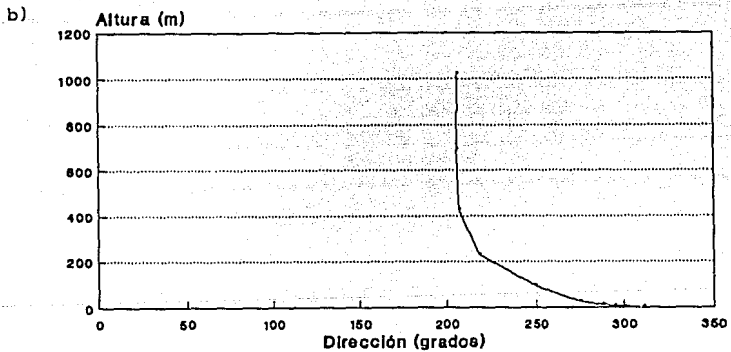
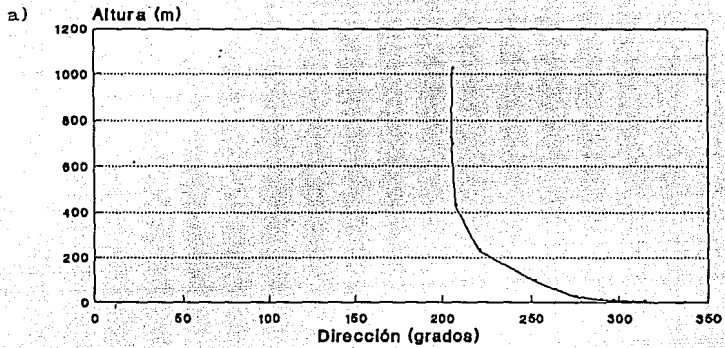


Fig 5.13 Perfil vertical de dirección de viento. Xochihuacan:
 a) topografía real
 b) topografía modificada

6 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Al cumplir con el objetivo principal de esta tesis: análisis de la estructura matemática de los modelos que serán aplicados dentro del Estudio Global de la Calidad del Aire en la Ciudad de México, para la evaluación de alternativas de control de la contaminación atmosférica; se puede concluir lo siguiente:

Como se mencionó en los primeros capítulos de este trabajo, y pudo comprobarse en el ejemplo de aplicación, la topografía es un factor relevante para el grado de dispersión de los contaminantes atmosféricos; y dado que, la cuenca de México presenta una topografía muy compleja, resulta muy recomendable el empleo del modelo HOTMAC que maneja este factor físico en forma detallada, al introducir como variable de cálculo la altura corregida z^* .

Considerando además, la poca información meteorológica de la que actualmente se dispone para nuestra ciudad, es por demás conveniente que este modelo matemático solo requiera, como datos de entrada, la información correspondiente a una estación meteorológica (velocidad y dirección del viento, posición geográfica, hora y fecha). Además de esta información es posible representar, con *precisión suficiente*, otras características del área de estudio, como: temperatura, humedad, usos del suelo, radiación solar, etc.

Al introducir, en el capítulo tres, las bases matemáticas necesarias para la formulación de un modelo matemático de dispersión atmosférica, se estableció la importancia de considerar la estructura turbulenta de la atmósfera, y en el capítulo cuatro se presentó la manera en que HOTMAC la considera al emplear un modelo de *cerradura* de segundo orden. Y en ese mismo capítulo se mencionó que los parámetros de turbulencia empleados fueron, en su mayoría, obtenidos en el laboratorio bajo condiciones controladas, por lo que aquí se recomienda revisar el valor de estos parámetros, midiéndolos para flujos atmosféricos.

Entre otras conclusiones importantes sobre la estructura del modelo HOTMAC, es importante señalar que el programa computacional que lo resuelve posee características de cálculo muy versátiles como son: sistema de mallas anidadas, mallas desplazadas, método numérico de solución ADI y uso de un parámetro de relajación.

Al poseer HOTMAC las características anteriores, y teniendo en cuenta los resultados obtenidos en el ejemplo de aplicación, los cuales se consideran predicciones cualitativamente correctas, se puede concluir que este modelo es adecuado para ser utilizado en la ZMCM.

A pesar de no haber empleado el modelo RAPTAD, dentro del ejemplo de aplicación presentado en el capítulo anterior, otros estudios realizados empleando HOTMAC y RAPTAD en forma conjunta, permiten recomendar el uso de ambos para el caso que nos ocupa. Sin embargo, considerando la estructura matemática de HOTMAC, resulta muy recomendable estudiar la posibilidad de introducir las ecuaciones diferenciales de transporte correspondientes a la dispersión dentro de este modelo y eliminar el uso de RAPTAD. Al hacer esta recomendación debe señalarse que, si bien es recomendable el empleo de ecuaciones diferenciales, más exactas, para predecir el transporte de especies contaminantes, esto aumentará considerablemente los requerimientos computacionales hasta ahora manejados.

Finalmente, es importante mencionar que a pesar de las *buenas predicciones* obtenidas con estos modelos, es necesario validarlos formalmente, lo cual no ha sido posible realizar por la carencia de suficiente información meteorológica, de emisión de contaminantes y de concentración de los mismos en la atmósfera de la ZMCM.

De lo anterior, se deriva la importancia de generar información sobre el estado real de la contaminación en la cuenca de México; y que tanto autoridades como industriales proporcionen todos los datos y colaboración requerida para conocer cuanto, como y qué está contaminando la ZMCM. Sólo entonces, y a partir de esa información podrá procederse a establecer medidas de control y mitigación adecuadas.

Además, dado que uno de los principales problemas en la ZMCM es la contaminación debida al smog fotoquímico (ozono), es importante mencionar que los dos modelos descritos en este trabajo forman parte de un paquete en el cual se incluye un modelo de reacción química (actualmente en desarrollo), el cual deberá asociar el campo de vientos y dispersión de contaminantes con los mecanismos de reacción correspondientes.

Al emplear modelos matemáticos para la evaluación de posibles alternativas de control, es importante considerar que estas sean soluciones verdaderas del problema, y no simples paliativos. Es por esto que deben considerarse, además de los efectos sobre la meteorología y dispersión atmosférica que pueda tener una alternativa, el impacto ambiental y efectos socioeconómicos de la misma. Las únicas soluciones verdaderas que se dislumbran para este problema requieren de la disminución de la emisión de contaminantes mediante la optimización de procesos industriales, instalación de equipos de control de emisiones, mejoramiento de combustibles y promoción de opciones de transporte más limpias (facilidades viales a ciclistas y desarrollo de vehículos eléctricos). Además se recomienda promover la investigación en otras formas de producción de energía, como la solar y la geotérmica.

APENDICE 1. Notación tensorial

Con fin de simplificar la escritura de las ecuaciones que se manejan en este trabajo se ha empleado la llamada *notación tensorial*. La cual se describe brevemente a continuación (para un análisis más profundo de dicha notación consultar, entre otros, Bradshaw 1971).

Esta notación tiene la ventaja de permitirnos escribir en forma condensada un sistema de ecuaciones de la misma estructura matemática, además de representar dentro de una misma ecuación, en forma sintetizada, la suma de varios términos, esto es:

$$A_{ij}x_j = B_i \quad (\text{A.1.1})$$

que representa el siguiente arreglo matricial:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 &= b_3 \end{aligned} \quad (\text{A.1.2})$$

En el presente trabajo, sólo es necesario tener presente que la repetición de un índice dentro de un mismo término representa una suma:

$$a_1 x_1 = a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 \quad (\text{A.1.3})$$

Por ejemplo, la ecuación (3.3) de este trabajo corresponde en realidad a tres diferentes ecuaciones cuyo primer término puede ser: $\partial \rho u_1 / \partial t$, $\partial \rho u_2 / \partial t$ o bien $\partial \rho u_3 / \partial t$; mientras que el segundo corresponde a la suma de tres términos, esto es:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_j u_i = \frac{\partial}{\partial x_1} \rho u_1 u_i + \frac{\partial}{\partial x_2} \rho u_2 u_i + \frac{\partial}{\partial x_3} \rho u_3 u_i \quad (\text{A.1.4})$$

Cuando un subíndice esta repetido, pero no dentro del mismo término, no existe suma alguna.

Finalmente, debemos recordar que el valor de los subíndices empleados en la notación tensorial varía; para nuestro caso, por tratarse de un modelo tridimensional, el valor de los índices empleados será: $i, j = 1, 2 \text{ y } 3$.

APENDICE 2 Método numérico de solución

El método de solución numérica utilizado para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales parciales presentado en el capítulo cuatro es el Método Implícito de Dirección Alternante (Alternating Direction Implicit).

En este apéndice, con el objeto de hacer en forma clara y esquemática la presentación de ADI, se explica la esencia del método mediante su ejemplificación con una ecuación diferencial parcial que no pertenece al modelo HOTMAC.

La ecuación de temperatura

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{A.2.1})$$

Puede ser resuelta empleando procedimientos numéricos explícitos o implícitos. La estabilidad numérica de los métodos explícitos, es función de la malla de cálculo (espacial y temporal), requiriendo de pasos de tiempo muy pequeños para asegurar estabilidad.

Las inestabilidades de los métodos explícitos no son compartidas por los llamados métodos implícitos, donde las segundas derivadas de la ecuación (A.2.1) son reemplazadas por diferencias evaluadas para una temperatura desconocida T_{n+1} , y las ecuaciones resultantes calculadas iterativamente (ver Peaceman y Rachford, 1955).

En el método de direcciones alternantes que se emplea en HOTMAC, sólo se reemplaza una de las segundas derivadas, $\partial^2 T / \partial x^2$, por la diferencia evaluada en un valor desconocido de T , mientras la otra segunda derivada, $\partial^2 T / \partial y^2$, se sustituye por una diferencia evaluada en un valor conocido de T . Esto origina un grupo de ecuaciones simultáneas que pueden ser resueltas fácilmente sin necesidad de iterar; estas ecuaciones son implícitas para la dirección x .

Si el procedimiento es repetido, para un segundo paso de tiempo de igual tamaño, empleando ahora un sistema de ecuaciones implícito en y , se obtiene un procedimiento que, para dos pasos de tiempo, es numéricamente estable.

De esta manera dos ecuaciones diferentes son usadas, una para el primer paso de tiempo, la otra para el segundo paso de tiempo:

$$\frac{T_{1,j,2n+1} - T_{1,j,2n}}{\Delta t} = \frac{T_{i-1,j,2n+1} - 2T_{i,j,2n+1} + T_{i+1,j,2n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{T_{i,j-1,2n} - 2T_{i,j,2n} + T_{i,j+1,2n}}{(\Delta y)^2} \quad (\text{A.2.2})$$

$$\frac{T_{1,j,2n+2} - T_{1,j,2n+1}}{\Delta t} = \frac{T_{i-1,j,2n+1} - 2T_{i,j,2n+1} + T_{i+1,j,2n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{T_{i,j-1,2n+2} - 2T_{i,j,2n+2} + T_{i,j+1,2n+2}}{(\Delta y)^2} \quad (\text{A.2.3})$$

que pueden ser arregladas en forma más adecuada para efectuar cálculos:

$$T_{1-1,j,2n+1} - (2 + T) T_{1,j,2n+1} + T_{1+1,j,2n+1} = -T_{1,j-1,2n} \\ + (2 - T) T_{1,j,2n} - T_{1,j+1,2n} \quad (\text{A.2.4})$$

y:

$$T_{1,j-1,2n+2} - (2 + T) T_{1,j,2n+2} + T_{1,j+1,2n+2} = -T_{1-1,j,2n+1} \\ + (2 - T) T_{1,j,2n+1} - T_{1+1,j,2n+1} \quad (\text{A.2.5})$$

en donde el factor de escalamiento numérico, es la relación entre el tamaño de la malla espacial y la temporal, $T = (\Delta x)^2 / \Delta t = (\Delta y)^2 / \Delta t$.

El uso de estas dos últimas ecuaciones para cada paso de tiempo produce N grupos de N ecuaciones simultáneas de la forma

$$B_0 T_0 + C_0 T_1 = D_0 \quad (\text{A.2.6})$$

$$A_n T_{n-1} + B_n T_n + C_n T_{n+1} = D_n \quad 1 \leq n \leq N - 2 \quad (\text{A.2.7})$$

$$A_{N-1} T_{N-2} + B_{N-1} T_{N-1} = D_{N-1} \quad (\text{A.2.8})$$

que se resuelven directamente al evaluar, en forma progresiva creciente los siguientes coeficientes:

$$E_0 = B_0 \quad (\text{A.2.9})$$

$$E_n = B_n - A_n F_{n-1} \quad 1 \leq n \leq N - 1$$

$$F_n = \frac{C_n}{E_n} \quad 0 \leq n \leq N - 2 \quad (\text{A.2.10})$$

y:

$$G_0 = \frac{D_0}{E_0} \quad (\text{A.2.11})$$

$$G_n = \frac{D_n - A_n G_{n-1}}{E_n} \quad 1 \leq n \leq N - 1$$

que al sustituirse en las ecuaciones (A.2.6) a (A.2.8), permiten evaluar T en forma progresiva decreciente, esto es:

$$\begin{aligned} T_{N-1} &= G_{N-1} \\ T_n &= G_n - F_n T_{n+1} \quad 0 \leq n \leq N-2 \end{aligned} \quad (\text{A.2.12})$$

Entonces E , F y G son calculadas en orden creciente, mientras que T es calculado en orden decreciente de n .

APENDICE 3 Variables de entrada

Los datos presentados en este apéndice son las variables de entrada utilizadas por el modelo HOTMAC, las cuales se presentan en cinco grupos: datos de malla, valores iniciales, áreas verdes, parámetros físicos y parámetros computacionales. La información presentada corresponde al ejemplo de aplicación (3 de Febrero de 1988, a las 18:00 hrs). Para un análisis más detallado sobre los factores físicos presentados; revisar Carbajal, 1992.

		valor	unidades
DATOS DE MALLAS			
ngmax	Número de mallas	2	adimensional
ibgn	Indice i para iniciar malla fina (ngmax-1 valores)	7	adimensional
jbgn	Indice j para iniciar malla fina (ngmax-1 valores)	8	adimensional
imax	Número de celdas en la dirección x (ngmax valores)	20, 21	adimensional
jmax	Número de celdas en dirección y (ngmax valores)	25, 27	adimensional
kmax	Número de celdas en la dirección z	15	adimensional

ksmax	Número de celdas en el suelo	5	adimensional
iintvl	Incremento i para imprimir (ngmax valores)	3,3	adimensional
jintvl	Incremento j para imprimir (ngmax valores)	1,1	adimensional
kintvl	Incremento k para imprimir	1	adimensional
irept	Número de iteraciones en el tiempo (malla gruesa)	750	adimensional
utmx	Posición de la esquina inferior izquierda (malla gruesa)	430	km
utmy	Posición de la esquina inferior izquierda (malla gruesa)	2080	km
xintvl	Dimensión en x de la celda (malla gruesa)	6000	m
yintvl	Dimensión en y de la celda (malla gruesa)	6000	m
zgmax	Altura máxima del terreno	4581	msnm

VALORES INICIALES

umax0	Velocidad máxima	2	m/s
reducu	Factor de escalamiento de la componente u de velocidad	1	adimensional
reducv	Factor de escalamiento de la componente v de velocidad	1	adimensional
dwind	Dirección inicial del viento	30.0	grados
deltma	Paso máximo de tiempo	278.0	s
dzdksi	Resolución de la malla en la la capa superficial	4.0	m
zkmaxpl	Altura máxima de cálculo	4000	msnp
tgmma1	Perfil de temperaturas en la capa baja de inversión	0.0001	°C/m
tgmma2	Perfil de temperatura en la capa media de inversión	0.0012	°C/m
tgmma3	Perfil de temperatura en la capa alta de inversión	0.0038	°C/m
elvinv11	Altura de la primera capa de inversión	3238.0	msnm
elvinv12	Altura de la segunda capa de inversión	5838.0	msnm

psea	Presión a nivel del mar	672.0	mb
day0	Día Juliano	34	adimensional
alst	Tiempo local estandar	18.0	horas
delgmt	Diferencia con el meridiano de Greenwich	6	horas
clog	Longitud del centro de la malla (ngmax valores)	99.095, 99.124	grados
clat	Latitud del centro de la malla (ngmax valores)	19.491, 19.436	grados
rhinit	Humedad relativa inicial sobre el suelo	0.2	adimensional
rhinit0	Humedad relativa inicial en el suelo	0.2	adimensional
gnudge	Coefficiente de <i>empuje</i>	0.000	
wdobs	Dirección observada del viento	30	grados
wsobs	Velocidad observada del viento	3.0	m/s
zobs	Altura de observación del viento	7000	msnm

AREAS VERDES

ktrans	Número de celdas lineales en z	5	adimensional
drag	Coefficiente de fricción	0.2	adimensional
drgmax	Valor máximo de coeficiente de fricción	0.5	adimensional
htree	Altura de árbol	15.0	m
treez1	Altura normalizada a la base de la copa de árbol	0.1	adimensional
treez2	Altura normalizada a la base de rama muerta	0.05	adimensional
atree	Fracción cubierta por árboles	0.8	adimensional
excoef	Coefficiente de extinsión	0.6	adimensional
atree	Fracción cubierta por árboles	0.8	adimensional
almax	Máxima densidad de superficie de árboles cubierta por hojas	1.0	m ⁻¹
asmax	Máxima densidad de superficie de árboles no cubierta por hojas	0.05	m ⁻¹
bratio	Relación de Bowen para follaje	1.5	adimensional

PARAMETROS FISICOS

optpw	Profundidad óptica del vapor de agua	0.3	m
albedog	Albedo del suelo	0.3	adimensional
albedot	Albedo de árboles	0.1	adimensional
emissig	Emisividad del suelo	0.98	adimensional
boweng	Relación de Bowen para el suelo	0.2	adimensional
bowmin	Valor mínimo de la relación de Bowen	-10.0	adimensional
bowmax	Valor máximo de la relación de Bowen	10.0	adimensional
edmin	Viscosidad mínima turbulenta	2.0×10^{-5}	m^2/s
edmax	Viscosidad máxima turbulenta	500.0	m^2/s
constr	Fracción cubierta por nubes	0.8	adimensional
ptemp0	Temperatura potencial a nivel del mar	47.0	$^{\circ}C$
twater	Temperatura del agua	13.8	$^{\circ}C$
rhos	Densidad del suelo	1500	Kg/m^3
cs	Calor específico del suelo	1256	$cal/g^{\circ}C$
edksc	Difusividad térmica del suelo	4.44×10^{-7}	m^2/s
csu	Calor específico urbano	880	$cal/g^{\circ}C$
edksu	Difusividad térmica urbana	2.3×10^{-3}	m^2/s
rhosu	Densidad del suelo urbano	2.3×10^3	Kg/m^3

PARAMETROS COMPUTACIONALES

tolera	Tolerancia	0.1	adimensional
relax	Coefficiente de relajación	0.30	adimensional
nlimit	Iteraciones para la componente w	15	adimensional
kadd	Número de celdas adicionales	10	adimensional
delzr	Incremento de z en celdas adicionales	$10 * 1000$	m
dtdzadd	Incremento de temperatura en celdas adicionales	0.0033	$^{\circ}C/m$
dqdzadd	Incremento de h en celdas adicionales	-0.007	$g/kg-m$
qminadd	Valor mínimo de h en celdas adicionales	1.0	$g/kg-m$

smooth	Factor de suavizado	0.5	adimensional
topradd	Flujo de radiación en las celdas adicionales	85	W/m^2

BIBLIOGRAFIA

AGUIRRE R. (1991) "Aplicación de modelos de turbulencia para predecir la dispersión de contaminantes en la atmósfera". Instituto de Ingeniería. (en revisión)

BACH W. (1972) "Atmospheric pollution". McGraw Hill Book Company.

BRADSHAW P. (1971) "An introduction to turbulence and its measurement". Pergamon Press.

BRAVO H. (1987) "La contaminación del aire en México". Fundación Universo Veintiuno A.C.

CARBAJAL C. (1992) "Estudio sobre los factores físicos utilizados en los modelos matemáticos de dispersión atmosférica "HOTMAC" y "RAPTAD", para su uso en la zona metropolitana de la Ciudad de México. Instituto de Ingeniería UNAM. Proyecto 0335.

CEBECI T., BRADSHAW P. (1984) "Physical and computational aspects of convective heat transfer". Springer-Verlag.

CRUIKSHANK C., ITURBE R., SILVA A., VEGA E., RAMIREZ A., RAMIREZ R., TOVAR R., KEMPER N. y AGUIRRE R. (1990) "Efecto contaminante del transporte y disposición final de las cenizas de las termoeléctricas de Rio Escondido y Carbon II". Instituto de Ingeniería UNAM. Proyecto No. 9369

DOBBINS R. (1979) "Atmospheric motion and air pollution". Ed. John Wiley and Sons.

ECHOLS T. (1976) "A short course on plume rise computations" Meteorology Sections Texas Cir. Control Board.

HIDY G. (1972) "Los vientos, orígenes y el comportamiento del movimiento atmosférico". Ed. Reverte.

JICA (1990) "Study on the air pollution control plan of stationary sources in the metropolitan area of the Mexico City". Japan International Corporation Agency.

LEGG B., RAUPACH M. (1982) "Markov-Chain simulation of particle dispersion in inhomogeneous flow: The mean drift velocity induced by gradient in eulerian velocity variance". Boundary Layer Meteorology. Vol. 24

MELLOR G., YAMADA T. (1974) "A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers". Journal Atmospheric Science.

MELLOR G., YAMADA T. (1982) "Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems". Reviews of Geophysics on Space Physics. Vol. 20, No. 4.

OKE T. (1987) "Boundary layer climates". Second Edition. Ed. Methuen.

PARKER A. (1983) "Contaminación del aire por industrias." Ed. Reverte.

PATANKAR S. (1980) "Numerical heat transfer on fluid flow". Hemisphere Publishing Corporation. McGraw Hill.

PIELKE R. (1984) "Mesoscale meteorological modeling". Ed. Academic Press.

SEDUE (1987) "Políticas y estrategias de abatimiento y control de la contaminación de la Zona Metropolitana de la Ciudad de México". Primer seminario internacional sobre administración de la calidad del aire. Secretaría de Desarrollo Urbano y Ecología.

SEINFELD J. (1978) "Contaminación atmosférica. Fundamentos físicos y químicos". McGraw Hill.

STERN A. (1971) "Air Pollution". Vol 1. Second Edition. Academic Press Inc.

STERN A., BOUEL W., TURNER B., FOX D. (1984) "Fundamentals of Air Pollution". Second edition. Academic Press Inc.

TIRADO A., MARTINEZ G. (1988) "Ingeniería Ambiental". Apuntes de clase. Facultad de Química, UNAM.

TURNER B. D. (1969) "Workbook of atmospheric estimate". U.S. Public Health Serv Publ: 999-AP-36.

WILLIAMS M., STREIT G.E (1990) "Atmospheric Modeling in Complex Terrain". Los Alamos National Laboratory. Rough Draft.

WILLIAMS M., PORCH W. (1991) "Application of a Three-Dimensional Prognostic Model to Mexico City Air Quality Studies". Los Alamos National Laboratory, LA-UR 91-825.

YAMADA T. (1978) "A three-dimensional second-order closure numerical model of mesoscale circulation in the lower atmosphere". Argonne National Laboratory, ANL/RER-78-1.

YAMADA T. (1981) "A numerical simulation of nocturnal drainage flow". Journal of Meteorological Society of Japan. Vol. 59, No.1

YAMADA T. (1983) "Simulations of nocturnal drainage flow by a q^2 turbulence closure model". Journal of Atmospheric Sciences. Vol 40, No. 1.

YAMADA T., BUNKER S. (1987) "Development of a Nested Grid, Second Moment Turbulence Closure Model and Application to the 1982 ASCOT Brush Creek Data Simulation". Journal of Applied Meteorology. Vol 27, No 5

YAMADA T., WILLIAMS M., STONE G. (1989) "Chemical Downwind Hazard Modeling Study". Los Alamos National Laboratory, LA-UR-1061.