

18  
2ej.



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO**

**FACULTAD DE CIENCIAS**

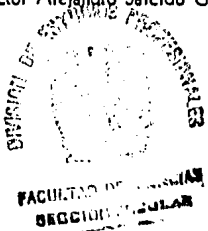
**UN MODELO DE AUTOMATAS CELULARES PARA LA  
SIMULACION DE LA DISPERSION ATMOSFERICA  
DE CONTAMINANTES**

**T E S I S**  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
**F I S I C O**  
P R E S E N T A  
**ALEX ONAR GONZALEZ MELLADO**

Asesor: Dr. Víctor Alejandro Salcido González

MEXICO, D. F.

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**



1994



Universidad Nacional  
Autónoma de México



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

CIUDAD UNIVERSITARIA



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AVENIDA DE  
MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS  
División de Estudios  
Profesionales  
Exp. Núm. 55

M. EN C. JOAQUIN CIFUENTES BLANCO  
Jefe de la División de Estudios Profesionales  
Universidad Nacional Autónoma de México  
P r e s e n t e

Por medio de la presente, nos permitimos informar a Usted, que habiendo revisado el trabajo de tesis que realiz ó el pasante ALEX ONAR GONZALEZ MELLADO con número de cuenta B577702B-3 con el título: "UN MODELO DE AUTOMATAS CELULARES PARA LA SIMULACION DE LA DISPERSION ATMOSFERICA DE CONTAMINANTES"

Consideramos que reúne los méritos necesarios para obtener el título de - - -  
FISICO.

Comunicamos lo anterior para los fines a que haya lugar.

A t e n t a m e n t e  
México, D. F., a 13 de mayo de 1994.

- 1.- DR. VICTOR ALEJANDRO SALCIDO GONZALEZ  
grado Nombre (s) Apellidos completos
- 2.- M. EN C. TELMA GLORIA CASTRO ROMERO  
grado Nombre (s) Apellidos completos
- 3.- DR. JESUS ANTONIO DEL RIO PORTILLA  
grado Nombre (s) Apellidos completos
- 4.- Sup. M. EN C. AUGUSTO CABRERA MANUEL  
grado Nombre (s) Apellidos completos
- 5.- Sup. ING. RICARDO SALDAÑA FLORES  
grado Nombre (s) Apellidos completos

NOTA: El interesado deberá ponerse de acuerdo con el jurado para fijar fecha (día y hora) del examen, para evitar problemas de asistencia. ES IMPORTANTE LA PUNTUALIDAD.

Quiero agradecer en primer lugar el enorme e invaluable apoyo económico, que me fué brindado por la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (D.G.A.P.A) con la que fué posible desarrollar y finalizar este trabajo.

Por ser éste un estudio de investigación, tanto la implementación del modelo así como la operación del mismo requirió un tiempo bastante grande que se fue extendiendo de forma natural más allá de lo establecido por las normas estipuladas por su organismo. Por ello agradecemos nuevamente su colosal y paciente espera, la cual fue fructífera pues sin ella no hubiera sido posible obtener los resultados tan alentadores con los que hasta ahora contamos.

**A MI  
HERMANA TATIANA**

**A TODOS  
MIS SOBRINOS  
MEXICANOS Y CHILENOS**

**Y A TODA  
LA GENTE JOVEN  
QUE VIENE EMPUJANDO DURO HACIA ADELANTE !**

Que no caigan en la bajada  
ni en la subida del camino

Que no encuentren obstáculos  
ni detras ni delante de ellos  
ni cosas que los golpée

Concédeles buenos caminos  
hermosos caminos planos

*Popol-Vuh*

Nada autoriza al hombre de pensamiento,  
por excepcional que sea, a admitir que la  
superioridad intelectual ó la extensión de  
los conocimientos representan los únicos  
verdaderos valores y a desconocer lo que hay  
de grande en todas las consagraciones y en  
todas las tareas concienzudamente cumplidas,  
ni lo que hay de útil en todas las actividades  
fecundas

**Luis de Broglie**  
*Physique et Microphysique*

## INDICE

<b>PREFACIO</b> . . . . .	(2)	
<b>RESUMEN</b> . . . . .	(4)	
<b>CAPITULO 1. ANTECEDENTES</b>		
1.1 La Crisis Ambiental . . . . .	(7)	
1.2 La Contaminación Atmosférica . . . . .	(8)	
1.3 Los Contaminantes del Aire . . . . .	(9)	
1.4 El Control de la Contaminación Atmosférica . . . . .	(12)	
1.5 Sistemas de Control de las Emisiones Contaminantes . . . . .	(14)	
1.5.1 Control por Separación . . . . .	(14)	
1.5.2 Control por Conversión . . . . .	(16)	
1.6 La Importancia de la Modelación de la Calidad del Aire . . . . .	(17)	
1.7 La Metodología de la Modelación de la Calidad del Aire . . . . .	(18)	
1.8 Tipos de Modelos de la Calidad del Aire . . . . .	(20)	
<b>CAPITULO 2. DEFINICION DEL PROBLEMA</b> . . . . .		(22)
<b>CAPITULO 3. ASPECTOS METEOROLOGICOS</b>		
3.1 La Capa Límite Planetaria . . . . .	(27)	
3.2 Los Movimientos Atmosféricos . . . . .	(28)	
3.3 La Estructura de la PBL . . . . .	(31)	
3.4 Estabilidad Vertical de la Atmósfera . . . . .	(32)	
3.5 Principales Factores Meteorológicos Importantes en la Dispersión de Contaminantes . . . . .	(34)	
<b>CAPITULO 4. MODELACION MATEMATICA DE LA CALIDAD DEL AIRE</b>		
4.1 Modelos de Elevación de Pluma . . . . .	(37)	
4.2 Modelos Eulerianos de Dispersión . . . . .	(40)	
4.3 Modelos Gausianos de Dispersión . . . . .	(48)	
4.4 Modelos Lagrangianos de Dispersión . . . . .	(55)	
<b>CAPITULO 5. MODELOS DE AUTOMATAS CELULARES PARA FLUIDOS</b>		
5.1 Qué son los Automatas Celulares? . . . . .	(63)	
5.2 Modelos de AC para Fluidos. . . . .	(66)	
5.3 Modelo de 9 Velocidades (9V) . . . . .	(67)	
5.4 Propiedades de Equilibrio . . . . .	(71)	
5.5 Hidrodinámica discreta . . . . .	(76)	
<b>CAPITULO 6. UN MODELO ALTERNATIVO PARA DISPERSION DE CONTAMINANTES</b>		
6.1 Definición e Implementación del Modelo . . . . .	(82)	
6.2 El Problema de las Condiciones Iniciales . . . . .	(89)	
6.3 Efectos Gravitacionales de Flotación . . . . .	(94)	
<b>CAPITULO 7. SIMULACIONES Y RESULTADOS</b> . . . . .		(98)
<b>CAPITULO 8. CONCLUSIONES</b> . . . . .		(104)
<b>APENDICE</b> . . . . .		(108)
<b>BIBLIOGRAFIA</b> . . . . .		(111)

---

## PREFACIO

---

La motivación de este trabajo, nació a partir de una inquietud que fué generándose, a lo largo de esta gran maratón intelectual, que representó la carrera de física.

En general siempre se ha pensado, por la mayoría de las personas, que la física es una actividad extrañísima, cuyos dominios parecen estar en otros mundos muy lejanos a éste y que si le ubicáramos un posible lugar, lo más idóneo sería decir que es una ciencia que gobierna el "Limbo de Dante". Ni qué decir, por otra parte, de la opinión que tiene la gente sobre nosotros. Existen desde aquellos que nos creen una raza superior, que sufrimos alguna extraña mutación en el cerebro, casi como el legendario personaje de Asimov, el "Mulo", en su famosa trilogía de las Fundaciones, hasta los que simplemente nos colocan entre los desubicados de la sociedad, por nuestra ínfima preocupación hacia los goces y bienes materiales que nos dá nuestra "plus-ultra" sociedad moderna!

En fin, el espectro existente de comentarios es ancho y todo integrante que se digne de trabajar en esta área de la ciencia, habrá sufrido en carne propia este tipo de observaciones. Sin embargo, lo que se trata de mostrar es que el físico también es una persona preocupada por los problemas que nos aquejan cotidianamente, y la muestra de ello esta en éste y en muchos otros estudios que se han venido desarrollando en los últimos años.

Junto a la increíble oportunidad, de haber tenido el privilegio de estudiar algunos de los muchos mecanismos que gobiernan lo intrínseco de la naturaleza, me fué envolviendo, a lo largo de estos años de intensa vida universitaria, una afición maravillosa: la de querer convivir con ella, de una manera mucho más sensitiva y directa que la racional conocida por mí hasta entonces.

La naturaleza salvaje e indómita que he llegado a ver en muchas de mis salidas a campo, tanto en la actividades de montañismo como de buceo, me ha llenado de asombro y de respeto, pues me he podido percatar cuán frágiles somos dentro de ella y a su vez qué tan importante es para nuestras vidas que tratemos de preservar su delicado equilibrio.

Es difícil creer, cuanto nos hemos alejado de nuestro habitat natural en unas pocas décadas. Nos hemos dado el lujo de hacer destrozos de magnitudes incalculables. Talar árboles sin control, llenar todo nuestro habitat de concreto y hierro, generar basura casi sin límite, ensuciar el agua y el aire con nuestras industrias y un sinnfin de cosas más. Nosotros que fuimos engendrados por lo que ahora estamos destruyendo somos los responsables directos de detener este



deterioro ambiental, es nuestra obligación denunciar lo que está ocurriendo, hablar del problema una y otra vez y lo más importante, tratar de ponerle solución.

Por el amor que le tengo a la naturaleza, desengañando por demás al público en general, que piensa que los físicos estan solamente en problemas alejados de los cotidianos y sin interés para la sociedad, me inicié en este trabajo, el cual me pareció muy atractivo desde el principio por tener 2 ingredientes: uno, se iba a estudiar un problema de primera magnitud hoy en día, esto es la dispersión de contaminates en la atmósfera (contaminación atmosférica) y dos, para lograr ésto se iba a crear un modelo de dos gases usando una técnica computacional de primera línea llamada Autómatas Celulares, cuya implementación de la fisica llevaba a complicados problemas teóricos.

Este arduo trabajo, lo disfrute mucho. Aprendí bastante sobre el tema de contaminación y de sus modelos que se han ido desarrollando a lo largo de estas últimas décadas, pero por otro lado me hizo ver cuan poco sé todavía y, lo mucho que me falta por aprender aún !!.

Quiero dejar escrito, que esta Tesis es la culminación de una escalada intelectual que empezó hace años y que fué posible emprender gracias al enorme apoyo incondicional que me brindaron mis padres, así que pues a ellos un inmenso abrazo y mi eterna gratitud. **GRACIAS JEFES !!**

Quiero también agradecer el apoyo que se me brindó y la gran hospitalidad que tuvo mi asesor el *Dr. Alejandro Salcido* y familia en las múltiples sesiones de discusión efectuadas allá en la hermosa Cuernavaca. Morelos.

Agradezco a mis sinodales, el Dr. Jesús Antonio del Río, los Maestros en Ciencia Telma Castro y Augusto Cabrera y al Ing. Ricardo Saldaña, por su interés y por sus valiosas sugerencias y comentarios, así como la valiosa participación del Lic. Victor Hugo Godoy en el diseño de todos los dibujos que componen este trabajo.

Por último quiero agradecer y dedicar esta investigación, primero con especial cariño, a una mujer con la que he compartido experiencias inolvidables y cuya persona influyó de forma definitiva en mi vida a lo largo de estos últimos años: mi compañera Mercedes Cortes. Pues a ella un **GRAN BESO !**

Y segundo a todos los amigos que hice en la UNAM, con los cuales cree hermosos e impercederos lazos de amistad y cuya presencia amenizó la mayor parte de mi vida estudiantil aquí en la máxima casa de estudios. **GRACIAS CUATES !**

---

## RESUMEN

---

Hoy más que nunca el problema de la contaminación, en especial la atmosférica, es un hecho que no solo concierne a los gobiernos sino a cada uno de nosotros, pues día con día el deterioro del planeta se hace más evidente e incontrolable. Todos los esfuerzos destinados a revertir este problema, ya sea creando conciencia a todos los niveles, así como los estudios pertinentes para llevar a cabo campañas de control son importantes. Motivado por esta compleja situación, el presente trabajo intenta crear un modelo que simule la dispersión de contaminantes atmosféricos. El objetivo más relevante de este estudio es proponer un método alternativo con la finalidad de atacar y resolver, aunque solo cualitativamente, por lo pronto, el complejo y aún no resuelto problema de la dispersión de contaminantes. El trabajo consta de ocho capítulos los cuales se resumen a continuación.

En el primer capítulo, se expone brevemente la problemática de la contaminación ambiental, existente hoy en día en nuestro planeta. Sabemos que existen varios tipos de contaminación, tales como la de la tierra, las aguas, la radioactiva y la atmosférica, todas ellas de enorme relevancia. Sin embargo, la que con más detalle tratamos, por ser la parte medular del trabajo, es la contaminación del aire o atmosférica. Comenzamos con un tratamiento histórico, recalando que este problema de ninguna manera es moderno, pues ya se había predicho algunos siglos antes. Su agravamiento en las últimas décadas ha provocado grandes daños tanto en la salud humana como en el frágil equilibrio que gobierna nuestro ecosistema. Seguimos con una descripción breve de los sistemas de control de la contaminación que existen actualmente con el fin de mostrar lo que se ha hecho para tratar de disminuir esta calamidad del siglo XX. En la misma dirección, exponemos la importancia de la modelación para este tipo de problemas, mostrando la gran variedad de modelos que existen hoy en día.

El segundo capítulo, explica la propuesta de este trabajo. Hacemos una pequeña introducción histórica de los Automatas Celulares, cómo surgen y para qué son utilizados hoy en día, destacando la importancia que han tenido últimamente en la modelación de fluidos discretos (Lattice Gas). Debido a la complejidad del comportamiento y de la descripción de los modelos de dispersión de contaminantes, causada por las mismas ecuaciones no-lineales que gobiernan la mecánica de fluidos, en este trabajo se presenta una forma alternativa, radicalmente diferente, para atacar este tipo de problemas: un modelo de gases en redes para la simulación de los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes atmosféricos.

En el tercer capítulo exponemos la relevancia de la Meteorología en nuestro

trabajo. Sabemos que la evolución futura de los contaminantes inyectados a la atmósfera, esta gobernada por las leyes de la dinámica atmosférica. La ciencia que estudia estos fenómenos es precisamente la Meteorología. Comenzamos con una descripción de las características de las capas que componen la atmósfera, analizando con especial detalle la capa en donde los fenómenos de dispersión de contaminantes son relevantes, esto es, la *capa límite*. Además analizamos los fenómenos que son responsables del transporte de los contaminantes, en especial la *turbulencia*, misma que es provocada por los gradientes de temperatura generados por la variación día-noche. Por último, mencionamos las formas de clasificar los estados turbulentos exponiendo el tema de *estabilidad* atmosférica.

El cuarto capítulo es una muestra de los diferentes modelos de Elevación de Pluma existentes en la actualidad, así como una exposición resumida de los múltiples modelos de dispersión generados por los modelos Gausianos, Lagrangiano y de Partículas. Este capítulo es relevante ya que tiene la finalidad de mostrarnos qué se ha hecho hasta ahora en cuanto a modelación de dispersión de contaminantes.

En el quinto capítulo hacemos una pequeña introducción histórica de la técnica computacional de modelación denominada Automatas Celulares, así como de la creación de una nueva área *per se* de la modelación de fluidos llamada hidrodinámica discreta (Lattice Gas Hydrodynamics). A continuación mencionamos los modelos actuales ya existentes para simular fluidos discretos, tales como son el de Hardy, de Pazzis y Pomeau (HPP), el de Frish, Hasslacher y Pomeau (FHP) y con especial detalle el de nueve velocidades (9V), por ser éste último un modelo que cuenta con propiedades termodinámicas. Por último, efectuamos un análisis físico utilizando la mecánica estadística, con el objeto de obtener las propiedades de equilibrio del gas discreto.

El sexto capítulo es en realidad la médula de este trabajo, ya que aquí se analiza con detalle el modelo que hemos propuesto. Comenzamos con una exposición formal del autómata celular que se implementó en la computadora, así como las diversas reglas de actualización que fueron manejadas con el objeto de generar la evolución deseada de la dispersión de contaminantes. Se presenta la manera en que se simuló el fenómeno de la gravedad implementando para ello el efecto de flotación y el delicado problema de las condiciones iniciales o inicialización del autómata.

En el séptimo capítulo exponemos los resultados obtenidos de cuatro simulaciones, tres de las cuales fueron hechas con el objeto de observar si el modelo propuesto se comportaba, al menos cualitativamente, como un fluido real, mientras que la última consistió en examinar la elevación y dispersión de una pluma de gases contaminantes en una atmósfera en condiciones neutrales.

Por último, el octavo capítulo, presenta la conclusión de este trabajo; en él efectuamos un análisis de los resultados obtenidos, y exponemos las limitaciones y

las dificultades encontradas en el modelo propuesto. Hacemos, además, breves comentarios respecto de la utilización de la técnica de los gases en redes en dinámica de fluido, así como de los problemas de dispersión de contaminantes. Finalmente, presentamos los lineamientos, que según nuestra opinión, tendrán que seguir los futuros trabajos con el fin de mejorar y perfeccionar esta propuesta.

Por otra parte se incluye un apéndice en el que se aclaran una serie de términos que se encuentran a lo largo de este trabajo.

### 1.1 La Crisis Ambiental

En la actualidad, el ser humano se encuentra en un proceso cada vez más vigoroso de toma de conciencia acerca de la gran paradoja que ha creado en aras de la evolución científica y tecnológica y el desarrollo industrial concomitante: El hombre, en la búsqueda del beneficio y la comodidad de su especie, ha deteriorado también, y de manera bastante severa, su medio ambiente, amenazando la continuidad misma de la vida sobre la Tierra (Cantú, 1992).

El smog en las grandes ciudades, la lluvia ácida, la destrucción de las tierras de cultivo por erosión o por agotamiento del suelo, el envenenamiento de diversas especies animales por el uso de pesticidas en la agricultura, el incremento de la radiación de fondo por los accidentes nucleares y los desechos radiactivos de las plantas nucleoelectricas, la enorme cantidad de desperdicios sólidos y líquidos de los procesos industriales, el ruido, el calentamiento global del planeta y la destrucción de la capa de ozono, son solamente algunos ejemplos de los problemas ambientales que padecemos en nuestros días por el creciente desarrollo industrial, la explosión demográfica y el uso irracional de los recursos naturales.

Los problemas derivados de la contaminación ambiental son, en realidad, tan antiguos como el hombre moderno y, aunque muchos autores e investigadores lo habían venido advirtiendo desde hace tiempo, sólo recientemente se ha reconocido la seriedad del problema, y sólo porque el deterioro del medio ambiente ha alcanzado ya niveles verdaderamente alarmantes, rebasando, en muchos lugares, las capacidades de los mecanismos homeostáticos y de autodepuración de la naturaleza.

Muchas de las actividades antropogénicas se han convertido en fuerzas internas muy intensas que están rompiendo la armonía de la naturaleza, llevándola hasta situaciones tan alejadas del equilibrio que ya no son estables en relación con las perturbaciones. En estas condiciones, como se sabe para los sistemas no-lineales fuera de equilibrio, pueden alcanzarse puntos de bifurcación, dando lugar, de manera irreversible, a nuevos comportamientos de la naturaleza muy diferentes de los comportamientos primitivos, y donde probablemente los seres humanos y muchas otras especies animales y vegetales estén condenadas a desaparecer de la faz de la Tierra.

Ante tales perspectivas, he aquí que el hombre se encuentra, en la actualidad, frente a uno de los desafíos más trascendentales de su historia: Conseguir la conciliación del progreso que impone la vida moderna con el equilibrio de la naturaleza y con un ambiente sano, libre de elementos nocivos para el desarrollo normal de la sociedad y de sus integrantes (Cantú, 1992).

## 1.2 La Contaminación Atmosférica

En general, todos los problemas que surgen por la alteración de un ecosistema son sutiles, complejos, de vastas consecuencias, duraderos y, en algunas ocasiones, diferidos; pero si el ecosistema considerado es la comunidad entera de la vida sobre la Tierra, y si la perturbación afecta a una de sus partes tan importantes como es la atmósfera, entonces los problemas derivados de ello resultan verdaderamente complicados y difíciles de resolver.

Como resultado del proceso de la concentración urbana y de las diferentes actividades humanas, tales como el transporte (con la creciente utilización de vehículos automotores), la proliferación de las plantas termoeléctricas, carboceléctricas y nucleoceléctricas y muchas otras actividades industriales, se vierten múltiples sustancias perjudiciales para la salud a la atmósfera día tras día. En algunos lugares, la presencia de estas sustancias ha deteriorado tanto la calidad del aire que no sólo ha llegado a producir situaciones peligrosas para la salud, sino que incluso, en varias ocasiones, ya han resultado fatales para algunas especies animales y vegetales. Recordemos las hecatombes humanas que sucedieron en el Valle del Mosa (Belgica) en 1930, en Donora (Estados Unidos) en 1948, o en Londres (Inglaterra) en 1952, cuando una inversión térmica se mantuvo estable durante casi setenta y dos horas y provocó la muerte de 3500 personas aproximadamente. Recordemos también otros casos similares que ocurrieron entre los años de 1950 a 1970 en Poza Rica (México), en el Valle de Ruhr (Alemania), en Cincinnati (Estados Unidos) y en Tokio (Japón). Recordemos igualmente los bosques de Europa central desnudos y diezmados; los puentes de metal o los monumentos de piedra roídos por la corrosión. Todos estos son ejemplos de los daños que puede provocar el deterioro severo de la calidad del aire en nuestro planeta (Vernier, 1992; Turk et al., 1973).

La contaminación atmosférica, por otro lado, no es solamente un problema local; los contaminantes emitidos en un sitio determinado son transportados por los vientos y pueden llegar hasta lugares muy remotos, produciendo efectos de largo alcance que no pueden estimarse con facilidad, pero que ciertamente llegan a extenderse hasta las escalas regional, nacional e, incluso, global. Un caso típico es el de las grandes emisiones de contaminantes primarios como el bióxido de azufre ( $SO_2$ ), los cuales sufren transformaciones químicas en la atmósfera y llegan a producir, lejos de los puntos de emisión, otros compuestos como los sulfatos ( $SO_4^{-2}$ )

que son responsables de nuevos efectos adversos como la lluvia ácida. A escala global, los dos ejemplos de mayor interés sobre las consecuencias de largo alcance son el efecto invernadero, el cual consiste en el incremento de la temperatura media de la Tierra debido a las crecientes concentraciones de bióxido de carbono ( $CO_2$ ) en la atmósfera, y la destrucción de la capa estratosférica de ozono, la cual es un filtro natural que nos protege de la intensa radiación ultravioleta provenientes del sol (Zanetti, 1990).

Más recientemente se ha encontrado que la contaminación atmosférica también es un problema grave incluso en el interior de los edificios o de los vehículos donde pasamos más del 80% de nuestro tiempo. De hecho, parece que los contaminantes que respiramos en las atmósferas cerradas de nuestras casas, de nuestras oficinas o de nuestros vehículos, podrían ser mucho más nocivos que los que respiramos en el exterior (Vernier, 1992).

Como dice J. VERNIER : " Ayer, la contaminación atmosférica era la calle. Hoy lo es también, en una escala mayor, el planeta, en una escala más pequeña, nuestra casa. En suma, todo nuestro ecosistema."

### 1.3 Los Contaminantes del Aire

La composición del aire sobre la Tierra ha sufrido muchos cambios a través de la historia. En particular, existen evidencias de que "probablemente el gas más primitivo en el medio ambiente no contenía casi oxígeno libre" y que "el oxígeno se ha acumulado en años más recientes como resultados de la fotosíntesis, proceso utilizado por las primeras especies que no dependían del oxígeno" (Zanetti, 1990). Aquellas primeras especies de vida han desaparecido como consecuencia de los cambios ó adaptación.

Las actividades humanas a principios de siglo XIV, tuvieron una clara perturbación en el equilibrio del medio ambiente de la Tierra cuando el carbón reemplazó a la madera como primera fuente de energía. En nuestro siglo, la utilización generalizada de los productos del petróleo en casi todas las actividades del hombre ha provocado una nueva revolución industrial, caracterizando a las últimas décadas por un creciente incremento de las concentraciones de ciertas sustancias en la atmósfera, tanto de algunas que normalmente se encuentran en ella, como de otras sustancias extrañas que se le han venido agregando.

En términos generales, el fenómeno de la contaminación atmosférica puede considerarse como la adición de sustancias indeseables que son transportadas por los vientos y que modifican la composición de la atmósfera de la Tierra, perjudicando la vida y alterando materiales (Turk, 1973). Aún así, la tarea de definir claramente cuáles son las sustancias que debemos considerar como contaminantes del aire no resulta fácil, ya que implica el establecimiento de un marco de referen-

cia para lo que frecuentemente se denomina composición normal de la atmósfera. (De hecho, una definición ampliamente aceptada para el término *contaminante del aire* es la siguiente: "Aquellas sustancias añadidas al medio ambiente que causan una desviación a la composición geoquímica media de la atmósfera de la Tierra".) Pero además, de alguna forma todas las sustancias pueden ser contaminantes, entendiendo con esto que, para ciertos niveles de su concentración en la atmósfera, pueden volverse tóxicas para la salud humana y para la vida de otras especies. ¿Cuáles son los valores o los umbrales a partir de los cuales una sustancia se vuelve tóxica? ... esto lo estudian los bioquímicos y los médicos.

El aire es una mezcla de gases y no un gas en el sentido estricto. La composición y las cantidades relativas de los gases que forman la atmósfera han cambiado gradualmente a lo largo de millones de años, siendo la composición actual del aire que respiramos (aproximadamente) de: 78% de Nitrógeno ( $N_2$ ), 21% de Oxígeno ( $O_2$ ), 0.03% de bióxido de carbono ( $CO_2$ ) y 0.97% de otros gases, como el monóxido de carbono ( $CO$ ), Argón ( $Ar$ ), Neón ( $Ne$ ), Helio ( $He$ ), etc. Lo que respiramos, sin embargo, no es estrictamente esta mezcla de gases solamente, sino también aerosoles, ya que el aire contiene partículas de polvo lo suficientemente pequeñas para estar suspendidas. Estas partículas son principalmente de humo, de sal de arena fina y cenizas volcánicas. Se pueden encontrar en cantidades enormes: una concentración de cinco millones por litro (5000 por centímetro cúbico) no es anormal, pero estas cifras se reducen en un 90% sobre un mar tranquilo, o bien se multiplican hasta diez veces en un desierto seco y ventoso. Esta es aproximadamente la composición estándar de un aire "normal"; los valores de las cantidades relativas de estos elementos componentes pueden alcanzar límites después de los cuales se vuelven tóxicos y por lo tanto contaminantes. Muestra de esto ha sido la actividad del hombre, sobre todo en el uso indiscriminado del petróleo como combustible, el cual ha enrarecido el aire "normal" agregándole bióxido de nitrógeno ( $NO_2$ ), bióxido de azufre ( $SO_2$ ), monóxido de carbono ( $CO$ ) y partículas pesadas, habiendo óxidos que con la luz solar se transforman en contaminantes fotoquímicos y sustancias ácidas.

Los contaminantes del aire se pueden encontrar en la forma de gases, como el bióxido de azufre, y de partículas sólidas o líquidas, como los polvos, aerosoles y vapores. Estas sustancias contaminantes pueden ser inyectadas a la atmósfera por fuentes naturales, como las erupciones volcánicas y los incendios forestales provocados por los rayos, y por fuentes antropogénicas, como la industria, el transporte, y la agricultura.

Además, algunos contaminantes *primarios* (i.e. aquellos que son emitidos directamente de la fuente) sufren reacciones químicas al entrar a la atmósfera y dan lugar a la formación de otras sustancias contaminantes, llamados contaminantes *secundarios*, los cuales también pueden encontrarse en la forma de gases como el ozono ( $O_3$ ), y de partículas como son los sulfatos ( $SO_4^{-2}$ ).

En la atmósfera, los principales contaminantes gaseosos primarios son los



siguientes:

- (1) los compuestos de azufre (e.g.  $SO_2, H_2S$ );
- (2) los compuestos de nitrógeno (e.g.  $NO, NH_3$ );
- (3) los compuestos de carbono (e.g. Hidrocarburos  $HC, CO$ ); y
- (4) los compuestos de halógenos (e.g. fluoruros, cloruros, bromuros).

Los contaminantes del aire en forma de partículas son muy diversos en cuanto al tamaño y origen de éstas. Por su tamaño, las partículas se clasifican como sigue:

- (1) Partículas gruesas, cuando su diámetro es mayor de  $2.5\mu m$ ;
- (2) Partículas finas (o partículas de materia respirable, RPM) cuando su diámetro es menor que  $2.5\mu m$ .
- (3) Partículas inhalables (o partículas de materia inhalables, IPM), cuando su diámetro es menor de  $0.10\mu m$ .

Para la salud humana, las partículas gruesas son menos peligrosas pues fácilmente las elimina nuestro sistema respiratorio. Sin embargo, las finas son más importantes ya que sus efectos adversos deterioran la salud humana.

Los contaminantes primarios en forma de partículas son los siguientes:

- (1) Iones con diámetro mucho menor que  $0.1\mu m$ , formadas, por ejemplo, por la radiación solar y cósmica, por materiales radiactivos y por procesos de combustión.
- (2) Materiales carbónicos.
- (3) Partículas emitidas por los automóviles.
- (4) Partículas formadas por metales ligeros como sodio, magnesio, aluminio, silicón, potasio y calcio
- (5) Partículas de metales pesados como titanio, vanadio, magnesio, fierro y arsénico.
- (6) Partículas grandes como el polvo y algunos materiales industriales.
- (7) Partículas viajeras como el polen, algunos microorganismos e insectos.

Las reacciones químicas atmosféricas (especialmente la fotoquímica) son responsables de la transformación de los contaminantes primarios en productos de reacciones intermedias (e.g. radicales libres) y finalmente, en productos estables, los principales contaminantes secundarios. Los principales gases contaminantes secundarios son:

- (1) el bióxido de nitrógeno  $NO_2$  formado a partir del monóxido ( $NO$ ).
- (2) el ozono  $O_3$  formado por reacciones fotoquímicas de los óxidos de nitrógeno.

Las reacciones químicas atmosféricas (especialmente la fotoquímica) son res-

ponsables de la transformación de los gases primarios y secundarios en partículas secundarias. Los procesos más conocidos son:

- (1) la transformación del  $SO_2$  en sulfatos ( $SO_4^{-2}$ ),
- (2) la transformación del  $NO_2$  en nitratos ( $NO_3^{-1}$ ); y
- (3) la transformación de compuestos orgánicos en partículas orgánicas.

#### 1.4 El Control de la Contaminación Atmosférica

Así como se ha venido incrementando la contaminación a largo de estas últimas décadas, ha surgido un sinnúmero de grupos que han luchado y siguen luchando contra este fenómeno. Este problema, ya de interés público, ha sido abordado por comisiones tan importantes como el SIMUVINA (Sistema Mundial de Vigilancia del Medio Ambiente de las Naciones Unidas) y la Comisión de Derechos Humanos, por considerar que el derecho a la salud es parte integral de los derechos del hombre.

Además, muchos países en el mundo han establecido, o han comenzado a establecer, leyes y normas sobre la contaminación atmosférica y la calidad del aire. Con estas disposiciones se busca definir y establecer legislaciones que permitan garantizar el derecho de los individuos al aire limpio, la protección de la fauna y la flora, y en general la conservación del medio ambiente. Tales disposiciones también vienen a ser el motor para que los miembros de las sociedades se organicen y demanden mejores medidas de control y corrección por parte de los gobiernos.

En los Estados Unidos, por ejemplo, se ha desarrollado un sistema legislativo complejo sobre la calidad del aire, el cual tiene como objetivo el mejoramiento progresivo de la calidad del aire en aquellas regiones donde existen altos niveles de contaminación atmosférica, así como la conservación del medio ambiente en las regiones que aún cuentan con aire limpio.

En nuestro país también existe una gran preocupación por el mejoramiento y la conservación del medio ambiente. Así, el 1 de marzo de 1988, se puso en vigencia la "Ley General del Equilibrio Ecológico y la Protección al Ambiente", donde se señalan los principales objetivos para la protección de la atmósfera:

- (a) La calidad del aire debe ser satisfactoria en todos los asentamientos humanos y regiones del país.
- (b) Las emisiones de contaminantes a la atmósfera, sean de fuentes artificiales o naturales, fijas o móviles, deben ser reducidas o controladas para asegurar una calidad del aire satisfactoria para el bienestar de la población y el equilibrio ecológico.

Esta ley genera la conformación de nuevas disposiciones reglamentarias en

materia de control de la contaminación atmosférica. En particular, el "Reglamento en Materia de Prevención y Control de la Contaminación de la Atmósfera" define la responsabilidad de la Secretaría de Desarrollo Social (SEDESOL) de formular los criterios ecológicos generales que deberán observarse en la prevención y control de la contaminación de la atmósfera. Tales criterios, a su vez, establecen las bases para la definición de las "Normas Técnicas Ecológicas" (NTE), las cuales determinan los niveles máximos permisibles de la emisión de contaminantes a la atmósfera en cualquiera de sus estados físicos o de energía. Las Normas que ya han sido elaboradas son aplicadas a:

- . Plantas productoras de ácido sulfúrico.
- . Hornos de calcinación de la industria del cemento.
- . Vehículos en circulación y de planta que usan gasolina.
- . Fuentes fijas que operan procesos de combustión con diesel, carbón, combustóleo o gas natural, y para las que emiten partículas sólidas.
- . Emisiones de bióxido de azufre, neblinas de trióxido de azufre y ácido sulfúrico.
- . Características del equipo y el procedimiento de medición para la verificación de los niveles de emisión de contaminantes.

La Norma NTE-CCAT-007/88 establece los niveles máximos permisibles de emisión de partículas, monóxido de carbono, bióxido de azufre y óxidos de nitrógeno, provenientes de procesos de combustión en fuentes fijas, que utilicen únicamente combustóleo como combustible, cuando los gases de combustión no estén en contacto directo con los materiales de proceso, como es el caso de una central termoeléctrica. Esta norma aclara que para los efectos de cuantificación de las emisiones, deberán utilizarse los procedimientos establecidos en las Normas Oficiales Mexicanas correspondientes, a saber: NOM-AA-23-1986 y NOM-AA-107-1988. La primera, trata los temas de protección al ambiente, contaminación atmosférica y la terminología; la segunda se refiere a la calidad del aire, estimación de la altura efectiva de una chimenea y de la dispersión de contaminantes.

El muestreo para conocer la calidad del aire en la zona metropolitana del Valle de México se inició alrededor de los años sesenta con una red manual de monitoreo ambiental, la cual sigue operando y está constituida por 16 analizadores que miden partículas suspendidas. Además, a partir de 1985 se puso en operación la Red Automática de Monitoreo Ambiental, integrada por 25 estaciones que miden el contenido en el aire de bióxido de azufre, monóxido de carbono, ozono, óxidos de nitrógeno, hidrocarburos y partículas suspendidas.

La calidad del aire se evalúa con base en las mediciones realizadas para cada uno de los contaminantes y se expresa en función del denominado Índice Metropolitano de la Calidad del Aire (IMECA), que se publica y difunde por varios canales de información (Salcido & Saldaña, 1993; Gacetas Ecológicas, 1989-1990;

## 1.5 Sistemas de Control de las Emisiones Contaminantes

La pregunta ahora es, si los contaminantes son emitidos a la atmósfera, ¿por qué no instalar en las fuentes emisoras algún artefacto que elimine los contaminantes y deje pasar solamente los gases inofensivos, tales como el aire y la humedad? Semejante objetivo es en realidad perfectamente razonable, y pueden adquirirse diversos tipos de equipo de control de las emisiones contaminantes.

Hay dos clases generales de métodos para controlar las emisiones contaminantes el punto de origen, a saber: separar los contaminantes de los gases inofensivos y eliminarlos de alguna otra forma evitando la descarga en la atmósfera; o bien, los contaminantes se convierten, de alguna forma, en productos inócuos que pueden descargarse sin problemas en la atmósfera.

### 1.5.1 Control por Separación

Antes de examinar métodos concretos, debemos percatarnos de que la separación de los contaminantes de una corriente de gas no puede representar el procedimiento definitivo en la acción de reducción de aquellos, ya que el material reunido no desaparece y, por consiguiente ha de tratarse de alguna otra forma. Y si la eliminación de este residuo no se toma en cuenta, la solución de un problema de contaminación de aire podrá crear a caso un problema de desechos sólidos o de contaminación de agua. Sin embargo, semejante proceso alivia, al menos, la situación, porque resulta mucho más cómodo tratar un pequeño volumen de materia sólida que un volumen grande de aire.

La materia en partículas se deja retener en medios porosos (filtros) que dejan pasar el gas. Tales separaciones son posibles, porque las partículas son mucho más grandes que las moléculas de gas. Para tratar grandes corrientes de gas, los filtros son a menudo en forma de bolsas cilíndricas.

Hay varios aparatos mecánicos de recolección basados en el hecho de que las partículas son más pesadas que las moléculas de gas. Como consecuencia, las partículas se depositan con mayor rapidez y pueden recogerse en una cámara que les deje tiempo suficiente para depositarse. Sin embargo, según lo han demostrado los datos sobre las velocidades de depósito, estos métodos solo son practicables en el caso de partículas muy grandes. Más importante que su velocidad de depósito es el hecho que las partículas más pesadas poseen más inercia. Por consiguiente, si una corriente de gas que contiene contaminantes en partículas se hace girar en

renolino, las partículas podrán ser expulsadas a lugares de donde se las pueda eliminar cómodamente. Un dispositivo de ésta clase llamado *ciclón*, se muestra en la figura 1.1. (Turk et al., 1973)

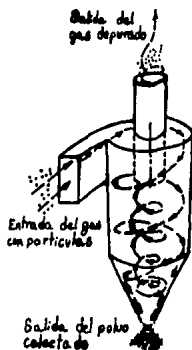


Fig. 1.1. Ciclón. Separador de partículas.

Las partículas también pueden estar cargadas eléctricamente, y una superficie colectoras que lleve una carga de signo contrario los atraerá. Dispositivos de esta clase llamados *depositadores electrostáticos* se utilizan en gran escala sobre todo para reducir el humo de las plantas de energía que queman combustibles fósiles.

Los gases contaminantes no pueden recogerse fácilmente por medios mecánicos, porque sus moléculas no son lo bastante más grandes o más pesadas que las del aire. Sin embargo, algunos gases contaminantes podrán ser acaso más solubles que el aire en un líquido determinado (por regla general, en agua); se los podrá recoger, por consiguiente, por un proceso que los lleve a un contacto íntimo con el líquido. Los aparatos que realizan semejante separación se designan como *depuradores*. Los medios de establecer contacto entre el gas y el líquido incluyen el rociado del líquido en el gas y el burbujeo del gas a través del líquido. El amoníaco ( $NH_3$ ) constituye un ejemplo de gas soluble en agua que se deja extraer de una corriente de aire.

Las moléculas gaseosas se adhieren a superficies sólidas. Inclusive una superficie aparentemente limpia, como la de una pieza brillante de plata, está cubierta con una capa de moléculas de todo gas con la que esté en contacto. Se dice que el gas está *adsorbido* en el sólido. *Adsorbido* significa retenido sobre la superficie de una substancia, y es distinto de *absorbido* que significa retenido en el interior de una substancia. La cantidad de gas que puede ser adsorbida sobre una pieza ordinaria de materia no porosa, como una moneda, es demasiado pequeña para poder servir prácticamente como medio de recolección de contaminantes. Sin embargo, si un sólido es perforado por una red de finos poros el área de su superficie total, que comprende las superficies interiores de los poros, podrá aumentar a tal punto que su capacidad para la recolección de gas se vuelva significativa. Un sólido de esta clase es el carbón activado que puede tener varios miles de metros cuadrados de superficie por kilogramo. El carbón activado se hace a partir de elementos naturales que contienen carbono, preferentemente duros, tales como las cáscaras de coco o huesos de durazno, carbonizándolos y haciéndolos reaccionar con vapor a temperaturas muy altas. El material resultante es capaz de retener aproximadamente, en muchas aplicaciones de purificación de aire, el 10% de su peso de materia adsorbida.

### 1.5.2 Control por Conversión

La conversión más importante, con mucho, de los contaminantes es la oxidación en el aire. La oxidación se aplica las más de las veces a los gases y vapores contaminantes orgánicos, y rara vez a la materia en partículas. Cuando las sustancias orgánicas, que sólo contienen carbono, hidrógeno y oxígeno se oxidan por completo, los únicos productos son bióxido de carbono y agua, inofensivos ambos. Sin embargo, el proceso es a menudo muy costoso, porque se necesita utilizar una cantidad de energía considerable para mantener la totalidad de la corriente de gas suficientemente caliente (aproximadamente a 700 °C) para que tenga lugar la oxidación completa. Si el contaminante está suficientemente concentrado, su propio valor de combustible podrá proporcionar a caso una gran parte de esta energía. Además, la temperatura necesaria para la combustión podrá reducirse utilizando un catalizador.

Hay cierto número de conversiones químicas de contaminantes posibles, aparte de la combustión en el aire. Estas comprenden la neutralización química de un ácido o una base y la oxidación de contaminantes por agentes distintos del aire.

## 1.6 La Importancia de la Modelación de la Calidad del Aire

Una de las tendencias a nivel internacional en la definición de legislaciones para el control, el mejoramiento y la conservación de la calidad del aire, es la utilización de los resultados obtenidos por los modelos de dispersión de contaminantes como herramienta para la realización de estudios de impacto ambiental y para la definición de criterios para la aplicación de las leyes y normas establecidas. El proceso de modelación de la calidad del aire consiste, a grandes rasgos, en la determinación de la distribución de las concentraciones de sustancias contaminantes en los alrededores de las fuentes emisoras, a partir de la información relativa a las tasas de emisión, las características de las fuentes, la meteorología de la zona y las características del terreno.

En los Estados Unidos, las normas establecidas para el control de la calidad del aire, junto con la existencia de un mercado libre típicamente orientado a las actividades de consultoría técnica, han creado las condiciones adecuadas para el desarrollo de una variedad de técnicas prácticas para estos fines, aunque con diferentes niveles de sofisticación. Las técnicas y modelos desarrollados en los Estados Unidos se han usado sistemáticamente como una herramienta en la toma de decisiones por: la SIP (State Implementation Plans), la PSD (Prevention of Significant Deterioration) y como una guía para la EPA (Environmental Protection Agency).

Los estudios de modelación de la calidad del aire son importantes porque: 1) pueden contribuir a la definición de leyes y normas para el control de emisiones, determinando las tasas máximas de emisión permitidas que cumplen con las normas definidas para la calidad del aire; 2) pueden servir para evaluar las estrategias y técnicas propuestas para el control de emisiones; 3) pueden utilizarse para la selección de sitios adecuados para la instalación de futuras fuentes de contaminantes, de tal manera que su impacto ambiental sea el menor posible; 4) pueden ayudar a la definición de planes de contingencia y de estrategias de intervención inmediata para evitar episodios de contaminación atmosférica severa en alguna localidad específica; 5) pueden proporcionar información para deslindar responsabilidades en cuanto a los niveles de contaminación ya existentes; etc (Zanetti, 1990).

Sin embargo, el papel de la modelación de la calidad del aire no debe ser sobrestimado. Los estudios de modelación de la calidad del aire, los mismo que las campañas experimentales de monitoreo atmosférico, no representan la solución al problema de la contaminación del aire, ya que éste es un problema bastante complejo en el que, además, se encuentran involucrados intereses políticos, económicos, sociales y culturales. Los estudios de modelación y monitoreo sólo contribuyen a la solución de este problema proporcionando información para la instrumentación y la evaluación de las posibles estrategias de control y abatimiento de las emisiones contaminantes (Salcedo & Saldaña, 1993).

## 1.7 La Metodología de la Modelación de la Calidad del Aire

Desde el punto de vista técnico, los diferentes métodos de modelación matemática y de simulación computacional pueden aplicarse a todos los aspectos de la problemática de la contaminación atmosférica: ya sea para estimar y evaluar las tasas de emisión, para describir los diferentes procesos físicos y químicos involucrados en los fenómenos de transporte, dispersión y transformación química de los contaminantes en la atmósfera, o bien para cuantificar los efectos perjudiciales de los contaminantes en alguna región específica (Zanetti, 1990). Sin embargo, la consideración de esta problemática en su totalidad y en conjunto no puede ser tarea de un solo hombre o grupo de investigación; para ello se requiere de la participación de un gran número de expertos en diferentes disciplinas, colaborando estrechamente y de manera organizada. Y aún así, cada uno de los diferentes aspectos de la contaminación atmosférica constituye por sí solo un problema complejo y de grandes dimensiones.

En el caso de fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera, sin la consideración de la química atmosférica y las reacciones fotoquímicas que tienen lugar durante estos procesos, el problema es todavía bastante complicado, ya que involucra múltiples aspectos térmicos y mecánicos no-lineales y fuera de equilibrio. La representación matemática correcta de estos fenómenos y sus múltiples interacciones (aire-agua-tierra) requiere de un número grande de ecuaciones diferenciales parciales, no-lineales y acopladas, cuya solución analítica no es posible con las matemáticas disponibles actualmente, y cuya solución numérica detallada tampoco es posible con los métodos numéricos ordinarios, aún con los poderosos equipos de supercómputo que existen hoy en día. El análisis de las escalas de longitud involucradas en el flujo turbulento atmosférico muestra que la mayoría de las situaciones típicas de la capa límite planetaria están asociadas con escalas de longitud que van desde 300 m hasta 1 mm. Debido a ello, la malla requerida para el cálculo numérico en el caso de un problema típico de dispersión de contaminantes que involucra una región de 10 km  $\times$  10 km, debería contener del orden de  $10^{20}$  nodos para resolver todas las fluctuaciones (Zanetti, 1990). Además, la solución numérica de este problema requiere de la especificación de condiciones iniciales y de frontera un tanto complejas. Debido a esto, naturalmente, un enfoque honesto y limpio de este problema resulta francamente imposible, al menos en términos de las herramientas matemáticas y numéricas actuales y de los equipos de cómputo disponibles en estos días.

Para superar estas dificultades, se han desarrollado una gran cantidad de técnicas prácticas en las que se hace uso de datos experimentales que se obtienen mediante campañas meteorológicas, de monitoreo de la calidad del aire, y de emisiones e intrusiones en los sitios de interés y sus alrededores. Esta información experimental se utiliza, en parte, para la elaboración de modelos en los que las ecuaciones, o partes de las ecuaciones que gobiernan el comportamiento



del fenómeno son sustituidas por expresiones empíricas o semi-empíricas a fin de obtener un problema más simple y fácil de resolver numéricamente. Todos los modelos de este tipo deben someterse a un proceso de calibración antes de ser utilizados para los estudios de la contaminación atmosférica y su impacto sobre el medio ambiente. Estos modelos, además, requieren de la especificación de un número de parámetros característicos de las fuentes de contaminación, de la micrometeorología del lugar en el que se ubican estas fuentes, y de la complejidad del terreno en sus alrededores. Los modelos producen como salida estimaciones de las concentraciones de contaminantes en el ambiente, para ciertos tiempos de promediación y ciertos puntos específicos de los alrededores conocidos como receptores. Estos resultados pueden ser utilizados para analizar los impactos y efectos de los contaminantes sobre los sitios receptores, los cuales pueden distribuirse geográficamente en áreas pequeñas (escala local), con alcances horizontales que van de 1 a 20 km; a escala regional, de 20 a 1000 km; a escala nacional, de 1000 km a la totalidad de un país; y por último, a escala global, que va desde escala hemisférica en adelante.

Los parámetros de entrada para un modelo se determinan de manera experimental, y el número de ellos depende de su grado de sofisticación. Los modelos sencillos requieren pocos datos experimentales, pero sólo son útiles para estudios preliminares, ya que no incluyen muchos de los efectos importantes del fenómeno en cuestión; los modelos más complejos requieren un número mayor de datos experimentales, pero a cambio sus resultados también son, en principio, más precisos en la representación de la realidad física.

Cabe resaltar, sin embargo, que la mayor complejidad de un modelo no garantiza, necesariamente, mejores predicciones. Los modelos más complejos requieren un número mayor de parámetros de entrada y, consecuentemente, también son alimentados con un número mayor de fuentes de error. Además, aunque los modelos complejos pueden calibrarse más fácilmente ajustándose a los datos experimentales, esto no garantiza que sus predicciones sean mejores que las de los modelos más simples cuando son aplicados sobre la base de un conjunto de datos experimentales diferente del que se utilizó para su calibración (Zanetti, 1990).

En la práctica, los estudios de modelación de la calidad del aire deben desarrollarse con base en una metodología mínima que incluye una caracterización del problema, un análisis para la selección del modelo adecuado, la calibración del modelo y la evaluación de los efectos de las incertidumbres sobre sus resultados, y la interpretación de estos resultados en términos de los fines deseados (Seigneur, 1992).

La caracterización del problema requiere una identificación de las necesidades, la especificación de los tipos de contaminantes involucrados, la definición de las escalas temporal y espacial del problema, la determinación del tipo de dominio, la complejidad del terreno, los números de fuentes, sus tipos y sus características principales, la disponibilidad de información meteorológica y micrometeorológica,

y la disponibilidad de recursos de cómputo. Una vez caracterizado el problema, el proceso de selección del modelo adecuado se realiza con la información obtenida y en base a un conocimiento amplio de las características de los diferentes modelos disponibles, de su dinámica, de la información que requieren y de los resultados que proporcionan (Salcedo & Saldaña, 1993). El modelo seleccionado, por otra parte, debe ser calibrado y evaluado con datos locales de monitoreo de la calidad del aire, a fin de determinar sus límites de aplicabilidad y minimizar los errores en los resultados de las predicciones. Solamente los modelos que han sido calibrados y evaluados con la información histórica adecuada pueden ser usados con fines de predicción. Esto es un punto sobre el cual debe tenerse mucho cuidado, pues la calibración y evaluación de un modelo puede resultar un tanto difícil cuando no se tienen datos suficientes sobre la meteorología y la calidad del aire, y en tal caso se corre el peligro de llegar a utilizar un modelo rebasando sus límites de aplicabilidad, tanto teóricos como prácticos.

## 1.8 Tipos de Modelos de la Calidad del Aire

Existe una variedad muy amplia de modelos con los que es posible realizar estudios de la calidad del aire, incluyendo desde modelos empíricos simples hasta modelos numéricos altamente complejos que toman en cuenta las transformaciones químicas que sufren los contaminantes en la atmósfera.

**Modelos empíricos.** Los modelos empíricos están basados en el análisis de datos sobre la calidad del aire, las emisiones de las fuentes y la meteorología de la zona de interés. Cuando se cuenta con una base de datos históricos de buena calidad, los modelos empíricos permiten correlacionar de manera adecuada la información disponible sobre las emisiones y la meteorología con la calidad del aire y los niveles de inmisión en las zonas para las cuales es aplicable tal información. De esta manera, los modelos empíricos permiten representar de manera sencilla la complejidad del sistema atmosférico, aún cuando no proporcionan una explicación detallada de los procesos que tiene lugar durante el transporte y la dispersión de los contaminantes. Estos modelos, sin embargo, dependen fuertemente de la calidad de los datos y se encuentran estrechamente ligados a las condiciones específicas bajo las cuales fueron creados. Debido a ello, cuando son aplicados a otras situaciones meteorológicas en la misma localidad, los modelos pueden conducir a conclusiones incorrectas, aunque una selección cuidadosa de los datos y una interpretación precavida de los resultados pueden contrarrestar algunas de las desventajas. Finalmente, los modelos empíricos pueden generalmente formularse y operarse a bajo costo.

**Modelos numéricos.** Los modelos numéricos están formulados a partir de las ecuaciones físicas y químicas que gobiernan los procesos de transporte, dispersión y transformación química de los contaminantes en la atmósfera. Debido a ello,

estas formulaciones proporcionan confianza en sus aplicaciones sobre varios rangos de condiciones y áreas, tanto como en su habilidad predictiva. La mayoría de estos modelos, sin embargo, tampoco enfrentan el problema de la solución de las ecuaciones de la dinámica del fenómeno de una manera "honesto y limpio"; muchos de los términos no-lineales de estas ecuaciones son sustituidos por otros más simples, o por relaciones determinadas experimentalmente. Estos modelos, además, son bastante complejos desde el punto de vista computacional, y requieren de la especificación de numerosos parámetros y datos de entrada.

**Modelos semiempíricos.** Los modelos semiempíricos se consideran frecuentemente como una categoría intermedia de los modelos de calidad del aire. Los modelos semiempíricos comparten ventajas y desventajas de los modelos empíricos y numéricos. Los modelos gaussianos, la mayoría muy usados en la actualidad, son semiempíricos. Estos modelos se derivan de principios físicos (por ejemplo, la conservación de masa), pero cuentan con parámetros definidos empíricamente (por ejemplo, las razones de dispersión).

En términos generales, los modelos de calidad del aire son clasificados como modelos simples y modelos refinados de acuerdo con su nivel de sofisticación en el sentido de cuántos y cuáles de los procesos importantes están representados en ellos de alguna manera.

- . Modelos simples. Son técnicas de estimación, relativamente simples, que proporcionan un cálculo conservador del impacto de la calidad del aire. Pueden, en muchas ocasiones, sin más consideraciones que los datos de las fuentes y algunos parámetros meteorológicos, determinar los puntos de máxima concentración de los contaminantes en los alrededores de los puntos de emisión. Estos modelos son utilizados para realizar estudios preliminares de la calidad del aire.
- . Modelos refinados. Proporcionan un tratamiento más elaborado de los procesos físicos y químicos, requiriendo datos de entrada precisos. Tienen un alto costo computacional pero proporcionan (al menos teóricamente) un cálculo más detallado de las distribuciones de las concentraciones de contaminantes en los alrededores de las fuentes, involucrando efectos importantes debidos a la turbulencia atmosférica y a las transformaciones de los contaminantes en la atmósfera. Los modelos refinados proporcionan resultados que pueden ser utilizados en los estudios de impacto ambiental y el desarrollo de estrategias de control.

Con estos antecedentes pasaremos a continuación a discutir el problema central que se desarrolla en esta tesis.

---

## DEFINICIÓN DEL PROBLEMA

---

Como ya mencionamos en el capítulo anterior, la modelación de la calidad del aire es un proceso mediante el cual se determinan las distribuciones espaciales de las concentraciones de los contaminantes en los alrededores de las fuentes emisoras, partiendo de información relativa a las tasas de emisión, las características geométricas y físicas (mecánicas y termodinámicas) de las fuentes, la meteorología de la zona de influencia de las fuentes y la complejidad del terreno en dicha zona. Para llevar a cabo este proceso se requiere contar con un modelo (o colección de modelos) que represente adecuadamente, desde el punto de vista físico, los diferentes fenómenos atmosféricos involucrados en el transporte, la dispersión, la transformación química y la remoción de los contaminantes vertidos a la atmósfera por las fuentes emisoras.

Este es un problema bastante complejo, pues la descripción de los procesos de transporte y dispersión de los contaminantes atmosféricos cae dentro del ámbito de la teoría de la turbulencia, que es la rama menos comprendida de la mecánica de fluidos. El estudio de estos dos procesos, es decir, sin la consideración de los efectos de eliminación física y de transformación química y fotoquímica de los contaminantes en la atmósfera, requiere de la solución de las ecuaciones de balance de masa, momento y energía de la dinámica de fluidos viscosos, las cuales constituyen un sistema de ecuaciones diferenciales parciales, no-lineales y acopladas para los campos hidrodinámicos medios y turbulentos, bajo condiciones iniciales y de frontera que, en general, no sólo son bastante difíciles de manejar, sino incluso de especificar correctamente. Las técnicas numéricas para la solución de estos sistemas de ecuaciones son muy complicadas, ya que implican la utilización de mallas muy grandes con pasos espaciales y temporales muy finos e, incluso, variables. De hecho, como ya mencionamos en el capítulo anterior, para la solución de todas las fluctuaciones importantes en un problema típico de turbulencia atmosférica, donde se encuentran involucradas escalas de longitud que van desde milímetros hasta cientos de metros, se requiere una malla que contiene un número de nodos extraordinariamente grande (del orden de  $10^{20}$  nodos, para un problema que involucra una región espacial que se extiende, horizontalmente, sobre un área de  $10 \text{ km} \times 10 \text{ km}$  y, verticalmente, hasta alturas del orden de  $1000 \text{ m}$ ), (Zanetti, 1990).

Para complicar más la situación, cabe mencionar también el clásico problema de los esquemas de cerradura de la teoría de la turbulencia. Como se sabe, el número de variables desconocidas que se encuentran presentes en las ecuaciones que describen el flujo turbulento es mayor que el número de ecuaciones. Una variable se considera desconocida si no se cuenta con una ecuación de diagnóstico o de pronóstico que la defina completamente. Cuando se incluyen ecuaciones para las variables desconocidas (cambiándolas a variables conocidas), se encuentran otras nuevas variables desconocidas. De esta manera, para cualquier conjunto finito de tales ecuaciones, la descripción de la turbulencia no es cerrada, es decir, la descripción estadística total de la turbulencia requiere de un conjunto infinito de ecuaciones. Esta conclusión desafortunada se conoce como el *problema de cerradura* de la turbulencia. Este problema, el cual fue principalmente reconocido por Keller y Friedmann (Keller y Friedman, 1924) en 1924, y asociado con las características no-lineales de la turbulencia, se ha mantenido como uno de los problemas no resueltos de la física clásica (Stull, 1988). Para obtener una descripción matemático-estadística de la turbulencia, se utiliza frecuentemente un método que consiste en considerar solamente un subconjunto finito de las ecuaciones, suponiendo relaciones donde las variables desconocidas son parametrizadas como funciones de las variables conocidas y algunos parámetros que, por lo general, se determinan posteriormente de manera experimental. Estas relaciones se conocen como *hipótesis de cerradura*. El problema de las hipótesis de cerradura radica fundamentalmente en que, por definición, toda parametrización representa una aproximación que se introduce de principio en la descripción del fenómeno. Pero eso no es lo más grave; el problema mayor surge por el hecho de que, en general, no se cuenta con bases físicas suficientemente sólidas para la introducción de una u otra relación de cerradura (Stull, 1988). De hecho, tal como lo señaló Donaldson (Donaldson, 1973) para los modelos de turbulencia de segundo orden, "existe un número de esquemas de cerradura para las ecuaciones de movimiento que es mucho mayor que el número de los investigadores principales que se encuentran trabajando en el problema".

Debido a la gran complejidad del problema de la descripción detallada de los procesos de transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera, se han desarrollado en el mundo, principalmente en los Estados Unidos, una gran cantidad de técnicas y modelos que de una u otra manera buscan superar las dificultades antes señaladas. Más aún, en la actualidad muchos investigadores están dedicando sus esfuerzos al estudio de estos fenómenos utilizando diferentes enfoques y técnicas de modelación, simulación y experimentación, tratando de encontrar una descripción adecuada, pero suficientemente sencilla, de la turbulencia atmosférica, de tal manera que el problema se vuelva numéricamente tratable con bajos costos y pocas limitaciones computacionales.

No obstante, muchos de estos modelos, y sobre todo los que se utilizan actualmente para la regulación y control de la calidad del aire en México y en

otros países, se basan en una gran cantidad de hipótesis que sobresimplifican los diferentes procesos dinámicos, térmicos y químicos que ocurren en la atmósfera durante los fenómenos del transporte y la dispersión de los contaminantes. Así, por ejemplo, en muchos casos se describe la elevación de una pluma usando algunas fórmulas empíricas o semiempíricas como las de Briggs (Zanetti, 1990), cuyos fundamentos físicos no son del todo claros; para la dispersión horizontal y vertical de la pluma se consideran modelos Gaussianos que describen este proceso de una manera completamente desacoplada de la dinámica de la elevación y del transporte a lo largo de la dirección del viento; y los efectos de la complejidad del terreno y de otros obstáculos fijos son introducidos de manera muy forzada y, en ocasiones, un tanto simplista. Debido a ello, la utilización de estos modelos para los estudios de la calidad del aire sólo es recomendada cuando se han llevado a cabo previamente algunos procesos cuidadosos de calibración y validación de los mismos, utilizando información histórica y de buena calidad acerca de la meteorología de las zonas de interés. Y aún así, los resultados proporcionados por estos modelos siempre deben ser utilizados con precaución y procurando nunca rebasar sus límites de aplicabilidad.

En los últimos años, por otra parte se han venido desarrollando nuevas estrategias de simulación para el comportamiento de fluidos, en las que el problema de la obtención de soluciones se enfrenta de una manera radicalmente diferente de las tradicionales técnicas numéricas para la solución de ecuaciones diferenciales. Una de estas estrategias se basa en las técnicas de autómatas celulares introducidas por von Neumann y Ulam (von Neumann, 1966) en los años cincuenta. Usando estas técnicas, se han desarrollado modelos dinámicos, completamente discretos, para el movimiento microscópico de las moléculas de un gas, de tal forma que las ecuaciones de balance de la mecánica de fluidos son recuperadas en el límite macroscópico (Frisch et al, 1986; d'Humieres et al, 1986). Esta clase de sistemas dinámicos, los cuales se conocen como modelos de gases en redes, consisten de una red regular cuyos sitios pueden tener un número entero y finito de estados que representan las direcciones de movimiento de las partículas del gas, y evolucionan en pasos temporales discretos de acuerdo con un conjunto de reglas locales y homogéneas que definen la dinámica del sistema. Estas reglas son definidas de manera que queda garantizada, desde el inicio, la satisfacción de los principios físicos fundamentales de la conservación de la masa, el momento y la energía durante la propagación y las colisiones de las partículas en el modelo.

El más simple de los modelos de gases en redes, con la capacidad de reproducir el comportamiento colectivo que predicen las ecuaciones de Navier-Stokes, fue introducido por Frisch, Hasslacher y Pomeau (Chen et al, 1989). En este modelo, conocido en la literatura como el modelo HPP, todas las partículas tienen masa unitaria y se mueven con la misma rapidez, saltando de un sitio a otro sobre una red hexagonal en dos dimensiones. La dinámica de este sistema involucra un conjunto de reglas de colisión que satisfacen la conservación del número

de partículas y del momento lineal. La conservación de la energía cinética, en este modelo, se satisface trivialmente en virtud de la conservación del número de partículas, y debido a ello, esta ley no juega, aquí, un papel dinámico independiente. En la actualidad, el modelo HPP es considerado como una forma eficiente para la simulación de flujos viscosos en situaciones que involucran fronteras sólidas complejas. Sin embargo, este modelo no tiene la posibilidad de representar efectos térmicos o de difusión debido a que todas sus partículas se mueven con una misma rapidez y son de una sola especie (Chen et al. 1989). Tal vez, el más simple de los modelos de gases en redes que cuenta con propiedades térmicas es el modelo de nueve velocidades, definido sobre una retícula cuadrada bidimensional donde las partículas pueden encontrarse en reposo o moviéndose hacia los sitios vecinos, primeros o segundos (Chen et al, 1989; Salcido & Rechtman, 1991).

En este trabajo de tesis, utilizando una extensión del modelo de nueve velocidades (Salcido & Rechtman, 1991) para representar un gas formado por una mezcla binaria de especies no reactivas, se propone una nueva estrategia para la simulación de los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera. El modelo que se propone está definido sobre una retícula cuadrada bidimensional y contiene partículas que pueden interactuar unas con otras hasta segundos vecinos a través de reglas de colisión dispersivas, las cuales satisfacen los principios de conservación de los números de partículas de las dos especies, el momento lineal y la energía. En este modelo se han incluido efectos del tipo gravitacional, tales como las fuerzas de flotación, así como interacciones de las partículas con fronteras sólidas de geometrías complicadas. Las pruebas que hemos realizado, simulando los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes atmosféricos, muestran que el comportamiento del modelo es, al menos cualitativamente, razonable (Salcido, 1993). En el capítulo 7 se presentan los resultados de las simulaciones realizadas para los procesos de elevación y dispersión de una pluma de gases contaminantes. Ahí puede observarse, por ejemplo, que la distribución de contaminantes en la pluma evoluciona hacia un perfil Gaussiano y que el efecto de *downwash* (ver apéndice) se presenta de manera natural en el comportamiento del modelo. No obstante, cabe mencionar que el modelo que hemos desarrollado se encuentra actualmente en una etapa de evaluación, de la cual, esperamos, se obtendrán resultados cuantitativos que podrán utilizarse posteriormente para la calibración y validación del modelo.

En resumen: en el presente trabajo de tesis se presenta un modelo de gases en redes para la simulación de los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes atmosféricos. La descripción del modelo y la presentación de los primeros resultados obtenidos con las simulaciones de prueba del mismo, constituyen el material nuevo que se incluye en este trabajo de tesis. Este material representa, fundamentalmente, nuestra contribución al estudio de los problemas de la contaminación atmosférica; con ello, en nuestra opinión, se está abriendo un camino nuevo hacia la comprensión de los fenómenos del transporte y la dispersión de

los contaminantes en la atmósfera, utilizando una metodología relativamente más sencilla, más transparente y con mayor contenido físico.



---

## ASPECTOS METEREOLÓGICOS

---

La variables meteorológicas son de los factores más importantes para el transporte y la dispersión de contaminantes en la atmósfera. Los diferentes movimientos de las masas de aire atmosférico arrastran y dispersan a los contaminantes, tanto gaseosos como en la forma de partículas, que son vertidos a la atmósfera por las múltiples fuentes de producción y emisión. Estos procesos de transporte y dispersión son, en general, bastante difíciles de describir, ya que el aire atmosférico sufre movimientos muy complejos que, incluso, la mayoría de las veces parecen caóticos. La meteorología es la ciencia que proporciona leyes de la dinámica atmosférica. Algunas de esas leyes se obtienen de áreas teóricas de la física como son la termodinámica y la mecánica de fluidos, fundamentalmente, pero otras tantas se obtienen también de manera fenomenológica debido a que el problema matemático del planteamiento y la solución de las ecuaciones físicas para el comportamiento atmosférico es sumamente complicado.

### 3.1 La Capa Límite Planetaria

Múltiples interacciones y procesos (no todos bien definidos ni bien comprendidos) determinan la complejidad de los fenómenos atmosféricos. La superficie de la Tierra, por ejemplo, tanto la parte continental como la marítima, constituye una frontera para la atmósfera que influye fuertemente sobre su comportamiento. Los procesos de transporte de masa, momento y energía modifican las condiciones atmosféricas desde los 100 m y hasta 3000 m de altura, aproximadamente, creando lo que se conoce como la *capa límite planetaria* (en inglés: *Planetary Boundary Layer*, o PBL). El resto del aire en la tropósfera se conoce como la *atmósfera libre*.

En realidad, la tropósfera se extiende por arriba de la superficie terrestre hasta una altura aproximada de 11 km, pero ocurre que los efectos de la interacción de la atmósfera con la superficie terrestre sólo se extienden a los primeros dos o tres kilómetros. Por ello la capa límite planetaria (o PBL) se define como *la parte de la tropósfera que es directamente influenciada por la superficie terrestre y que reacciona ante las acciones forzantes de superficie en una escala de tiempo de una hora ó menos*. Tales acciones forzantes se refieren a las fuerzas de rozamiento, la evaporación, la transferencia de calor, las emisiones contaminantes, y los efectos sobre el viento debidos a la orografía del terreno.

Una prueba de la extensión limitada de los efectos de las acciones superfi-

ciales sobre el comportamiento de la atmósfera la encontramos en los perfiles de la distribución de temperaturas en la parte más baja de la tropósfera, de los cuales se presenta un ejemplo en la figura 3.1.(Stull, 1989) :

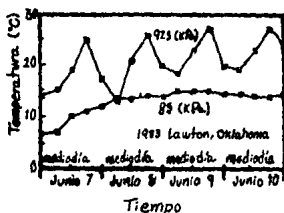


Fig. 3.1. Evolución de la temperatura medida cerca del piso y a una altura de 1100 m por arriba del mismo.

En esta figura se observa una variación diurna de temperatura cerca del piso, misma que no es evidente a grandes alturas. Dicha variación es una de las características importantes de la capa límite sobre la parte continental de la superficie terrestre.

Esta variación diurna de la temperatura no es causada directamente por la radiación solar que incide sobre la capa límite. De hecho, solamente una pequeña parte de esta radiación es absorbida por ella, el resto es transmitido al piso, el cual, al contar con un coeficiente de absorción del 90%, absorbe la mayor parte de la energía solar incidente. El piso es lo que se calienta o enfría como resultado de la radiación solar, y éste a su vez produce los cambios en la capa límite a través de los procesos de transporte. Como veremos, uno de los procesos de transporte más importantes en la capa límite planetaria es la *turbulencia*, la cual, de hecho, ocasionalmente se utiliza como un criterio para la definición de la PBL. La atmósfera libre muestra pequeñas variaciones diurnas.

### 3.2 Los Movimientos Atmosféricos

El viento, o corriente de aire, puede considerarse como una superposición de tres tipos de movimientos atmosféricos: viento medio, turbulencia, y ondas (ver figura 3.2 (Stull, 1989) ). Así, para la descripción de los fenómenos de transporte en la atmósfera, cada uno de las variables de campo involucradas, tales como la ve-

locidad y la temperatura, se considera como la superposición de dos términos: un campo medio y un campo perturbativo. El campo medio representa el efecto resultante de la promediación del campo físico sobre el ensamble de sus posibilidades, mientras que el campo perturbativo representa las desviaciones del campo físico real respecto al campo medio. En este sentido, el viento medio es un ejemplo de un campo medio, en tanto que la turbulencia y las ondas atmosféricas son ejemplos de campos perturbativos que, en este caso, se superponen al viento medio.

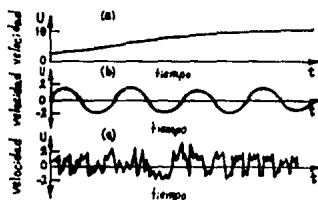


Fig. 3.2. Idealización por separado (a) del viento medio (b) de ondas (c) de la turbulencia. En realidad tanto las ondas como la turbulencia están superpuestas en el viento medio.

Cada uno de estos movimientos atmosféricos puede existir en la PBL, ya sea por separado o en presencia de los otros. El transporte de humedad, calor, momento y contaminantes ocurre horizontalmente debido al viento medio, y verticalmente, debido a la turbulencia (Stull, 1989).

La *advección*, o transporte horizontal muy rápido, se debe al viento medio, el cual puede tener velocidades que van de 2 a 10 m/s en la PBL, siendo más lento cerca del piso debido a la fricción. El viento medio vertical ocurre con velocidades muy pequeñas, que van generalmente de mm/s a cm/s. La variación de la velocidad del viento medio con la altura sobre la superficie terrestre se describe frecuentemente por la relación

$$U(z) = U_0 \left( \frac{z}{z_0} \right)^r,$$

donde  $z_0$  es un nivel arbitrario y  $U_0$  es la velocidad del viento que se mide experimentalmente en  $z_0$ . Un valor típico de  $r$  para un terreno plano es  $\frac{1}{2}$ , mientras que para un terreno irregular  $r$  puede tener un valor de más del doble (Zanetti, 1990).

El movimiento atmosférico en forma de *ondas* se observa con frecuencia durante la noche en la PBL. Estas ondas transportan pequeñas cantidades de calor,

humedad y contaminantes, pero son muy efectivas para el transporte de energía y momento. Este tipo de movimiento se genera localmente por los esfuerzos cortantes del viento medio y por el flujo de éste sobre obstáculos. Las ondas atmosféricas también pueden generarse debido a otras fuentes como tormentas y explosiones.

La gran frecuencia con la que ocurre la turbulencia cerca del piso es una de las características que distinguen a la PBL del resto de la atmósfera. Fuera de la capa límite, la turbulencia se encuentra principalmente en las nubes convectivas y cerca de la corriente de chorro (*jet stream*), aunque algunas veces las ondas atmosféricas pueden amplificar los esfuerzos cortantes del viento en regiones muy localizadas, y dar lugar a la formación de turbulencia.

La turbulencia puede considerarse como una gran colección de rizos de movimiento irregulares llamados *eddies* o vórtices. En la turbulencia existen muchos de estos vórtices, de diferentes tamaños y superpuestos unos sobre los otros. Las intensidades relativas de estos vórtices de escalas diferentes definen el *espectro de la turbulencia*.

La mayor parte de la turbulencia en la capa límite planetaria se genera debido a las acciones forzantes que el piso ejerce sobre el aire. Por ejemplo, el calentamiento solar del piso durante los días soleados produce corrientes ascendentes de aire caliente, las cuales son, en realidad, partes de vórtices muy grandes. La fricción del aire que fluye sobre el piso provoca vientos cortantes, los cuales frecuentemente se vuelven turbulentos. Los obstáculos como los árboles y edificios desvían las corrientes de aire produciendo estelas turbulentas detrás del obstáculo, es decir, a sotavento, y adyacentes al mismo.

Los vórtices más grandes en la PBL tienen tamaños del orden de la profundidad de ésta, es decir de 100 a 3000 m de diámetro. Estos vórtices son los más intensos producidos por las forzantes anteriormente mencionadas. También existen vórtices de tamaños menores, los cuales se alimentan energéticamente de los más grandes. Los vórtices más pequeños tienen tamaños de unos cuantos milímetros de diámetro y son muy débiles porque se disipan fácilmente por los efectos de la viscosidad molecular.

En cuanto a la capacidad de transporte, la turbulencia es, por muchos órdenes de magnitud, más efectiva que la difusión molecular. De hecho, es la turbulencia la que permite que la PBL responda a los cambios producidos por las acciones forzantes de la superficie terrestre: mientras que la falta de turbulencia por arriba de la capa límite hace que la atmósfera libre no sienta los efectos de tales las acciones.

Sobre los océanos, la profundidad de la PBL varía relativamente despacio en el espacio y en el tiempo. La temperatura sobre la superficie del mar cambia muy poco en un ciclo diurno debido al intenso mezclado que ocurre en el interior del océano cerca de la superficie. También recordemos que el agua tiene una gran capacidad calorífica, por lo que puede absorber grandes cantidades de calor del

Sol obteniendo cambios de temperatura relativamente pequeños. De esta manera, una temperatura sobre la superficie del mar que varía muy lentamente también da lugar a acciones forzantes que varían lentamente en la parte más baja de la capa límite planetaria. La mayoría de los cambios de la profundidad de la PBL sobre los océanos se deben a los movimientos de las masas de aire sobre la superficie del mar (Stull, 1980).

### 3.3 La Estructura de la PBL

En las regiones de alta presión sobre la superficie continental, la PBL tiene una estructura bien definida que evoluciona con el ciclo diurno (ver figura, 3.3 (Stull, 1989)) y cuyos componentes principales, aunque no las únicas, son la capa de mezcla, la capa residual, y la capa límite estable.

La *capa superficial* es la región de la parte más baja de la atmósfera donde los esfuerzos y los flujos turbulentos varían por menos del 10% de su magnitud. Esta capa llega a ser parte de la capa de mezcla o de la capa límite estable. También existe una capa muy delgada, de unos cuantos centímetros, en la parte más baja de la atmósfera, la cual se caracteriza por el dominio del transporte molecular sobre el turbulento. Esta pequeña región se conoce como la *capa interfacial* o *microcapa*.

En la capa de mezcla, también llamada capa límite convectiva, se encuentra contenida prácticamente toda la turbulencia atmosférica, la cual es generada por convección. Las fuentes que la originan son el calor transferido desde la superficie terrestre caliente y la radiación refrigerante de la parte alta de las nubes. La primera situación provoca una corriente de aire caliente ascendente y la segunda una de aire frío descendente. Este es el mecanismo dominante para la generación de la turbulencia, pero los esfuerzos cortantes del viento que cruza la parte alta de esta capa también la generan. El efecto de la turbulencia en esta parte de la PBL es el mezclado de la energía térmica, la humedad y la cantidad de movimiento de manera uniforme en la dirección vertical.

En la parte alta de la capa de mezcla existe una pequeña capa estable que actúa como una tapa para las corrientes ascendentes de aire caliente y que restringe el dominio de la turbulencia. Esta región se conoce como la *zona de entrainment* (ver apéndice).

A veces esta zona que tiene la capa estable es caracterizada por una inversión de la temperatura; esto es, la temperatura aumenta con la altura, y por ello se le llama también capa de inversión. El espesor de la capa de mezcla se denota por  $Z_i$ , y representa la altura promedio de la capa de inversión.

Las fuentes emisoras de contaminantes se encuentran generalmente cerca de la superficie de la tierra, y estos se acumulan dentro de la capa de mezcla debido

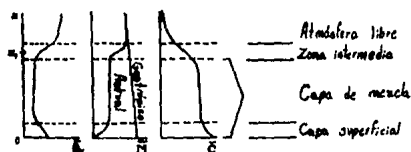


Fig. 3.3. Perfil típico diurno de la temperatura potencial media  $\bar{\theta}_v$ , velocidad del viento  $\bar{M}$ , y concentración de contaminantes  $\bar{c}$ .

a que la capa estable no les permite dispersarse fuera de esta capa.

Media hora después de la puesta del sol, el flujo ascendente de aire caliente se detiene, permitiendo de esta forma que decaiga la turbulencia, que es cercanamente igual en intensidad hacia todas las direcciones. La región donde esto sucede se llama *capa residual*. Un resultado interesante es que el humo de las plumas que se dispersan en el interior de esta capa, lo hace en una tasa igual a nivel vertical como lateral, creando una pluma de forma cónica. Esta capa dura hasta la mañana siguiente, momento en el cual se genera la nueva capa de mezcla.

Variables como la temperatura decrecen lentamente con la altura durante la noche. La tasa de enfriamiento es casi uniforme en la capa residual, hace que el perfil de temperatura se mantenga cercano al adiabático.

Conforme la noche progresa, la parte inferior de la capa residual se transforma debido a su contacto con el piso en la *capa límite estable*. Esta es caracterizada por estar el aire con una estabilidad estática y una turbulencia esporádica. Los contaminantes emitidos en el interior de esta capa se dispersan poco verticalmente. Y, al parecer, se dispersan mucho más rápido a nivel horizontal (Stull, 1980).

### 3.4 Estabilidad Vertical de la atmósfera

Efectuemos ahora un tratamiento más formal de lo que entendemos por variación adiabática de la temperatura. Como vimos anteriormente la distribución vertical de temperaturas en las partes bajas de la atmósfera se debe a los efectos de las corrientes de convección producidas por el contacto del aire con el suelo y a la disminución de la presión con la altura. Cuando una masa de aire seco

asciende verticalmente en el seno de la atmósfera alcanzando capas sometidas a presiones cada vez más débiles, se dilata hasta alcanzar la presión de equilibrio. Esta expansión se realiza a expensas de su energía interna sin cambiar calor por conducción o radiación con las capas de aire vecinas, es decir, se trata de una expansión adiabática que va acompañada de un enfriamiento. Por lo tanto para una atmósfera en equilibrio convectivo existirá una disminución vertical de la temperatura a partir de la superficie de la tierra que puede medirse por el índice  $\alpha = \delta T / \delta z$ , llamado coeficiente de enfriamiento adiabático del aire seco, y que representa la disminución  $\delta T$  de la temperatura correspondiente a una variación de altura  $\delta z$ . Veamos a continuación cómo podemos obtener  $\alpha$

Por ser una evolución adiabática, de acuerdo con la ecuación calorimétrica, resulta:

$$\delta Q = C_p \delta T + h \delta p = 0,$$

donde  $C_p$  es la capacidad calorífica a presión constante y  $h$  es la entalpía. Si admitimos que el aire se comporta como un gas perfecto,  $h = -V$ . De esta manera tenemos,

$$C_p \delta T = V \delta p.$$

Ahora bien, como en todo momento hay un equilibrio de presiones, el valor  $\delta p$  será equivalente a la variación de presión experimentada por el aire exterior, que para una columna de altura  $\delta z$  viene dada por la ecuación barométrica:

$$\delta p = -\rho g \delta z,$$

donde  $\rho$  es la densidad del aire ascendente, la que en primera aproximación podemos considerar igual a la del aire ascendente. Por lo tanto:

$$C_p \delta T = -V \rho g \delta z.$$

Tomando la unidad de masa ascendente, será  $\rho V = 1$  y por lo tanto

$$\alpha = -\frac{\delta T}{\delta z} = \frac{g}{C_p},$$

Substituyendo los valores  $g = 9.81 \text{ m/s}^2$  y  $C_p = 0.240 \text{ cal/g}^\circ\text{C}$  resulta:

$$\alpha = 9.8 \times 10^{-3} \text{ }^\circ\text{C/m},$$

equivalente a un gradiente de enfriamiento de  $9.8^\circ\text{C}$  por cada Km de altura (gradiente adiabático del aire seco).

Por último, hablaremos de las condiciones de estabilidad e inestabilidad vertical de la atmósfera.

Quando las condiciones atmosféricas no favorecen el desarrollo de corrientes verticales (ó de convección) en el aire, se dice que la atmósfera es "estable"; por el contrario, si tales corrientes tienen lugar libremente en la atmósfera las condiciones son de inestabilidad. El criterio de estabilidad e inestabilidad depende de que la disminución real de temperaturas en el aire con la altura,  $\alpha^* = \delta T / \delta z$ , sea mayor o menor que el gradiente adiabático del aire.

Supongamos que inicialmente hay equilibrio térmico, es decir, que la temperatura  $T_0$  de un elemento de masa de aire que comienza a ascender sea igual a la del aire exterior  $T_0'$ . En un punto 1, situado a una altura  $\delta z$ , la temperatura de la masa ascendente será  $T_1 = T_0 - \alpha^* \delta z$ , mientras que la temperatura del aire exterior será  $T_1' = T_0' - \alpha \delta z$ . Por tanto, existirá ahora una diferencia de temperaturas dada por la expresión:

$$T_1' - T_1 = (\alpha^* - \alpha) \delta z.$$

Si  $\alpha^* > \alpha$  y  $\delta z > 0$  (ascenso) resulta  $T_1' > T_1$ , es decir la masa de aire se encuentra a una temperatura inferior a la del ambiente y su densidad es mayor, tendiendo a regresar a su posición primitiva. Si  $\alpha^* > \alpha$  y  $\delta z < 0$  (descenso) resulta  $T_1' < T_1$ , es decir, se encuentra rodeada de aire a menor temperatura, o sea más denso, y por ello tiende a subir y recuperar la posición original. En cualquier sentido que se separe, el aire vuelve siempre al nivel de partida: *hay estabilidad vertical en la atmósfera.*

Por el contrario, si  $\alpha^* < \alpha$  y  $\delta z < 0$  (ascenso) resulta  $T_1' > T_1$ , es decir, la masa de aire se encuentra rodeada siempre de un aire más frío y más denso, y por consiguiente sigue ascendiendo con velocidad creciente, desarrollándose violentas corrientes verticales bajo condiciones inestables. Si  $\delta z < 0$  (descenso) resulta  $T_1' > T_1$ ; en este caso la masa se encuentra rodeada de aire más caliente y ligero y tiende a seguir descendiendo. Por lo tanto, si  $\alpha^* < \alpha$ , el aire separado de su nivel en cualquier sentido tiende a separarse cada vez más: *hay inestabilidad vertical en la atmósfera.* Las corrientes verticales de aire en una atmósfera inestable transportan el calor de las capas en contacto con el suelo a las capas superiores, y esto da lugar a corrientes de aire frío descendente que se comprimen adiabáticamente aumentando de temperatura. Si este proceso de mezcla convectiva persiste durante algún tiempo se alcanzan condiciones en que  $\alpha^* = \alpha$ , y por lo tanto  $T_1' = T_1$ ; en tal atmósfera una masa de aire que se desplaza verticalmente se encuentra siempre rodeada por aire a igual temperatura y, por consiguiente, sobre ella no actúan fuerzas que tienden a volverla a su posición de equilibrio ni tampoco a separarla de esta nueva posición. Se dice entonces que el aire está *en equilibrio neutro.*



### 3.5 Principales Factores Meteorológicos importantes en la Dispersión de Contaminantes

En las secciones anteriores pudimos percatarnos que los mecanismos que rigen los efectos de la meteorología no son nada triviales, pues se halla involucrado como principal protagonista el complejo problema de la turbulencia. Por otra parte, la dinámica de las sustancias contaminantes inyectadas a la atmósfera es regida casi totalmente por este mecanismo, lo cual hace que el estudio de la propagación de los contaminantes sea un problema aún más complejo.

Sin embargo, no es el único factor meteorológico que afecta la dispersión de contaminantes; existen varios más, entre los que se encuentran (Zanetti, 1990):

- a) El viento horizontal (rapidez y dirección), el cual es generado por la componente del viento geostrofico, esto es, por el gradiente de presión en la parte superior de la PBL, alterado por contribuciones de las fuerzas de fricción del suelo y por los efectos meteorológicos de los vientos locales.
- b) La estabilidad atmosférica, esto es, una forma simple de clasificar los estados turbulentos de la atmósfera, los cuales afectan la tasa de difusión de los contaminantes.
- c) La elevación sobre el nivel del piso.
- d) La intensidad de la temperatura de inversión la cual limita  $Z_i$ .
- e) El movimiento vertical de la atmósfera debido a sistemas de alta o baja presión, o a complejos efectos del terreno.

La dispersión vertical y, en ~~mayor~~ grado, la horizontal depende de las propiedades de la PBL que son caracterizadas por:

- a) Las condiciones de estabilidad en la PBL
- b) La altura  $Z_i$  de la PBL
- c) La profundidad  $h$  de la capa de mezcla, esto es el espesor de la región turbulenta más próxima al piso.
- d) Las irregularidades del terreno.

La estabilidad atmosférica puede ser caracterizada por varios métodos o parámetros, tales como:

- a) El número de flujo de Richardson ( $R_f$ ), esto es, la relación entre la tasa de disipación de turbulencia (por flotación) y la tasa de creación de turbulencia (por corte). Tenemos  $R_f < 0$  para condiciones inestables,  $R_f = 0$  para condiciones neutrales y  $R_f > 0$  para condiciones estables (Salcido A., Sozzi R. et al., 1993).
- (b) El número de Richardson gradiente ( $R_g$ ) es una variante del número de flujo

de Richardson ( $R_i$ ), el cuál resulta calculable más fácilmente ya que depende solamente de variables meteorológicas medias. También aquí tenemos que si  $R_i < 0$  la condición es inestable, si  $R_i = 0$  la condición es neutra y si  $R_i > 0$  entonces tenemos una condición estable. El valor crítico de  $R_i$  es igual a 0.25. Cuando  $R_i > 0.25$ , la estratificación estable suprime la turbulencia conduciendo a un flujo prácticamente laminar, incluso en presencia de esfuerzos cortantes del viento. En condiciones inestables, en cambio, cuando el módulo de  $R_i$  es mayor que la unidad se tiene convección libre (Salcido A., Sozzi R. et al., 1993).

- c) La longitud de Monin-Obukhov ( $L$ ) físicamente puede interpretarse como la altura bajo la cual los efectos de flotación dominan a los efectos de cortes del viento en la producción de turbulencia. Tenemos que  $\frac{1}{L} < 0$  para condiciones inestables,  $\approx 0$  para neutrales, y  $> 0$  para estables. Por otra parte, tenemos que, en situaciones convectivas, estos términos de producción de flotación como de corte, son aproximadamente iguales en  $z = -0.5L$  (Salcido A., Sozzi R. et al., 1993).

Hasta aquí hemos expuesto sólo algunos conceptos de la meteorología. Sin embargo estos serán suficientes para poder establecer la dinámica inicial o condiciones iniciales de nuestro modelo de dispersión de contaminantes desarrollado en el capítulo 6. Por otro lado, esta reseña también nos proporciona los elementos mínimos para poder entender algunos de los muchos modelos de dispersión de contaminantes que se han venido desarrollando en la actualidad y que a continuación expondremos con más detalle.

---

 MODELACION MATEMÁTICA DE LA CALIDAD DEL AIRE
 

---

Desde hace unos 30 años la contaminación atmosférica ha venido creciendo, siendo hoy día un problema de primera línea por las dimensiones alcanzadas. Por ello, numerosos científicos han invertido muchos esfuerzos para lograr una solución a esta calamidad del siglo XX. Muchos estudios se han hecho al respecto, participando en ellos investigadores de todas las áreas de la ciencia, en particular físicos e ingenieros, los cuales han generado una gran variedad de modelos con el objeto de entender y comprender más claramente el difícil problema de la dispersión de contaminantes en la atmósfera. A continuación expondremos de una forma concisa los principales modelos que son utilizados en la actualidad por la EPA en sus campañas de control y prevención.

#### 4.1 Modelos de Elevación de Plumas

Con frecuencia los contaminantes emitidos a la atmósfera poseen una temperatura considerablemente más alta que el aire circundante. Varios de los contaminantes industriales son emitidos desde chimeneas y por lo tanto poseen una cantidad de movimiento inicial vertical considerable. Ambos factores (flotación térmica y el momento vertical) contribuyen al incremento vertical de la altura promedio de la pluma por arriba de la chimenea. Estos procesos terminan cuando la flotación inicial de la pluma se pierde al mezclarse con el aire del medio ambiente.

Las consecuencias físicas del fenómeno antes mencionado es generalmente cuantificado por un único parámetro, la elevación de la pluma  $\delta h$ , definido como el desplazamiento vertical de la pluma en la fase inicial de la dispersión. Muchos estudios han proporcionado formulas semiempíricas para evaluar  $\delta h$  (e.g. Briggs, 1975); otros han propuesto descripciones más complejas y comprensivas de muchas interacciones físicas entre la pluma y el medio ambiente (e.g., Golay, 1982).

Una revisión de las formulaciones semiempíricas disponibles para el cálculo de  $\delta h$  (y sus variaciones con la distancia de sotavento (hacia donde va el viento) desde la fuente) es presentado por Strom (ver Stern, 1976) y Hanna et al. (1982). Varias de las ecuaciones para  $\delta h$  tienen las siguiente forma:

$$\delta h = \text{const}(Q_h^a x^b u^c).$$

donde  $a, b, c$ , son constantes,  $x$  es la distancia de sotavento y  $u$  es la velocidad del

viento en  $z_s$ , la altura de la fuente;  $Q_h$  esta dado por:

$$Q_h = Q_m C_p (T_s - T_a),$$

donde  $C_p$  es el calor específico a presión constante,  $T_s$  es la temperatura del gas,  $T_a$  la temperatura del ambiente en  $z_s$  y  $Q_m$  es la tasa de masa emitida dada por:

$$Q_m = \rho_s \pi R_s^2 V_s,$$

donde  $\rho_s$  es la densidad de las emisiones,  $R_s$  el radio de salida y  $V_s$  es la velocidad de salida vertical.

Entre otros esquemas, el método de Briggs (1969) es uno de los más conocidos. Este método define el parámetro de flujo de boyancia por

$$F_b = \frac{g V_s R_s^2 (T_s - T_a)}{T_s},$$

y la distancia crítica de sotavento  $x^*$ , como:

$$x^* = \begin{cases} 2.16 F_b^{2/5} z_s^{3/5}, & \text{para } z_s < 305 \text{ m;} \\ 67 F_b^{2/5}, & \text{para } z_s \geq 305 \text{ m,} \end{cases}$$

donde  $z_s$  es la altura de la fuente. La distancia crítica  $x^*$  separa las etapas del levantamiento de la pluma, como se discute abajo.

Para  $x \leq x^*$ , el comportamiento del levantamiento de la pluma para todas las estabildades atmosféricas sigue la formula :

$$\Delta h = \text{const} F_b u^{-1} x^{2/3},$$

estando la const entre 1.6 y 1.8 , con un valor sugerido por Briggs (1972) de 1.6. Para  $x \geq x^*$ , donde la turbulencia atmosférica juega un papel dominante, el levantamiento de la pluma llega a ser para todas las estabildades atmosféricas igual a:

$$\Delta h(x) = 1.6 F_b^{1/3} u^{-1} x^{2/3} \left( \frac{2}{5} + \frac{16x}{25x^*} + \frac{11}{5} \left( \frac{x}{x^*} \right)^2 \right) \left( 1 + \frac{4x}{5x^*} \right)^{-2}.$$

Subsecuentemente, Briggs (1975) mejoró las ecuaciones para el levantamiento final debido a la turbulencia. El proporcionó formulas separadas para la turbulencia inducida mecánicamente y convectivamente. Esta nueva formulación fue utilizada por Turner (1985) como discutiremos más adelante. Otras formulaciones han sido propuestas, entre otros, por Holland (1953), Brummage (1966), Bringfelt (1969), Fay (1970), Carpenter (1971).

Las ecuaciones anteriores son utilizadas para plumas flotantes, esto es, cuando  $T_s > T_a$ . Los jets (i.e., plumas no flotantes con  $T_s \approx T_a$ ) pueden ser tratados con ecuaciones similares.

Turner (1985) usó las formulas de Briggs (1975) y propuso una rutina generalizada que calcula simultáneamente el levantamiento de la pluma y la penetración de la misma en la capa por arriba de la altura de mezcla. Estas rutinas asumen que ciertos datos meteorológicos como la temperatura y la velocidad del viento son disponibles por capas y que la altura de mezcla  $h$  y el gradiente del potencial de temperaturas  $\partial\theta/\partial z$ , por arriba de la altura  $h$ , son conocidos. Las fórmulas semiempíricas presentadas anteriormente han mostrado, en muchos casos un alto grado de imprecisión. Métodos adicionales han sido propuestos para proveer, al menos en teoría, una mejor representación física de los dos fenómenos básicos relacionados con el levantamiento de una pluma.

- (i) Un incremento vertical de la línea central de la pluma
- (ii) El encausamiento del aire atmosférico dentro de la pluma y su consecuente esparcimiento horizontal y vertical.

Briggs (1975) tabuló las características de 22 modelos básicos de levantamiento de pluma, y muchos más han sido desarrollados desde entonces. No tiene caso repasarlos todos, pero algunas breves consideraciones acerca de algunos de ellos son necesarias.

El modelo integral del levantamiento de pluma de Schatzmann (1979), permite una solución numérica de la ecuación de la conservación de masa, momento, concentración y energía térmica. Este método parece particularmente efectivo (al menos cerca de la fuente), pues no usa una aproximación Boussinesq común y, por lo tanto, permite el tratamiento de un flujo de un jet con una densidad muy diferente de la del aire. Sin embargo, este modelo falla al obtener y precisar la inercia de la masa efectiva fuera de la pluma, parece contener un término irreal de arrastre, y muestra problemas con la conservación de la masa.

Golay (1982) ha propuesto una aproximación aún más compleja; un modelo de encause diferencial capaz de simular el doblamiento de las plumas en estructuras atmosféricas verticales complicadas, integrando numéricamente las ecuaciones de la conservación de la masa, cantidad de movimiento, energía, vapor de agua y las dos ecuaciones para la energía cinética turbulenta y la viscosidad de vórtice en la forma presentada por Stumüller (1974). La principal limitación de la aproximación de Golay es la detallada información meteorológica que se requiere, esto es, el perfil vertical de la velocidad del viento, la temperatura potencial virtual, la humedad relativa, la energía cinética y viscosidad turbulenta. Glendening (1984) ha propuesto una aproximación más simple, la cual integra numéricamente las ecuaciones de conservación, sin embargo tiene muchas suposiciones simplificadoras (la pluma es simétrica con respecto a su eje central y sus aspectos tridimensionales son ignorados).

Henderson-Sellers (1987), han desarrollado un modelo comprensivo que abarca tanto la elevación de la pluma como la dispersión de contaminantes dentro de una formulación numérica. Los resultados son expresados en términos de la trayectoria de la línea central, de las velocidades y de la tasa de esparcimiento de las concentraciones al nivel del piso. El modelo también se puede aplicar a casos de vientos y campos de temperatura no uniformes, así como a terreno urbano. El modelo ha sido implementado en un avanzado paquete de "software" (llamado PRISE) que puede correr en una PC (computadora personal).

Probablemente la técnica más prometedora para la simulación de la flotación de una pluma en condiciones inestables es la del "gran vórtice" (Large Eddy Simulation), Nieuwstand y Valk (1987) aplicaron tal modelo a una fuente lineal, en la cual la flotación fue sumada, incrementando la temperatura de la fuente con respecto a la temperatura del medio ambiente. Trabajos posteriores en este sentido fueron desarrollados por Van Haren y Nieuwstand (1989), quienes obtuvieron un acuerdo razonable entre la salida de modelo de gran vórtice y el campo experimental de Carras y Williams (1984). Esta simulación de gran vórtice permite una diferenciación entre la fracción del movimiento de una pluma causado por la turbulencia convectiva y el causado por la flotación de la pluma misma. Esto último parece no obedecer la Ley 2/3 de Briggs.

Otro procedimiento avanzado de computación es el SEM (Stack Exhaust Model), desarrollado por Sykes et al. (1989). Este modelo es el más detallado dentro de la jerarquía de modelos atmosféricos desarrollados por la EPRI (Electric Power Research Institute). El modelo usa técnicas de simulación de estados de la turbulencia en un esfuerzo para simular la fase inicial de la pluma, incluyendo la flotación de su elevación. SEM usa el promedio de Reynolds de las ecuaciones de Navier-Stokes, bajo la suposición de un fluido Boussinesq incompresible. Estas ecuaciones son resueltas numéricamente usando la técnica de diferencias finitas a segundo orden. El modelo generalmente provee soluciones de estados estacionarios, aunque es capaz de simular flujos dependientes del tiempo.

## 4.2 Modelos Eulerianos de Dispersión

La difusión del aire contaminado puede ser simulado numéricamente por varias técnicas, las cuales están divididas en dos categorías:

- (I) Modelos Eulerianos
- (II) Modelos Lagrangianos

Cada uno de éstos tiene ventajas y desventajas en el tratamiento de los fenómenos atmosféricos. Muchos autores, en particular Lamb (de Longhetto, 1980), han investigado estas dos aproximaciones y sus interrelaciones con detalle.

La diferencia básica entre la visión Euleriana y la Lagrangiana se ilustra en la figura 4.1 (Zannetti, 1990), en la cual el sistema de referencia es fijado (esto es con respecto a la Tierra) mientras que el sistema de referencia Lagrangiano sigue el avance medio del movimiento atmosférico.

A continuación presentaremos los fundamentos de la aproximación Euleriana y sus técnicas principales de modelación para la difusión atmosférica. Los métodos Lagrangianos serán discutidos posteriormente, mientras que los modelos de dispersión Gaussianos, los cuales pueden ser visto como Eulerianos ó Lagrangianos, son presentados en la próxima sección.

La aproximación Euleriana está basada (Lamb, 1980) en la conservación de la masa de una sola especie de contaminante, cuya concentración denotamos por  $c(x, y, z, t)$ :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla c + D \nabla^2 c + S, \quad (4.1)$$

y que resulta similar a la ecuación para la conservación del agua, pero con un término adicional (frecuentemente despreciable) que representa la difusión térmica molecular  $D \nabla^2 c$  donde  $D$  es el coeficiente de difusión molecular (alrededor de  $1.5 \cdot 10^{-5} m^2 s^{-1}$  para el aire).

Suponemos que la velocidad  $\mathbf{V}$  puede ser representada como la suma de una componente "media" y una "fluctuante":

$$\mathbf{V} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}', \quad (4.2)$$

donde  $\bar{\mathbf{u}}$  representa la porción del flujo que se resuelve usando mediciones o modelos meteorológicos, y  $\mathbf{u}'$  es la componente restante no resuelta. Nosotros también suponemos:

$$c = \langle c \rangle + c', \quad (4.3)$$

donde  $\langle \rangle$  denota el promedio sobre un ensamble (teórico) cuyo significado es aclarado más abajo. Substituyendo las ecuaciones (4.2) y (4.3) en (4.1) y tomando el ensamble promedio, tenemos:

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} = -\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \langle c \rangle - \nabla \cdot \langle c' \mathbf{u}' \rangle + D \nabla^2 \langle c \rangle + \langle S \rangle. \quad (4.4)$$

En la cual, de acuerdo con la hipótesis ergódica, se supone que

$$\langle \bar{\mathbf{u}} \rangle = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{y} \quad \langle \mathbf{u}' \rangle = 0.$$

Los modelos meteorológicos tienen una porción  $\mathbf{u}'$  grande no resuelta, la cual es frecuentemente del mismo orden que la magnitud  $\bar{\mathbf{u}}$ . De aquí que el término  $\langle c' \mathbf{u}' \rangle$  sea muy grande y contenga mucho de la difusión de vórtices, de la turbulencia atmosférica, cuyos efectos dispersivos sean del orden de magnitud ó más grande que

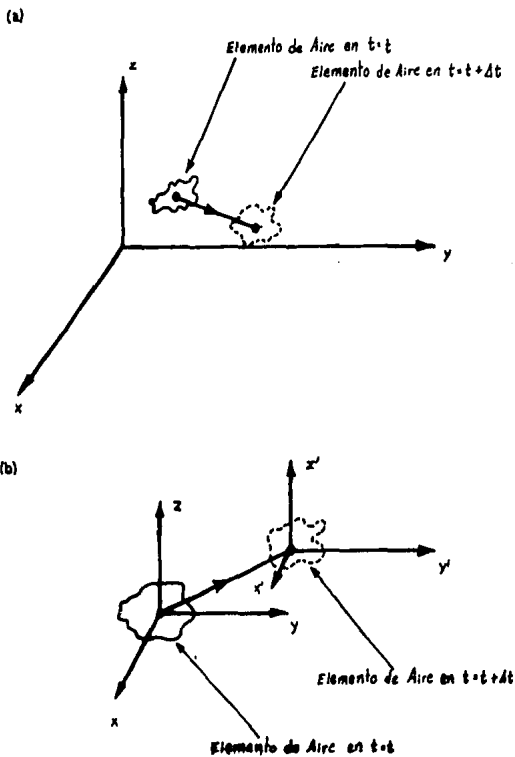


Fig. 4.1. Sistema de referencia Euleriano (a) y Lagrangiano (b) para el movimiento atmosférico

los moleculares. Hasta con un modelo meteorológico perfecto, y dando información detallada acerca de  $\bar{u}(x, y, z, t)$ , las escalas espacial y temporal del vórtice turbu-



lento de menor tamaño son tan pequeñas que una correcta integración numérica de la ecuación (4.4) sería prácticamente imposible.

La comprensión de  $u'$  como una componente sin solución (que puede ser minimizada pero nunca eliminada) es la llave para entender el significado del promedio sobre el ensamble. Lamb (1980) clarifica este punto notando que  $u'$  es una variable estocástica, esto es, existe una familia infinita de funciones  $u$  que satisfacen la ecuación de movimiento. Cada posible miembro de la familia  $u$  genera una concentración diferente  $c$ . El promedio, como un valor acertado en el tiempo, de todas las posibles concentraciones generadas por las diferentes  $u$  dan el significado del ensamble "crítico"  $\langle c \rangle$ . Naturalmente, si podemos medir continuamente  $u$  y  $c$  en todas partes, podríamos evaluar el miembro exacto de la familia que ha ocurrido en realidad. Faltando esta información, debemos asumir que toda  $u$  teóricamente aceptable será igualmente posible, permitiéndonos así, las mejores condiciones posibles para el cálculo de  $\langle c \rangle$ , en vez de la  $c$  real.

Una conclusión importante es que la salida  $\langle c \rangle$ , proporcionada por los modelos Eulerianos es conceptualmente diferente de los datos de la calidad del aire obtenidos por monitoreo.

Del análisis del término  $\nabla \cdot \langle c' u' \rangle$  en la ecuación (4.4), podemos extraer otro punto importante, esto es, se introducen tres nuevas incógnitas. De aquí que la solución de la ecuación (4.4) requiera de una relación entre un término meteorológico, o el término promedio  $\langle c \rangle$ , y estas tres incógnitas adicionales. La aproximación más simple (cerradura fenomenológica) está dada por la así llamada Teoría-K o teoría del transporte-gradiente, en la cual

$$\langle c' u' \rangle = -K \nabla \langle c \rangle, \quad (4.5)$$

donde  $K$  es un tensor ( $3 \times 3$ ) de difusión turbulenta cuyos elementos pueden ser estimados por la salida de un modelo meteorológico o inferidos de las mediciones meteorológicas.

Lamb (1973) evaluó las condiciones de validez de la ecuación (4.5). El concluyó que la Teoría-K es aplicable solamente cuando  $\tau_t/T_c \ll 1$ , donde  $\tau_t$  es el tiempo máximo sobre el cual un vortice turbulento mantiene su integridad, siendo  $T_c$  la escala de tiempo del campo  $\langle c \rangle$ . ( i.e.  $\partial \langle c \rangle / \partial t = \langle c \rangle / T_c$ ). De aquí que la Teoría-K es aplicable cuando el cambio en la concentración  $\langle c \rangle$  tiene una escala más grande que el transporte turbulento, condición que es frecuentemente violada cerca de las fuentes muy aisladas (donde  $T_c$  es corto), especialmente con grandes vientos horizontales.

Suponer la ecuación anterior, tiene una aplicación limitada y mayores limitaciones ha mostrado en el tratamiento de fuentes puntuales en condiciones inestables. Han sido propuestas formulaciones más complejas (usando más órdenes de magnitud) para evaluar  $\langle c' u' \rangle$ , sin embargo el problema no ha sido resuelto completamente.

La ecuación (4.4) bajo la hipótesis expresada por (4.5) se simplifica posteriormente suponiendo además que: (1) el tensor  $K$  es diagonal, (2) la difusión molecular es despreciable, y (3)  $c$  representa la concentración de un contaminante no-reactivo (i.e.  $\langle s \rangle = S$ ).

Con estas simplificaciones la ecuación (4.4) se transforma en la *ecuación semiempírica de la difusión atmosférica*.

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} = -\bar{u} \cdot \nabla \langle c \rangle + \nabla \cdot K \nabla \langle c \rangle + S. \quad (4.6)$$

Esta última ecuación puede ser integrada (analítica o numéricamente) si las variables de entrada  $\bar{u}, K$  y  $S$  son dadas con las condiciones iniciales y de frontera para  $\langle c \rangle$ .

En el caso de una única fuente estacionaria, el término fuente es tratado comúnmente como una condición de frontera de barlovento (de donde viene el viento). Para una velocidad promedio del viento  $\bar{u}(x, y, z, t)$  soplando en la dirección positiva del eje  $x$ , las condiciones de frontera de barlovento en el plano  $(y, z)$  son las siguientes:

$$\langle c \rangle = \frac{Q}{\bar{u}(0, y_s, z_s + \Delta h)} \delta(z - z_s - \Delta h) \delta(y - y_s), \quad (4.7)$$

donde  $Q$  es la tasa con la que se emiten los contaminantes,  $z_s$  es la altura de la fuente localizada en  $(0, y_s)$ ,  $\Delta h$  es el levantamiento de la pluma y  $\delta$  es el operador de Kronecker. Usando las condiciones de frontera y asumiendo un estado estacionario, la ecuación (4.6) se simplifica a:

$$\bar{u} \cdot \nabla \langle c \rangle = \nabla \cdot K \nabla \langle c \rangle. \quad (4.8)$$

A continuación vamos a discutir algunos modelos de dispersión de contaminantes que se han creado usando esta teoría.

(1.-) El modelo de caja simple (single box model, SBM)

El SBM (Lettau, 1970) es el modelo más simple de calidad del aire y está basado en la conservación de la masa en el interior de una caja Euleriana, la cual representa una área extensa, como podría ser la de una ciudad. El concepto físico bajo la aproximación del modelo de caja es descrito en la figura 4.2. (Zannetti, 1990)

La ecuación de la conservación de la masa está dada por

$$\frac{\partial(c z_t)}{\partial t} = Q - c z_t \frac{u}{\Delta x}, \quad (4.9)$$

siendo  $z_t$  la variación en el tiempo de la altura de la capa de mezcla,  $\Delta x$  y  $\Delta y$  las dimensiones de la caja,  $Q$  la emisión constante por unidad de área,  $c$  la variación

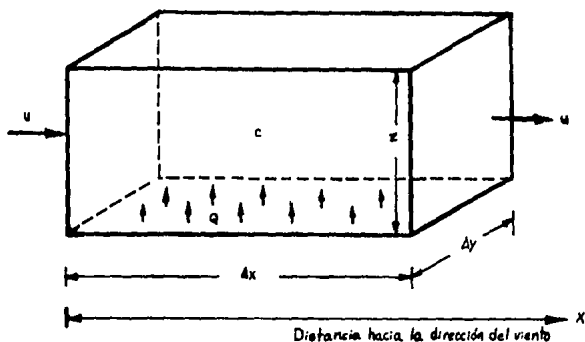


Fig. 4.2. Modelo simple de caja.

promedio en el tiempo de la concentración en el interior de la caja y  $u$  la velocidad del viento de entrada y cuyo valor se considera constante. La integración de esta última ecuación está dada por (Venkatram, 1978)

$$c(t)z_i(t) = c(t_0)z_i(t_0)\exp(-t/T_f) + QT_f(1 - \exp(-t/T_f)), \quad (4.10)$$

donde  $t_0$  y  $T_f$  representan los límites de integración.

Si la dinámica de  $z_i(t)$  se conoce, la ecuación (4.10) permite el cálculo de  $c(t)$ . En condiciones estacionarias (i.e  $t = \infty$ ) tiende hacia el límite :

$$c(\infty) = Q(T_f/z_i), \quad (4.11)$$

lo cual es muchas veces una suposición cuasiestacionaria, razonable en los estudios urbanos.

El SBM ha sido con frecuencia aplicado simultáneamente a contaminantes inertes y reactivos; en el último caso, la ecuación (4.10) ha sido modificada incorporándole un término químico en el cálculo del balance de masa. Como un ejemplo particular de sus aplicaciones, Meszaros (1978) usó un modelo de caja para computar el azufre atmosférico sobre Europa, incorporando simultáneamente las emisiones naturales y antropogénicas en la ecuación (4.10). También Jensen y Petterson (1979), quienes usaron una sonda acústica para evaluar  $z_i$ , encontraron una concordancia entre los resultados arrojados por el SBM en el cálculo de  $C(t)$  y las mediciones de concentraciones urbanas.

## (2.-) Modelo de Slug ( Slug model, SM)

Venkatram (1978) mostró que el modelo de caja tiene una gran cantidad de inercia y no puede manipularse apropiadamente para cambios temporales rápidos en  $Q$  o en  $u$ . Propuso el SM como una mejora del modelo de caja, especialmente durante los episodios de estancamiento. El SM permite a la concentración  $c$  variar en la dirección  $x$  (a lo largo del viento) y en la dirección  $z$ , pero asume que la concentración no varía en la dirección  $y$  (transversal al viento). Esto nos permite escribir la ecuación de la conservación de la masa de la caja en término de dos dimensiones ( $x, z$ ):

$$\frac{\partial(c, z)}{\partial t} + \frac{\partial(c, z)}{\partial x} = 0. \quad (4.12)$$

donde  $x$  es la distancia en el interior de la caja. Definimos la concentración promedio en  $x$  como  $\bar{c}(x)$ , donde:

$$\bar{c}(x)z_i(x) = \int_0^{z_i(x)} c(x, z) dz, \quad (4.13)$$

y  $z_i(x)$  es la altura de mezcla o el tamaño vertical de la "pluma urbana" generadas por las emisiones  $Q$  del nivel del piso.

Las solución de la ecuación (4.12) y (4.13), después de que las emisiones han cesado, (es decir, que  $Q = 0$ ) son:

$$c(x) = \begin{cases} (x - ut)Q/z_i(x), & \text{para } t \leq x/u; \\ 0, & \text{para } t > x/u. \end{cases}$$

Para  $t = T_f$ , el esquema de arriba propiamente da  $\bar{c} = 0$  a través de toda la caja, ya que la solución de la ecuación (4.10) no es capaz de reproducir este flujo completamente.

## (3.-) Modelo de cajas Múltiples (Multi-Box model, MM)

El modelo de cajas individuales ha sido extendido a simulaciones con cajas múltiples (Ulbrick, 1968; Reiquam, 1968; Gifford y Hanna, 1973). Johnson (en Stern, 1976), describe el modelo multicajas en la forma más simple por la ecuación:

$$\Delta c_{i,j} = [(F_{i-1/2,j} - F_{i+1/2,j}) + (F_{i,j-1/2} - F_{i,j+1/2}) + Q_{i,j}\Delta t] / V,$$

donde  $\Delta c_{i,j}$  es la variación promedio de la concentración  $c_{i,j}$  en la caja  $i, j$  durante el intervalo de tiempo  $\Delta t$ ;  $i, j$  son los índices de la caja horizontal;  $Q_{i,j}(t)$  es la tasa de emisión de contaminantes de todas las fuentes en el interior de la caja; y  $V$  es el volumen de la caja, (es decir,  $V = \delta x \Delta h$ , siendo  $h$  la altura de la caja).  $F$  representa el flujo de contaminante a través de los lados de la caja; es decir:

$$F_{i\pm 1/2,j} = c_{i,j} A_{i\pm 1/2,j} u_{i\pm 1/2,j},$$

$$F_{i,j\pm 1/2} = c_{i,j} A_{i,j\pm 1/2} u_{i,j\pm 1/2}$$

donde  $A$  es el área de un lado de la caja,  $u$  la componente perpendicular a  $A$  de la velocidad del viento, y el término  $1/2$  en los índices indica el lugar entre una celda y la otra (por ejemplo,  $i + 1/2$  significa entre  $i$  y  $i + 1$ ,  $j - 1/2$  significa entre  $j - 1$  y  $j$ ).

Las dos limitaciones principales de esta aproximación es la poca importancia que dá a la dispersión horizontal y el supuesto de una mezcla instantánea en la caja (especialmente en la dirección vertical). Sin embargo, el modelo efectúa los cálculos rápidamente y en muchas ocasiones puede proveer respuesta satisfactorias a bajo costo, especialmente en las regiones donde no se encuentra disponible la meteorología detallada y la información de las emisiones.

A continuación hablaremos de algunos modelos Eulerianos más avanzados.

Debido a las muchas deficiencias de la Teoría-K ya discutidas, han sido propuestas muchas formulaciones Eulerianas nuevas y más complejas para simular la dispersión atmosférica. Entre ellas, dos han recibido particular atención :

(4.-) Modelo de clausura a 2° orden (Second-Order Closure Modeling, SOCM)

En vez de usar la aproximación de la Teoría-K, en la ecuación (4.5), podemos calcular una ecuación exacta a segundo orden para correlaciones a segundo orden de  $\langle c'u' \rangle$ . Esta ecuación, sin embargo, introduce nuevas variables, además de las correlaciones de segundo orden, haciendo el sistema indeterminado. Un modelo de cerradura a segundo orden encuentra las relaciones entre estas nuevas variables y las anteriores. Usando esta aproximación, Lewellen y Teske (1976) obtuvieron una ecuación diferencial parcial para el flujo de masa en condiciones turbulentas, la cual tiene un comportamiento dual. Para la pluma inicial, caracterizada por su propia escala, que es más pequeña que la escala de la turbulencia ambiental, la ecuación muestra un comportamiento hiperbólico. Mientras que, para escalas grandes de la pluma, la ecuación muestra una suave transición a un comportamiento parabólico. Solamente este último comportamiento puede ser explicado bien por la Teoría-K.

El modelo de Lewell y Teske fue exitosamente comparado en simulaciones de laboratorio de difusiones en condiciones convectivas. El modelo fue capaz de predecir el levantamiento máximo de las concentraciones a partir del piso. Comparaciones hechas con datos recolectados experimentalmente fueron menos alentadores (Lewellen y Sykes, 1983), y ni las muestras ni las concentraciones de la pluma fueron predichas correctamente. De aquí que la aplicación de modelos con una cerradura a ordenes más altos sea aún cuestionable, pese a que algunos resultados recientes (Enger, 1986) han mostrado rasgos alentadores.

(5.-) Modelo de simulación de grandes vórtices (Large Eddy Simulation Models, LESM)

Como fue descrito por Nieuwstadt y Valk (1987), un modelo de grandes vórtices tales como aquellos desarrollados por Deardorff (1974) y Nieuwstadt

(1986), calculan el movimiento turbulento a gran escala resolviendo directamente un conjunto de ecuaciones de Navier-Stokes modificadas. Estas son:

- (.) una ecuación de momento "filtrada" con términos extras de submalla
- (.) una ecuación de temperatura "filtrada" con términos extras de submalla
- (.) una ecuación de Poisson para la presión
- (.) una ecuación de transferencia de gradiente para la cerradura de todos los términos extras que describen los movimientos de submalla
- (.) y una ecuación para la energía de la submalla.

Por *filtrada*, entendemos la eliminación de los movimientos a pequeña escala que son aún más pequeños que la malla numérica. Estas ecuaciones son resueltas usando el método de diferencias finitas, con mallas de aproximadamente de 50 a 100 m, e intervalos de tiempo de 5 s.

Usando los resultados del modelo de Deardorff (1974), Lamb (1978) simuló exitosamente la estática de las partículas no-flotantes en condiciones convectivas. Nieuwstandt y Valk (1978) a su vez usaron una ecuación de conservación para los contaminantes, la cual es resuelta al mismo tiempo con el LESM. Esta segunda aproximación es capaz de reproducir bien los experimentos de laboratorio donde Willis y Deardorff reprodujeron el comportamiento del contaminante no-flotante en condiciones convectivas. Esta buena concordancia ya no fue vista en las simulaciones de plumas flotantes.

Concluyendo, las simulaciones usando el LESM parecen prometedoras y representa la aproximación que es más cercana para reproducir la física en la difusión atmosférica.

Sin embargo sus simulaciones de plumas flotantes necesitan ser investigadas más a fondo. También es posible, que otras técnicas computacionales, tales como la de Monte-Carlo (modelo Lagrangiano de partículas) sean capaces de mostrar simulaciones similares a muy bajo costo, reproduciendo el comportamiento estocástico del movimiento atmosférico sin resolver explícitamente las ecuaciones de Navier-Stokes.

### 4.3 Modelos Gaussianos de Dispersión

El modelo Gaussiano de una pluma es el más común de los modelos de calidad del aire. Esta basado en una fórmula simple del campo de concentración (en 3 dimensiones) generado por una fuente puntual bajo condiciones de emisión y meteorología estacionarios. El modelo Gaussiano de una pluma es visualizado en la figura 4.3. (Zanetti, 1990)

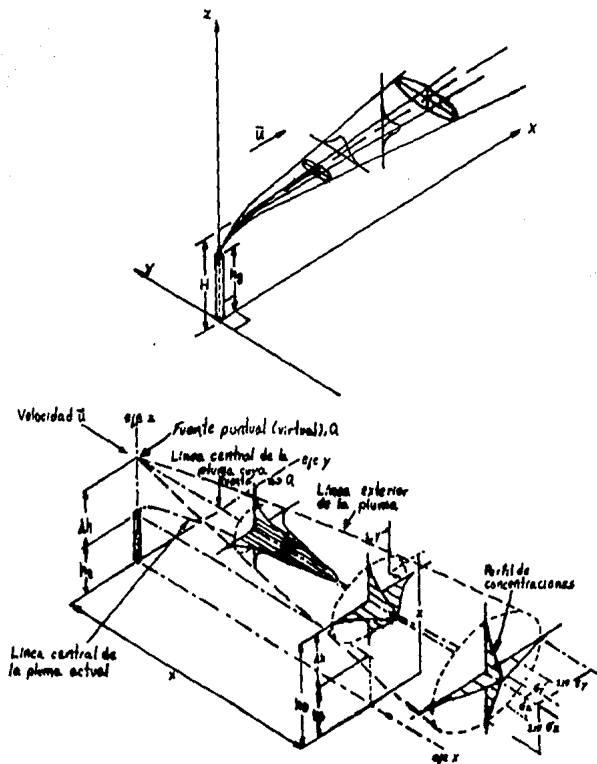


Fig. 4.3. Pluma Gaussiana en un sistema de coordenadas orientado con el viento (i.e. a lo largo de la dirección de  $\vec{u}$ ). (a) Fuente de emisión situada en  $(0,0,H)$ .

Por simplicidad, la pluma se dirige hacia la parte positiva del eje  $x$ . En un sistema de referencia general, la fórmula Gaussiana de la pluma es expresada por:

$$c(\mathbf{s}, \mathbf{r}, \lambda) = \frac{Q}{2\pi\sigma_h\sigma_z|\bar{u}|} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_{cw}}{\sigma_h}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_s + \Delta h - z_r}{\sigma_h}\right)^2\right], \quad (4.14)$$

donde  $c(\mathbf{s}, \mathbf{r})$  es la concentración en  $\mathbf{r} = (x_r, y_r, z_r)$  debido a las emisiones en  $\mathbf{s} = (x_s, y_s, z_s)$ ;  $Q$  es la tasa de emisiones;  $\sigma_h(j_h, d)$  y  $\sigma_z(j_z, d)$  son las desviaciones estándar (horizontal y vertical) de la distribución espacial de la concentración de la pluma (frecuentemente  $\sigma_h$  es referido a  $\sigma_y$ );  $j_h$  y  $j_z$  son los estados de turbulencia horizontal y vertical;  $d$  la distancia del sotavento del receptor a la fuente, donde:

$$d = [(\mathbf{r} - \mathbf{s}) \cdot \bar{\mathbf{u}}] / |\bar{\mathbf{u}}|, \quad (4.15)$$

$\bar{\mathbf{u}}$  es la velocidad promedio del viento en la altura de emisión (se asume que  $\bar{u}_x \ll (\bar{u}_x + \bar{u}_y)^{1/2}$ ;  $\Delta_{cw}$  es la distancia del viento cruzado entre el receptor y la fuente (esto es entre el receptor y el centro de la línea de la pluma), donde:

$$\Delta_{cw} = \left[|\mathbf{r} - \mathbf{s}|^2 - d^2\right]^{1/2}, \quad (4.16)$$

y  $\Delta h$  es el levantamiento de la pluma, el cual es función de los parámetros de emisión, la meteorología y la distancia de sotavento  $d$ . La ecuación (4.14) es aplicada para  $d > 0$ ; si  $d \leq 0$ , entonces  $c = 0$ .

Como se puede ver fácilmente la ecuación (4.14) se refiere a un estado estacionario (es decir no una función del tiempo), usa condiciones meteorológicas que pueden ser consideradas homogéneas y estacionarias en el área modelada, y no puede trabajar con condiciones de calma, donde  $|\bar{\mathbf{u}}| \rightarrow 0$ . Sin embargo, la simplicidad de la aproximación Gaussiana, su fácil manejo, sus sencillos parámetros meteorológicos y, especialmente, el acceso a este método para decisiones cuantitativas y control de niveles (U.S. EPA, 1978) han estimulado las investigaciones con el fin de reconocer algunas de las limitaciones de esta teoría en el tratamiento de situaciones complejas del mundo real. La ecuación (4.14) generalmente se escribe en la forma:

$$c = \frac{Q}{2\pi\sigma_h\sigma_z\bar{u}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y_r}{\sigma_y}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{h_r - z_r}{\sigma_z}\right)^2\right], \quad (4.17)$$

en la cual  $\bar{u}$  es la rapidez horizontal del viento,  $h_r$  es la altura efectiva de emisión (i.e.  $h_r = z_s + \Delta h$ ), y  $\sigma_y$  reemplaza a  $\sigma_h$ . Aquí también se orienta el viento con respecto al sistema de coordenadas como vimos para la ecuación (4.14). Esta ecuación puede ser derivada de muchas formas tomando diferentes suposiciones y puede ser justificada por consideraciones semi-empíricas.



Muchas modificaciones han sido propuestas a la ecuación Gaussiana simulando condiciones especiales de dispersión.

La ecuación (4.14) ó (4.17) puede ser integrada espacialmente para simular efectos de fuentes no puntuales (esto es, de línea, de área o de volumen). La integración analítica es frecuentemente imposible o requiere simplificaciones (especialmente en la forma de las funciones de  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$ ). De aquí que la integración numérica sea usada para las integraciones espaciales. Muchos modelos Gaussianos contienen rutinas detalladas para el tratamiento de fuentes de líneas, áreas y volumen. Turner (1970) propuso la siguiente fórmula para simular los efectos de la máxima fumigación matutina de una pluma elevada que previamente emitió en la capa estable:

$$c(x, 0, z) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi\sigma_y H_e \bar{u}}}, \quad (4.18)$$

donde:

$$H_e = h_e + 2\sigma_{zs}, \quad (4.19)$$

$$\sigma_{ys} = \sigma_{ys} + (h_e/S), \quad (4.20)$$

La ecuación (4.16) se deduce suponiendo que la pluma estable, caracterizada por  $\sigma_{ys}$  y  $\sigma_{zs}$ , es bruscamente aspersada desde el piso. Durante esta aspersión la pluma llega a estar mezclada homogéneamente en dirección vertical entre  $z = 0$  y  $z = h_e + 2\sigma_{zs}$  y expandida horizontalmente siguiendo a unos  $15^\circ$  la trayectoria de aspersión.

Otro problema de particular importancia es el de la aspersión en la línea de la playa. Como se puede ver en la figura 4.4. (Zametti, 1990)

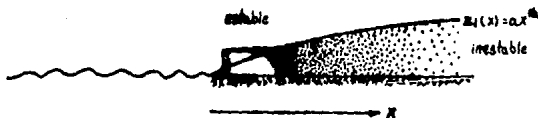


Fig. 4.4. Ejemplo de una pluma que produce una concentración vertical uniforme después de encontrar una capa inestable.

El humo de la chimenea puede ser emitido a lo largo o cerca de esta línea, la cual inicialmente se encuentra en condiciones marítimas estables de dispersión. Pero por la brisa matutina los contaminantes son transportados hacia el interior, y

eventualmente penetran en la capa de mezcla inestable iniciándose así la aspersión hacia el piso.

Lyons y Cole (1983) y Van Dope et al. (1979) proporcionaron las siguientes soluciones aproximadas para este problema. Si  $z_i(x)$  es la altura de mezcla expresada como una función de la distancia  $x$  de la línea de la playa, la concentración en la región de aspersión es :

$$c_F(x) = \frac{1}{z_i(x)} \int_{-\infty}^{z_i(x)} c dz, \quad (4.21)$$

donde  $c$  es el campo de concentración generado por la ecuación de una pluma Gaussiana estandar con desviaciones estandares estables (esto es,  $\sigma_y, \sigma_z$ ). Después de algunas simplificaciones obtenemos, para pequeñas  $\sigma_z$  y  $y = 0$  :

$$c_F \approx \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\sigma_y f u z_i(x)}. \quad (4.22)$$

Por otro lado, un programa Gaussiano desarrollado por el Departamento del Interior de los EU, simula el transporte y la difusión de los contaminantes por arriba del mar, que son emitidos por fuentes interiores tales como las plataformas petroleras. Este modelo (Hanna, 1984) está llegando a ser regularmente la herramienta oficial de la EPA en este tipo de aplicaciones.

Unos pocos programas, para computadoras, Gaussianos estan disponibles para simular terrenos complejos. El más reciente es el modelo de dispersion en terrenos irregulares (rough terrain dispersion model (RTDM, ERT, 1984) y el modelo para dispersion en terrenos complejos (CTDM; Strimaitis et al., 1986), ambos desarrollados por la EPA. En ellos se incorporan los intensivos estudios experimentales en terrenos complejos.

Uno de los resultados más importante en la modelación de terrenos complejos, usando fórmulas Gaussianas, es la estimación de la altura de la línea central de la pluma cuando la misma se encuentra próxima al terreno.

Otros tres modelos Gaussianos importantes se verán a continuación:

(1.-) El modelo climatológico (Climatological Model, CM)

La ecuación Gaussiana de una pluma es usada frecuentemente para simular la variación en el tiempo del campo de concentración, suponiendo para ello una serie de condiciones uniformes. En otras palabras, si los datos meteorológicos y de emisión son conocidas cada hora, puede usarse repetidamente una ecuación estacionaria (tal como la (4.14)).

Muchas aplicaciones para la calidad del aire requieren del cálculos de concentraciones promedios a largo plazo (anuales), de aquí que se requiera un gran

número de cálculos por hora (8.768 cálculos por hora para cada fuente. Ya que las condiciones meteorológicas y de emisión son frecuentemente las mismas en diferentes épocas, muchos de estos cálculos por hora proveen el mismo campo de concentraciones. El modelo climatológico toma ventaja de estas repeticiones para calcular las concentraciones promedio a largo plazo sin desarrollar las costosas simulaciones cada hora.

Muchos autores ( e.g., Martin, 1971; Calder, 1971; Runca, 1977) han usado exitosamente el modelo climatológico Gaussiano. Esta simulación a largo plazo generalmente proporciona mejores resultados que las de corto-plazo, ya que tiene un mejor tratamiento de los errores.

### (2.-) El Modelo de pluma segmentada (Segmented plume model, SPM)

La fórmula Gaussiana estacionaria descrita en las ecuaciones (4.14) ó (4.17) son válidas solamente durante condiciones de transporte (es decir,  $\bar{u} \geq 1$  m/s), en situaciones completamente homogéneas y estacionarias. Para tratar en regla las variaciones en el tiempo de las condiciones de transporte, especialmente los cambios en la dirección del viento, muchos autores han desarrollado y usado el modelo Gaussiano de pluma segmentada. En esta aproximación la pluma se quiebra en varios elementos independientes, cuya característica y dinámica iniciales están en función de la variación en el tiempo de las condiciones de emisión y la variación en el tiempo de las condiciones de la meteorología local en cada elemento de la pluma.

Las características de la pluma segmentada se ilustran en la figura 4.5 (Zanetti, 1990), la cual muestra una vista de planta (o superior) de un segmento de pluma, misma que va encontrando cambios progresivos en la dirección del viento a lo largo de su trayectoria. Los segmentos son secciones de una pluma Gaussiana. Cada segmento, sin embargo, genera un campo de concentraciones distinto que correspondería al generado por una fuente virtual que se hallaría en la prolongación de los rayos que forman las fronteras del segmento cónico de la pluma, tal como ilustra la figura 4.5.

### (3.-) Modelo de fumarada (Puff Model, PM)

EL PM, como el modelo de segmentos ha sido desarrollado para tratar emisiones no estacionarias en condiciones dispersivas no homogéneas. El PM, sin embargo, tiene la ventaja adicional de que es capaz de simular, al menos teóricamente, condiciones de calma o con muy poco viento.

El PM supone que cada emisión de contaminantes en un intervalo de tiempo  $\Delta t$  inyecta en la atmósfera una masa  $\delta M = Q\Delta t$ , donde  $Q$  es la tasa de emisión. El centro de la fumarada contiene la masa  $\Delta M$  la cual es expulsada de acuerdo a la variación local en el tiempo del viento. Si en un tiempo  $t$  el centro de la fumarada está localizado en  $p(t) = (x_p, y_p, z_p)$ , entonces la concentración debido a esa fumarada en el receptor situado en  $r = (x_r, y_r, z_r)$  puede ser calculado usando

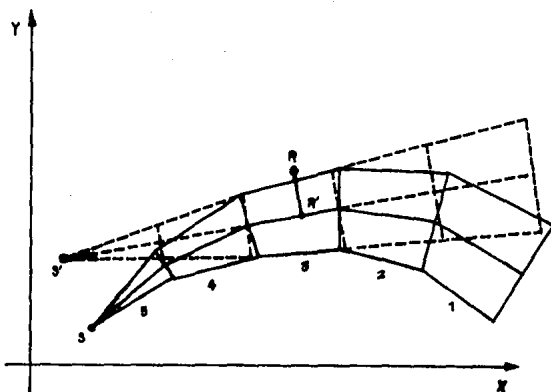


Fig. 4.5. Cálculo de la concentración en el receptor R generada por la pluma segmentada.

la fórmula Gaussiana básica para fumarada:

$$\Delta c = \frac{\Delta M}{2\pi^{3/2}\sigma_h^2\sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_p - x_r}{\sigma_h}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y_p - y_r}{\sigma_h}\right)^2\right] \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_p - z_r}{\sigma_z}\right)^2\right]. \quad (4.23)$$

Notemos que la integración analítica de la ecuación anterior en condiciones de transporte homogéneas y estacionarias nos da la fórmula Gaussiana de la pluma (es decir la ecuación (4.14)).

Además, la ecuación de humareda (4.23) difiere significativamente de la ecuación de la "pluma" (4.14) porque se ha substituido un término extra de difusión horizontal por el término de transporte, con la eliminación consecuente de la velocidad del viento  $\bar{u}$ . En otras palabras, en el PM la velocidad del viento afecta los cálculos de la concentración solamente cuando se controla la densidad de la fumarada en la región. De aquí que al menos el modelo pueda manejar condiciones de calma y de viento abajo, representando esta aproximación la aplicación más avanzada y poderosa de la fórmula Gaussiana.

Por último, recientemente Zanetti (1986) propuso un método mixto que combina los avances de ambas aproximaciones (de segmentos y fumarada) para efectuar simulaciones más efectivas en cuanto a costo de los fenómenos de dispersión de una pluma a corto plazo. La dinámica de los contaminantes es descrita por la evolución temporal de los elementos de la pluma tratados como segmentos o fumaradas de acuerdo a su tamaño. Mientras que los segmentos proporcionan una rápida simulación numérica durante las condiciones de transporte, las fumaradas proporcionan la simulación apropiada para situaciones de calma.

#### 4.4 Modelos Lagrangianos de Dispersión

Como vimos en la sección 4.2, los modelos Lagrangianos proporcionan un método alternativo para simular la difusión atmosférica. Estos son llamados Lagrangianos porque son descritos por elementos de fluidos que siguen el flujo instantáneo. El término "Lagrangiano" fué usado inicialmente para distinguir el modelo de caja Lagrangiano (el cuál se verá más adelante) del modelo de caja Euleriano descrito en la sección 4.2. En este caso, la diferencia reside en que la caja Euleriana no se mueve, mientras que la caja Lagrangiana sigue la trayectoria del viento promedio. Sin embargo, el término ha sido extendido para describir todos los modelos en las cuales las plumas están quebradas en "elementos" tales como los segmentos, las humaredas o las partículas ficticias.

Son muchos los esfuerzos que se han hecho para entender y parametrizar las relaciones entre los parámetros atmosféricos equivalentes a la visión Euleriana y a la visión Lagrangiana. Hanna (1979) desarrolló un análisis estadístico de la fluctuación del viento y mostró que ambas observaciones de las fluctuaciones  $u'$  del viento pueden ser simuladas por una relación lineal a primer orden:

$$u'(t + \Delta t) = u'(t)R(\Delta t) + u''(t), \quad (4.24)$$

donde  $R(\delta t)$  es el coeficiente de autocorrelación al tiempo anterior  $\Delta t$  y  $u''$  es una componente aleatoria. Davis (1982) examinó varias teorías que pretenden relacionar la velocidad estática de las partículas Lagrangianas con el flujo Euleriano estático en el cual ellas se mueven. Novikov (1969) propuso una conexión entre la probabilidad Lagrangiana y la Euleriana que fue entonces generalizada (Novikov, 1986) a fluidos que tienen densidad variable. A pesar de los esfuerzos arriba mencionados, sigue persistiendo una incertidumbre en cuanto a estos resultados, y una relación teórica completamente aceptable entre las variables Eulerianas y Lagrangianas no ha sido aún desarrollada.

La ecuación Lagrangiana fundamental para la dispersión atmosférica de una

única especie contaminante es:

$$\langle c(r, t) \rangle = \int_{-\infty}^t \int p(r, t | r', t') S(r', t') dr' dt' \quad (4.25)$$

donde la integración espacial se efectúa sobre el dominio atmosférico completo;  $\langle c(r, t) \rangle$  es la concentración promedio en  $r$  al tiempo  $t$ ;  $S(r', t)$  es la fuente de emisión (*masa volumen<sup>-1</sup> tiempo<sup>-1</sup>*);  $p(r, t | r', t')$  es la función de densidad de probabilidad que mueve un trozo de aire desde  $r'$  al tiempo  $t'$  a  $r$  al tiempo  $t$ , donde para algunas  $r'$  y  $t > t'$ :

$$\int p(r, t | r', t') dr \leq 1. \quad (4.26)$$

La expresión anterior puede ser menor que 1 cuando son considerados los fenómenos químicos o de sedimentación; de otra forma, la conservación de la masa siempre requiere el valor para que la ecuación anterior sea igual a 1. Para contaminantes primarios,  $S(r', t')$  es distinto de cero solamente en el punto  $r'$  donde el contaminante es liberado (es decir el punto donde está la chimenea). Para contaminantes secundarios,  $S(r', t')$  puede ser virtualmente distinto de cero en todas partes. Sin embargo, para ambos contaminantes, sea primario o secundario, la ecuación (4.26), que representa la conservación de la masa debe cumplirse.

Ya que que a menudo es difícil evaluar la *historia* de la emisión total  $S(r', t')$  para  $-\infty \leq t' \leq t$ , la ecuación (4.25) puede ser reescrita como la suma de dos términos:

$$\begin{aligned} \langle c(r, t) \rangle = & \int p(r, t | r', t') \langle c(r', t_0) \rangle dr' \\ & + \int_{t_0}^t \int p(r, t | r', t') S(r', t') dr' dt'. \end{aligned} \quad (4.27)$$

en la cuál solamente la contribución de la fuente durante  $t_0 \leq t' \leq t$  necesita ser incluida, ya que el término de la primera integral da cuenta de la contribución de la fuente antes de  $t_0$ ; sin embargo, esta última ecuación requiere algunas estimaciones de la concentración promedio al tiempo  $t_0$ .

Esto puede indicar que el uso de la ecuación (4.27) en lugar de la ecuación (4.25) puede ser incorrecto cuando el impacto fraccional exacto de una fuente específica necesita ser estimado. De hecho, cuando usamos la ecuación (4.27) conocemos las concentraciones del fondo y esto puede ser usado para estimar el término  $\langle c(r', t_0) \rangle$ .

El parámetro clave en la ecuación de arriba es la función de densidad de probabilidad  $p$ , que para contaminantes no reactivos es una función solamente de

la meteorología ( y del tipo de contaminante cuando se consideran los fenómenos de sedimentación ). La ecuación (4.25) ó la (4.27) representan una descripción rigurosa de los procesos de transporte y difusión expresados en una notación probabilística. Sin embargo, la incorporación completa de las reacciones químicas representa un paso difícil.

Diferentes suposiciones concernientes a la función de densidad de probabilidad  $p$  se pueden derivar de las ecuaciones Gaussianas y de la ecuación de la Teoría-K. Seinfeld (1975) mostró que todas las fórmulas, tanto de plumas Gaussianas como de humareda, pueden ser derivadas de la ecuación (4.25) bajo los siguientes supuestos simplificadores.

- a) La turbulencia es homogénea y estacionaria
- b)  $p$  obedece a una distribución multidimensional normal

Muchos tipos de modelos pueden ser clasificados como Lagrangianos:

- . El modelo de caja Lagrangiano que ha sido usado para simulaciones fotoquímicas.
- . Los modelos Gaussianos de plumas segmentadas
- . Los modelos Gaussianos de humareda
- . Los modelos de partículas

#### 1.- Los modelo de Caja Lagrangiano ( Lagrangian Box Model, LBM)

Los Modelos de Caja Lagrangiano son similares a los Modelos de Caja Eulerianos presentados en la sección 4.2, con la diferencia importante que una caja Lagrangiana es una caja que se mueve horizontalmente de acuerdo a la variación en el tiempo de la velocidad promedio del viento, como ilustra la figura 4.6 (Zannetti, 1990).

Esta técnica es particularmente provechosa para simulaciones fotoquímicas y proporciona una estimación promedio de cómo varía la concentración en el tiempo a lo largo de la trayectoria de la caja. La principal deficiencia de esta técnica es la suposición de una velocidad del viento constante a través de la PBL, mientras que en realidad, el viento de corte juega un papel importante.

Muchos modelos Lagrangianos han sido desarrollados para simular las reacciones fotoquímicas en el interior de una masa en movimiento. Este desarrollo fue provocado por el alto costo de tiempo de computo de los modelos fotoquímicos Eulerianos, en el cual las reacciones químicas y fotoquímicas necesitaban ser calculadas en cada celda (fija) de la malla del dominio tridimensional. El modelo de caja Lagrangiano, por el contrario, hace estos cálculos sobre un pequeño número de celdas que se mueven como en los modelos REM2 y DIFKIN, respectivamente.

Más recientemente han sido desarrollados dos modelos fotoquímicos Lagrangianos avanzados: El modelo TRACER (Traut, 1981) y el PLMSTAR (Lur-

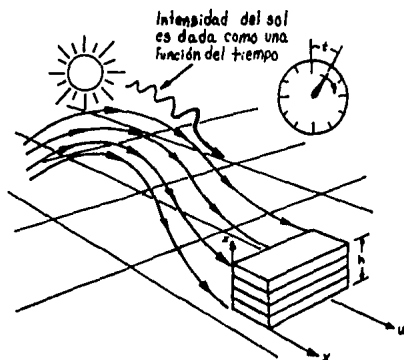


Fig. 4.6. Dinámica vertical de una caja Lagrangiana.

mann et al., 1985). El TRACER usa las paredes de una celda bidimensional moviéndose a largo de una trayectoria específica que simula el transporte de un elemento de pluma desde la fuente hasta el receptor. El modelo TRACER resuelve numéricamente el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales parciales no lineales y acopladas (conservación de la masa):

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left[ k_y \frac{\partial c_i}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ k_z \frac{\partial c_i}{\partial z} \right] + R_i + S_i + D_i, \quad (4.28)$$

donde  $c_i$  es la concentración de la especie  $i$ ;  $K_y$  y  $K_z$  son los coeficientes de difusión turbulenta tanto en la dirección vertical como en la transversal del viento;  $R_i$  es la tasa de transformación química de la especie  $i$  (reacción o eliminación);  $S_i$  es la tasa de emisión de la especie  $i$  a lo largo de la trayectoria;  $D_i$  es la tasa de sedimentación de la especie  $i$ .

El PLMSTAR es un modelo a mesoescala designado para simular el comportamiento de los contaminantes en las reacciones químicas de las plumas. Tanto este modelo como el TRACER consideran el movimiento de las paredes de la celda.

## 2.- El modelo de Partículas (Particle Model, PM)

La modelación de partículas es la más reciente y poderosa herramienta de computo para discretizar los sistemas físicos. Estos han sido particularmente exitosos en un vasto espectro de aplicaciones (Hockney y Eastwood, 1981), que



van desde rangos de una escala atómica (flujo de electrones en semiconductores, dinámica molecular) hasta escalas astronómicas (dinámica de galaxias). con otras importantes aplicaciones en el área de plasmas y dinámica de fluidos turbulentos. El modelo de partículas maneja el término de transporte, cuyo tratamiento numérico correcto es muy complejo con el modelo Euleriano, de una forma sencilla. Las partículas, de hecho, tienen una naturaleza Lagrangiana, ya que ellas se mueven siguiendo por lo general el flujo; por esta razón estas partículas son llamadas frecuentemente partículas Lagrangianas. Este modelo usa un cierto número de partículas computacionales (ficticias) para simular la dinámica de los parámetros seleccionados (por ejemplo la masa, el calor, la densidad de carga eléctrica, etc.). El movimiento de las partículas puede ser producido tanto por una velocidad determinista como por una velocidad pseudorandatoria generada usando las técnicas del Método de Monte-Carlo. En el último caso, la trayectoria de cada partícula representa la realización de un conjunto infinito de soluciones. Importantes características de los procesos de difusión se pueden inferir a partir de estos modelos siempre que los cálculos de las propiedades promedio de las partículas, las cuales no son afectadas por la aleatoriedad de las velocidades, se hagan con el número suficiente de partículas.

Hay tres modelos de partículas que pueden ser definidos (Hockney y Eastwood, 1981):

- i) Los modelos Partícula-Partícula (Particle-Particle models (PP)), en el que todas las fuerzas de interacción (esto es, fuerza gravitacional o eléctrica) entre partículas son calculadas a cada intervalo de tiempo.
- ii) El modelo de malla de partículas (Particle-Mesh models (PM)), en la cual las fuerzas son calculadas usando una ecuación de campo para el potencial.
- iii) El modelo PP-PM, una aproximación híbrida, en la que las fuerzas entre partículas están divididas en una componente de corto-alcance (usando cálculos del método PP) y una componente de variación lenta (usando el método PM).

Las escalas de tiempo y espacio (como en todo sistema discreto) juegan un papel importante en el modelo de partículas. En particular, la relación entre la física real de partículas (o elementos) y el modelo que simula las mismas, representa un factor importante para la interpretación de los resultados de la simulación. En general, se pueden encontrar tres posibles casos (Hockney y Eastwood, 1981):

- (.) Una correspondencia uno-a-uno entre la partícula real y la simulada, como, por ejemplo, en la simulación de la dinámica molecular.
- (.) Una descripción donde se representan los elementos de fluido (posición, vorticidad) como partículas, como, por ejemplo las simulaciones de vórtices en fluidos donde la correspondiente física de partículas (moléculas) se pierde totalmente.

(.) El uso de "superpartículas", esto es, las partículas simuladas representan una nube de partículas físicas con características similares.

Los modelos de partículas han sido aplicados en su mayoría a las simulaciones de la estructura de espiral de las galaxias, a la dinámica del plasma y al flujo de electrones en semiconductores y a obtener representaciones realistas de la turbulencia en fluidos.

En las aplicaciones para aire contaminado, usando el método de partículas Lagrangianas, el modelo se caracteriza por un conjunto de partículas ficticias cada una de las cuales es movida en cada intervalo de tiempo por una pseudovelocidad que toma en consideración tres componentes básicas de dispersión: 1) el transporte debido principalmente a la velocidad del fluido; 2) Las fluctuaciones turbulentas aleatorias de las componentes del viento (tanto horizontal como vertical); 3) La difusión molecular (si no es despreciable). Después de los trabajos pioneros de Smith (1968) y Hall (1975), Lamb (1978) simuló los fenómenos con turbulencia vertical asignando a cada partícula :

$$w = w_d + w_s, \quad (4.29)$$

donde el primer término  $w_d$  fue determinado por el modelo numérico Euleriano de Deardorff (1974) y  $w_s$  fue un término estocástico que describía los efectos de las fluctuaciones de las sub-malla (sub-grid) no incluidas en el modelo numérico. Zannetti (1981, 1984) introdujo un esquema para incluir las correlaciones transversales entre las fluctuaciones de la velocidad.

Como ilustró Baas (1986), muchos modelos de partículas que estudian los fenómenos de la calidad del aire son soluciones numéricas de la ecuación diferencial estocástica de Langevin:

$$dw = -(w/T_L)dt + d\mu,$$

donde  $w$  es alguna componente de la velocidad de la partícula Lagrangiana,  $T_L$  es su escala de tiempo, y  $d\mu$  los incrementos de la velocidad aleatoria.

La simulación de la dispersión usando partículas Lagrangianas ha sido llamada el modelo "natural". En estos modelos, de hecho, no se necesitan dar los valores de algunas clases artificiales de estabilidad, curvas empíricas de sigma, o coeficientes de difusión que son prácticamente imposibles de medir. Por el contrario las características de la difusión son simuladas por la atribución de cierto grado de "fluctuación" de cada partícula usando, por ejemplo, la capacidad que tienen las computadoras para generar números pseudoaleatorios.

Potencialmente, este modelo es superior tanto en el detalle numérico como en la representación física. Sin embargo, se necesitan aún efectuar muchas investigaciones por los escasos datos meteorológicos disponibles y nuestro limitado conocimiento teórico de los procesos de turbulencia.

Como podemos ver, todos los modelos expuestos hasta ahora, resuelven algunos aspectos de la dispersión de contaminantes, pero tienen graves carencias en

otros puntos. Ello se debe a la inmensa complejidad que representa aún hoy resolver las ecuaciones de la hidrodinámica, pese al grán adelanto que han tenido las técnicas de cálculo y resolución numérica con el desarrollo de las computadoras. Muchos métodos alternativos se están desarrollando y siguiendo esta misma línea. En el próximo capítulo expondremos un nuevo enfoque que ha venido surgiendo en estos últimos años para estudiar y resolver los problemas de dinámica de fluidos.

---

**MODELOS DE AUTÓMATAS CELULARES PARA FLUIDOS**

---

La descripción microscópica de un fluido revela la inmensa complejidad del problema de muchos cuerpos, sin embargo, esto último puede evitarse usando los métodos de la mecánica estadística. A gran escala, esto es, para longitudes de onda grandes comparadas con las dimensiones moleculares, el fluido puede ser tratado como un medio continuo y por lo tanto puede ser descrito adecuadamente por la hidrodinámica clásica. Sin embargo, la complejidad también se refleja a gran escala por la no-linealidad de las ecuaciones de la hidrodinámica, las cuales, excepto para casos particulares (frecuentemente sobresimplificados), no pueden ser resueltas explícitamente. La conexión entre el nivel microscópico -dominio de la *dinámica molecular*- y el nivel macroscópico -dominio de la *hidrodinámica*- es establecido por la *teoría cinética* de Liouville-Boltzmann. Debido a esto, en los últimos tiempos se han desarrollado tres modelos para estudiar numéricamente la dinámica de fluidos.

- (i) La propuesta que utiliza la descripción de medios continuos, esta basada en la resolución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes, que alcanzan las dificultades asociadas con el tratamiento numérico de las ecuaciones diferenciales parciales. En la práctica, esto se logra usando métodos de elemento finito y ecuaciones en diferencias finitas. Estos métodos que involucran técnicas numéricas son utilizados frecuentemente y han producidos resultados espectaculares. Sin embargo, su requerimiento de computadoras rápidas y potentes ha sido una de las dificultades para su utilización.
- (ii) La propuesta cimentada en la dinámica molecular se basa en un modelo microscópico del fluido, el cual es simulado por un sistema de partículas. Este método ha sido usado extensamente para estudiar propiedades termodinámicas y de transporte, así como el comportamiento dinámico del fluido en pequeña escala. Recientemente, esto ha sido extendido a sistemas que se encuentran sujetos a constricciones. La dificultad principal, proviene de la razón entre las escalas temporales y las escalas espaciales, i.e. de la relación entre el tiempo característico de la hidrodinámica versus el tiempo de interacción molecular y de la relación entre la longitud de onda obtenida de la hidrodinámica versus el rango del potencial intermolecular. Ambas cantidades nos dan valores grandes; además para obtener resultados de las simulaciones de dinámica molecular se requiere de un gran número de horas de cómputo, lo cual hace que éste tipo de simulaciones sean bastante costosas.

- (iii) Recientemente, el desarrollo de una "versión sobresimplificada" de un modelo de dinámica molecular ha sido estimulado por la nueva perspectiva de las computadoras en paralelo. De forma similar a las simulaciones de dinámica molecular, las predicciones acerca de cómo será el flujo de un fluido, vendrán dadas por una descripción microscópica de las partículas, solamente que con la variante de que las partículas estarán confinadas a puntos que se mueven a lo largo de las líneas que conforman una malla (ó red) y donde las interacciones entre ellas se reducen a simples reglas matemáticas. La motivación para usar un *gas en red* (de hecho, un sistema modelo bien conocido en mecánica estadística) para simular problemas hidrodinámicos, proviene de la idea que los detalles de las propiedades microscópicas deberían ser irrelevantes en el comportamiento macroscópico del fluido. De modo que si el micromundo ficticio que se crea en la modelación es una caricatura del fluido real, esto no tiene importancia del momento que éste reproduce el comportamiento hidrodinámico correspondiente.

En cierto sentido, los modelos de los gases en redes para simular la hidrodinámica aparecen como un modelo intermedio entre los otros dos modelos numéricos ((i) y (ii) de arriba), de modo que el camino de la teoría cinética establece la conexión entre la dinámica molecular y la hidrodinámica. Como veremos en la última sección de este capítulo las ecuaciones que rigen la dinámica de los gases en redes son las ecuaciones de balance hidrodinámicas.

## 5.1 ¿ Qué son los autómatas celulares ?

La idea de autómatas celular (AC) es tan vieja como las computadoras electrónicas digitales. Las primeras investigaciones fueron llevadas a cargo por John von Neumann (con una importante contribución de Stanislav Ulam) principios de los años cincuenta.

La intención inicial de Von Neumann fue idear un sistema simple que se reprodujera por sí mismo a la manera de un organismo viviente (von Neumann, 1966). El autómata celular conocido como el *juego de la vida*, inventado en 1970 por John Horton Conway, también tiene un aspecto biológico, como el nombre lo sugiere; células nacen, viven o mueren dependiendo de la densidad local de población.

En trabajos más recientes sobre autómatas celulares han cambiado algunas metas. Arreglos locales de celdas que interactúan entre sí son vistas como modelos potenciales de sistemas físicos, que pueden ir desde copos de nieve y ferromagnetos hasta galaxias. También pueden ser utilizados para responder a algunas preguntas de la ciencia de la computación, sean éstas de tipo práctico: como será el organizar una red de muchas computadoras que interactúan una con otra o de tipo teórico

como calcular el límite último del poder de una máquina computadora. Tal vez lo más fascinante, es que un autómata celular puede ser visto como un *universo digital*, por lo que es importante su mecanismo por sí mismo, aparte de la gran utilidad que nos brinda utilizándolos como modelos del mundo real.

El resurgimiento del interés por los autómatas celulares estuvo marcado por un taller que retonó el tema unos años atrás en el Laboratorio Nacional de Los Alamos. Las exposiciones (algunas 20 ponencias) han sido publicadas en el *Physica D* y en libros editados por la North-Holland Publishing Company. Casi todo el material que ahí se encuentra reportado está basado en los trabajos y en las discusiones que se dieron en las reuniones de Los Alamos.

Primero tratemos de entender el concepto de autómata. Intuitivamente una red de autómatas puede ser pensada como un conjunto de elementos que están interaccionando entre sí. Por motivos de simplificación, usaremos la matemática en forma discreta tanto como podamos para este conjunto de elementos.

Empecemos con el tiempo, el que en lugar de ser estimado como una variable real como lo es en física, será considerado segmentado en varios intervalos numerados desde 1 hasta  $n$ . Las variables, que representan el estado del autómata, representadas por el autómata son actualizadas durante cada intervalo. Por lo tanto, para este sistema el tiempo es discreto ya que es representado por un número entero :

$$t = (0, 1, 2, 3, \dots, n, \dots).$$

Por otro lado, la secuencia de evolución está de acuerdo con la evolución de las unidades lógicas que componen el CPU de la computadora ya que recordemos que en computación el tiempo esta siempre discretizado en intervalos por el reloj interno, el cual se encarga de coordinar el cambio de estados de las mencionadas unidades lógicas.

La segunda operación discreta consiste en remplazar las variables continuas y las ecuaciones diferenciales por estados finitos. Por lo que, en resumen, podemos ver que un autómata es un sistema completamente discreto tanto en el espacio, como en el tiempo y en los estados .

Más formalmente en computación, un autómata está definido por tres conjuntos (Weisbuch, 1991):

- (1)  $I$ , el conjunto de entradas  $i$
  - (2)  $S$ , el conjunto de los estados internos  $s$
  - (3)  $O$ , el conjunto de salidas  $o$
- y por dos funciones:

1.  $S(i,o)$ , la función que cambia estados, la cual se encarga de mapear la entrada y el estado, al tiempo  $t$ , al nuevo estado al tiempo  $t+1$ .
2.  $O(s,i)$ , la función de salida, que se encarga de mapear la entrada y el estado

al tiempo  $t$  a la salida al tiempo  $t+1$ .

Hacemos énfasis que esta es la definición de un *autómata*. Haciendo una burda analogía con la biología, podemos compararlo al mínimo elemento funcional de un tejido viviente: una célula. Ahora, lo que propiamente se denomina un *autómata celular* es un conjunto de un gran número de *autómatas* distribuidos en los nodos de una malla, lo cual correspondería, continuando con la analogía anterior, al conjunto de células, es decir, al tejido. Históricamente el primer *autómata celular* propuesto por von Neumann fue desarrollado en los nodos de una malla bidimensional. La conexión (por lo cual se llama celular) de cada *autómata* está limitada a cierta vecindad constituida, usualmente, por los vecinos más cercanos. La estructura de la vecindad preserva la simetría traslacional y rotacional de la malla. Teóricamente, la malla es infinita pero en la práctica siempre tiene fronteras, las cuales pueden ser tomadas en cuenta durante la programación.

Algunas propiedades caracterizan a un *autómata celular*. La primera, corresponde a la geometría del arreglo de las celdas. Para un modelo de crecimiento de copos de nieve, un arreglo bidimensional hexagonal podría ser apropiado, pero en muchos casos se escoge una malla rectilínea o incluso cuadrada. Arreglos de tres o más dimensiones son construidos en la práctica pero ya no pueden ser visualizados. No obstante sorprendentes descubrimientos se han hecho aun con el simple arreglo unidimensional: una sola línea de celdas.

Segundo, dentro de un arreglo dado es necesario especificar la vecindad que tiene cada celda, refiriéndonos con ello a las sitios vecinos que interactúan con nuestra celda de interés. Von Neumann, en su arreglo bidimensional rectangular, tomó en cuenta los 4 vecinos más cercanos para fijar la vecindad de la celda, es decir, los ubicados al Norte, Sur, Este y Oeste. Este conjunto de celdas es ahora denominado la *vecindad de von Neumann*. La vecindad que incluye aquellas 4 celdas, y además las 4 celdas que se encuentran en las diagonales adyacentes, es llamada la *vecindad de Moore*. Obviamente, las vecindades se traslapan y la celda dada está, simultáneamente, incluida en las vecindades de muchas celdas adyacentes. En algunos casos, la celda central encargada de hacer los cálculos es considerada un miembro de la vecindad.

El tercer factor, necesario para describir un *autómata celular*, es el número de estados por celda. Von Neumann encontró una muestra que se replicaba por sí misma, constituida por celdas que tenían 29 estados posibles; pero muchos *autómatas* son mucho más simples. Claramente, existe una amplia variedad de reglas entre los *autómatas binarios*. En aquellos que poseen sólo dos estados por celda, éstos pueden ser representados como 1 o 0, o verdadero o falso.

La primera fuente de variación, en el universo de los *autómatas celulares*, es la existencia del enorme número de posibles reglas para determinar el estado futuro de una celda, basado en la configuración presente de su vecindad. Si  $k$  es el número de estados por celda y  $n$  el número de celdas incluidas en la vecindad, entonces

todas las posibles reglas son:  $k^4^n$ . De este modo, para un autómata binario con vecindades de Von Neumann (donde  $n = 4$ ) existen 65,000 reglas posibles; con la vecindad de Moore (es decir, donde  $n = 8$ ) existen  $10^{77}$ . Solamente una fracción insignificante de todas ellas ha sido examinada hasta el momento.

## 5.2 Modelos de AC para Fluidos

Como ya se ha mencionado, los autómatas pueden servir para simular una enorme variedad de fenómenos, tanto biológicos como físicos. Sin embargo, una de las ramas que más se ha desarrollado en estos últimos años, por los éxitos obtenidos, es sin duda la simulación de la dinámica de fluidos.

La dinámica de fluidos, incluso hoy en día, contiene incógnitas que no se han resuelto. Por ejemplo, el fenómeno de la turbulencia ha sido y sigue siendo uno de los más antiguos misterios de la física clásica. A pesar de ello, desde la mitad de este siglo se han hecho enormes progresos tanto a nivel teórico como experimental encaminados a entender los fenómenos de los fluidos complejos. En particular, una perspectiva muy importante ha surgido desde 1985 (para computadoras en paralelo) en dinámica de fluidos, basada en los métodos de AC: la hidrodinámica de gases en redes (lattice gas hydrodynamics). Dos laboratorios en Francia (el Observatorio de la Universidad de Niza y la Escuela Normal Superior de Paris) y uno en los Estados Unidos (El Centro de Estudios No-lineales de Los Alamos) son los pioneros en estas investigaciones, las cuales han atraído el interés y los esfuerzos de colaboración de un sinnúmero de grupos en los USA y Europa.

El desarrollo de la hidrodinámica de gases en redes ha sido técnicamente conectado con los autómatas celulares, pero como ya se ha señalado, un gas en red ya no debería ser mencionado como un autómata celular. En muchos casos, los gases en redes han llegado a ser un campo por sí mismo, teniendo fuertes conexiones con la teoría cinética, algoritmos, computadoras y supercomputadoras y máquinas fabricadas especialmente para desarrollar estas técnicas.

Pero profundizemos un poco más en lo que denominamos un *gas en red*. En la construcción del modelo del gas en red, se introduce una mayor simplificación (conveniente a nivel computacional) haciendo tanto el espacio discreto (partículas de la malla) el tiempo, la velocidad y la masa. Cada nodo de la malla se comportará como un procesador Booleano, actualizado a cada paso en el tiempo de acuerdo a las reglas que conectan a los nodos vecinos cercanos, cuyas reglas pueden satisfacer las leyes de conservación (masa i.e. número de partículas, momento y energía).

Un modelo de malla cuadrada bidimensional, primeramente fue propuesto por Hardy, de Pazzis y Pomeau (HPP) a mediados de los setentas, cuando investigaban el problema ergódico, y fué retomado 10 años después para las simulaciones hidrodinámicas. Consideremos una malla cuadrada plana donde cada nodo tiene



un estado definido por 4 bits, palabra que representa la presencia o ausencia de partículas con velocidad discretas (1 existe una partícula con velocidad unitaria; 0 no hay partícula). Cada una de las 4 líneas conectan los nodos con sus 4 vecinos, de modo que cada nodo tiene 2 posibles configuraciones de entrada, así como muchas posibles configuraciones de salida. Esto hace que existan 16 posibles reglas, y sólo un número limitado de ellas son coherentes con los principios de conservación. Un principio de exclusión es introducido: dos partículas con la misma velocidad  $C_i$  no pueden ocupar simultáneamente la misma posición o sitio. Claramente la regla de colisiones puede ser construida de modo que satisfaga las leyes de conservación, i.e. el número de partículas y el momento (Hardy et al. 1976).

Por razones de simetrías, que se verán en la sección 5, la malla cuadrada no es apropiada para la simulación hidrodinámica. Las otras dos mallas regulares son la triangular y la hexagonal. Frish, Hasslacher y Pomeau (FHP) propusieron usar una malla triangular con simetría hexagonal, debido a que tiene la suficiente simetría que nos asegura los requerimientos de isotropía de las ecuaciones macroscópicas de la mecánica de fluidos. Cada nodo tiene una vecindad regular hexagonal, de modo que el estado de un nodo está dado por 6 bit; y el número de configuraciones asociadas a los nodos es de 2, las cuales ofrecen 64 reglas posibles. Las restricciones que limitan este número son las leyes de conservación (Frish et al., 1986).

### 5.3 Modelo de 9 velocidades (9V)

El modelo de 9V es el más simple de los gases en redes para el cual puede definirse la temperatura, y por lo tanto para la consideración de efectos térmicos en la simulación del comportamiento de un fluido (Chen et al., 1989). Como servirá de base para crear el modelo que posteriormente usaremos en la simulación, lo describiremos con detalle. En este caso tenemos un plano (espacio bidimensional) discreto, hecho que representamos como una cuadrícula (figura 5.4). Cada celda de esta cuadrícula o malla representa un autómata y el conjunto de todas las celdas representa el autómata celular. Cada autómata tiene un estado representado por la letra  $\sigma_{ij}$ , equivalente a las siguientes notaciones :

$$\sigma_{ij} = \sigma(x = i, y = j) = \sigma(x, y) = \sigma(\mathbf{r}).$$

Matemáticamente,  $\sigma(\mathbf{r})$  es simplemente un número entero con la característica que lo expresamos en base dos, ya que está compuesto de 0 y 1 que es justamente el modo como operan las unidades lógicas de la máquina. Para el modelo de 9V, el estado está dado por el siguiente número binario :

$$\sigma(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^8 S_k(\mathbf{r}, t) \cdot 2^k,$$

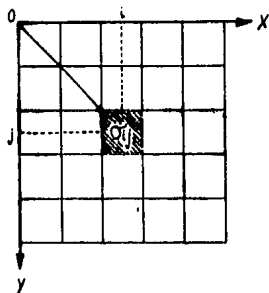


Fig. 5.1. Representación del espacio discreto de un autómata celular bidimensional

siendo  $S_k$  una variable booleana que toma los valores de 0 y 1 para los valores de  $k = 0, 1, 2, \dots, 8$ .

Geoméricamente, podemos representar este número (i.e el estado del autómata) como una torre de 9 pisos (figura 5.2) colocada en la posición  $r$ , donde cada piso puede estar prendido (1) o apagado (0) :

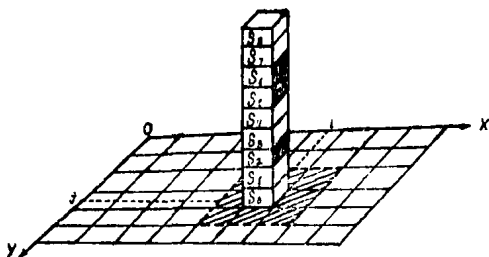


Fig. 5.2. Representación geométrica de un autómata celular

Pero lo más importante para el modelo, es el significado físico que le demos a este número binario o lo que es lo mismo a los pisos de esta torre. Antes de ello definamos los siguiente vectores auxiliar:

$$e_{\alpha} = \begin{cases} \sin\left(\frac{\alpha\pi}{4}\right)u_1 + \cos\left(\frac{\alpha\pi}{4}\right)u_2, & \alpha = 0..7; \\ 0, & \alpha = 8, \end{cases}$$

(donde  $u_1$  y  $u_2$  representan los vectores unitarios a lo largo del eje X y Y respectivamente), los cuales nos informan de las posibles direcciones en las que pueden moverse las partículas. Por otra parte, son las  $S_k$  las variables que nos informan acerca de la existencia de partículas con movimiento en determinadas direcciones o no. En efecto: Siendo las posibles magnitudes de la velocidad  $c_k$ :

$$c_k = \begin{cases} 0, & \text{si } k = 8 \\ 1, & \text{si } k = 0, 2, 4, 6 \\ \sqrt{2}, & \text{si } k = 1, 3, 5, 7. \end{cases}$$

En este modelo tenemos que:

- 1) El conjunto de entradas al tiempo  $t$  es:

$$I = V = \sigma(r + e_k) \quad \text{siendo } k = 0, 1, \dots, 8,$$

cuya representación geométrica se muestra en la figura 5.3:

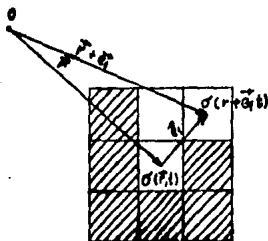


Fig. 5.3. Vecindad de un autómata celular bidimensional de 9V

Se seleccionan arbitrariamente los 8 autómatas más cercanos incluyendo el sitio central por ser la vecindad más sencilla por su simetría espacial.

- 2) El conjunto de entradas internas:

$$S = \{0, 1, 2, 3, \dots, 511\}.$$

3) El conjunto de salidas:

$$O = \{\sigma(\mathbf{r}, t + 1)\}.$$

La función de actualización del modelo de  $\mathcal{NV}$  es :

$$\sigma(\mathbf{r}, t + 1) = S(\sigma(\mathbf{r}, t) \in V).$$

Físicamente,  $S$  representa la función que traslada las partículas, específicamente es :

$$\sigma(\mathbf{r}, t + 1) = \sigma(\mathbf{r} - \mathbf{e}_k, t) \quad \text{para } k = 0, \dots, 8.$$

Nos percatamos que esta regla de actualización es local, es decir, da solamente la evolución de un autómata. El conjunto total de autómatas (i.e el autómata celular) lo podemos representar como una matriz de  $n$  filas por  $n$  regiones :

$$\Omega(t) = \begin{pmatrix} \sigma_{11}(t) & \sigma_{12}(t) & \dots & \sigma_{1n}(t) \\ \sigma_{21}(t) & \sigma_{22}(t) & \dots & \sigma_{2n}(t) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{n1}(t) & \sigma_{n2}(t) & \dots & \sigma_{nn}(t) \end{pmatrix}.$$

Al igual que para un autómata, podemos efectuar la actualización de todos los autómatas de una forma global; para ello aplicamos la función  $T$  a la matriz  $\Omega(t)$ , donde  $T$  viene siendo la traslación de todas las partículas de la malla en un intervalo de tiempo  $\Delta t = 1$ , por lo que :

$$\Omega(t + 1) = T[\Omega(t)].$$

Es claro que la dinámica de un gas donde sus partículas solamente se trasladan, es muy pobre. Sin embargo, la podemos hacer más cercana a la realidad implementando otras reglas de actualización que toman en cuenta :

- (i) *Las colisiones y dispersión de las partículas.* Designaremos a  $C$  como un operador que tiene la función de que las partículas del sistema cumplan las leyes de conservación más fundamentales de la física: la de la energía, la del momento y la del número de partículas.
- (ii) *Los choques de las partículas con las fronteras.* Sea  $O$  un operador que tiene la función de regir la interacción de las partículas con cualquier obstáculo sólido.
- (iii) *La acción de un campo de fuerza externa.* Denotamos a  $F$  como el operador que tiene la función de simular cualquier agente externo que perturbe el gas, siendo un caso particular pero sumamente importante la interacción gravitacional sobre el gas.

Todos estos operadores los explicaremos de forma más detallada en el próximo capítulo, donde se expondrá el modelo que proponemos. Resumiendo,

la evolución temporal del sistema puede expresarse simbólicamente, a nivel global, de la siguiente forma:

$$\Omega(t+1) = F \circ O \circ C \circ T[\Omega(t)].$$

Es importante mencionar que estos operadores no necesariamente conmutan lo cual puede ser puesto en evidencia con un sencillo ejemplo particular.

#### 5.4 Propiedades de equilibrio

El número de partículas que puede tener el gas depende del tamaño de la malla y ésta, en última instancia, de la memoria del computador. Para calcular el número máximo de partículas que puede contener una malla cuadrada se usa la siguiente expresión:

$$\text{Numero maximo} = 9L^2$$

donde 9 es el número máximo de partículas con distinta velocidad que pueden estar en un sitio, mientras que  $L^2$  representa el número total de sitios de la malla. Por ejemplo, si tiene un lado  $L = 500$ , entonces el gas podría tener hasta 2,250,000 partículas !!. Como el sistema puede contar con un número grande de partículas, efectuamos el análisis físico desde el punto de vista de la mecánica estadística, la cual dedica sus métodos a encontrar como se distribuye la energía (y la velocidad) de las  $N$  partículas que constituyen el sistema físico. Suponiendo para esto que los distintos estados de la energía (así como sus velocidades) son accesibles a cualquiera de las partículas del sistema. Nuestro sistema debe satisfacer, en todo instante a semejanza de la mecánica clásica, dos principios básicos de conservación:

$$\text{La conservación del número de partículas: } N = \sum_{k=0}^8 N_k$$

$$\text{Conservación de la energía total del sistema: } E = \sum_{k=0}^8 \epsilon_k N_k$$

donde  $E$  es la energía total del sistema,  $N$  el número total de partículas y  $N_k$  el número total de partículas moviéndose en la dirección  $k$  al tiempo respectivo  $t$ . Por otro lado  $\epsilon_k$  representa la energía de la partícula moviéndose en la dirección  $k$ .

Tomemos la cantidades  $n = N/L^2$ , número promedio de ocupación por sitio,  $e = E/L^2$  la energía promedio por sitio y  $n_k = N_k/L^2$  la función de distribución, que nos informa del número promedio de partículas moviéndose en la dirección  $k$  por sitio. Por lo que las leyes anteriores se transforman en:

$$n = \sum_{k=0}^8 n_k, \quad (5.1)$$

$$e = \sum_{k=0}^8 \epsilon_k n_k, \quad (5.2)$$

Efectuaremos un pequeño paréntesis con el fin de deducir la expresión de la densidad de entropía para un autómata celular de  $9V$ , usando el principio fundamental del conteo.

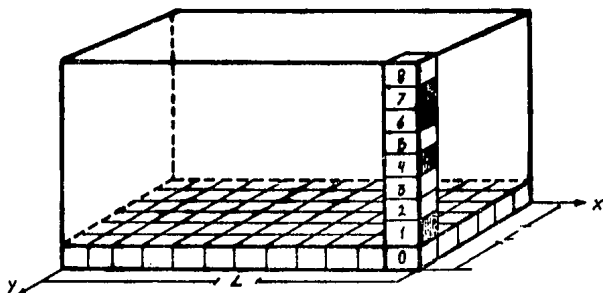


Fig. 5.4 Visualización del autómata celular usando tres dimensiones

En este caso, diremos que una partícula se encuentra en el *estado*  $k$  si dicha partícula tiene la *velocidad*  $v_k$ . Notemos, además, que por tener 9 velocidades contamos solamente con 9 estados. De la figura 5.4 podemos ver que el número total de cajas (o sitios) que pueden tener la velocidad  $v_k$  es  $A = L^2$ . Nos preguntamos por las formas diferentes en que podemos colocar  $N_0$  partículas que tienen velocidad  $v_0$  (i.e que están en el estado 0), en  $A$  sitios.

$$(A) \quad (A-1) \quad \dots \quad (A - [N_0 - 1]),$$

Número de modos de escoger la 1 <sup>ra</sup> partícula	Número de modos de escoger la 2 <sup>da</sup> partícula	Número de modos de escoger la $N_0$ <sup>ava</sup> partícula
---	---	--

Por lo que el número de formas diferentes distinguibles en que podemos colocar  $N_0$  partículas en el estado 0 es :  $A!/(A - N_0)!$  Llamemos  $a_1, a_2, \dots, a_{N_0}$  a las  $N_0$  partículas escogidas y notemos que podemos tomarlas en cualquiera de los  $N_0!$  órdenes, es decir, todas las posibles permutaciones de un conjunto de  $N_0$  partículas.

Una partición está determinada solamente por el número y la designación de las partículas que se encuentran en cada estado, y no por el orden en que fueron colocadas allí. En consecuencia, para obtener el número total de modos distinguibles diferentes en que podemos escoger las  $N_0$  partículas para que ocupen el estado 0 utilizamos:  $A! / N_0! (A - N_0)!$  Notemos que cada estado  $k$  tiene el mismo número total de sitios, es decir  $A$ . Por lo tanto, la deducción anterior es análoga para cualquier estado  $k$ . En resumen el número total de formas diferentes de colocar  $N_k$  partículas en el estado  $k$  es:

$$\frac{A!}{N_k! (A - N_k)!}$$

Podemos ver, por otro lado, que aquí el Principio de Exclusión está reflejado en la expresión:

$$N_k \leq A,$$

que fácilmente podemos observar de la figura anterior.

Finalmente, el número total de formas diferentes distinguibles de obtener las particiones  $N_0, N_1, \dots, N_8$  se obtiene multiplicando las 9 expresiones correspondientes a cada estado:

$$\Gamma = \prod_{k=0}^8 \left( \frac{A!}{N_k! (A - N_k)!} \right).$$

A continuación suponemos que la probabilidad de obtener esa partición es proporcional a  $\Gamma$ . Usando la definición de la entropía adimensional, con el objeto de no operar con la constante de Boltzmann  $k$  tenemos:

$$S = \ln \Gamma.$$

Y desarrollando, obtenemos:

$$S = \sum \left[ \ln A! - \ln [N_k! (A - N_k)!] \right].$$

Usando la aproximación de Stirling  $\ln x! = x \ln x - x$  para  $x \gg 1$  tenemos que:

$$S = \sum \left[ A \ln A - N_k \ln N_k - (A - N_k) \ln (A - N_k) \right].$$

Definimos ahora la densidad de partículas que se encuentran en el estado  $k$  como:  $n_k = N_k/A$ . Observemos que las  $n_k$  no son más que las funciones de distribución, de modo que de la definición anterior despejando  $N_k$  ( $N_k = n_k A$ ) y substituyendo en la expresión anterior de la entropía obtenemos:

$$S = -A \sum_{k=0}^8 \left[ n_k \ln(n_k) + (1 - n_k) \ln(1 - n_k) \right].$$

Por último definiendo la entropía por sitio  $s = S/A$ , la ecuación previa se convierte en (5.3)

$$s = - \sum_{k=0}^8 [n_k \ln(n_k) + (1 - n_k) \ln(1 - n_k)]. \quad (5.3)$$

Retomando el tema de las propiedades de equilibrio, sabemos que de todas las particiones  $\{n_k\}$  existe una que es la más probable dada las condiciones físicas del sistema de partículas. Cuando se alcanza esta distribución, se dice que el sistema se encuentra en *equilibrio estadístico*. En efecto el problema clave de la mecánica estadística es hallar la partición más probable (o ley de distribución) de un sistema aislado dada su composición.

Al alcanzarse el Equilibrio estadístico la entropía se vuelve máxima. Por lo que, para encontrar la ley de distribución, debemos de maximizar la entropía  $s$  utilizando las condiciones subsidiarias (5.1) y (5.2).

Usando la técnica de los multiplicadores de Lagrange, tenemos que la nueva función extendida  $s'$  a maximizar es :

$$s' = s + \alpha \left[ n - \sum_{k=0}^8 n_k \right] + \beta \left[ c - \sum_{k=0}^8 \epsilon_k n_k \right].$$

La condición de máximo es  $\delta s' = 0$ . Como el operador diferencial  $\delta$  es lineal, nos permite desarrollar la expresión previa en:

$$\delta s' = - \sum_{k=0}^8 [\delta n_k \ln(n_k) - \delta n_k \ln(1 - n_k)] - \alpha \sum_{k=0}^8 \delta n_k - \beta \sum_{k=0}^8 \epsilon_k \delta n_k.$$

Tomando en cuenta que  $n, e$  así como  $\alpha$  y  $\beta$  son constantes y factorizando el término común  $\delta n_k$  resulta la siguiente expresión:

$$\delta s' = - \sum_{k=0}^8 \left[ \alpha + \beta \epsilon_k + \ln \left( \frac{n_k}{1 - n_k} \right) \right] \delta n_k.$$

Como pedimos  $\delta s' = 0$  para cualquier variación  $\delta n_k$  entonces:

$$\alpha + \beta \epsilon_k + \ln \left( \frac{n_k}{1 - n_k} \right) = 0.$$

Resultando la siguientes distribuciones de equilibrio para el automata celular:

$$n_k = \frac{1}{1 + e^{\alpha/\beta} [\alpha + \beta \epsilon_k]}. \quad (5.4)$$



Observemos que la distribución de velocidades en el autómatas de  $9V$  se comporta como una distribución de Fermi-Dirac. Notemos que esta distribución de equilibrio que tienen las partículas del lattice gas es una consecuencia de la naturaleza finita del espectro de energías y del principio de exclusión inherente al modelo, lo cual pudiera parecer raro y físicamente inaceptable a primera vista si lo que pretendemos simular es un gas real ya que como bien sabemos las partículas que componen a este tipo de gas obedecen en el estado de equilibrio la distribución de Maxwell-Boltzmann. Sin embargo bajo ciertas restricciones, como son a bajas densidades y a bajas energías el lattice gas se comporta como un fluido normal, y es por esta razón que en los últimos años a habido un interés creciente en el estudio de la mecánica de fluidos usando este tipo de modelos (Frish et. al., 1986; d' Humieres et. al., 1986; Chen et. al., 1989). Esto último también cuenta con ciertas bases físicas sólidas ya que la distribución de Maxwell-Boltzmann es un caso límite de la distribución de Dirac justamente cuando se dan las restricciones anteriormente mencionadas.

Nos falta, a continuación, hallar los valores de los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$ , los cuales están asociados a ciertos parámetros termodinámicos. Para ello, sustituimos (5.4) en (5.3) obteniendo la siguiente entropía de equilibrio:

$$s = \alpha n + \beta e - \sum_{k=0}^8 \ln(1 - n_k). \quad (5.5)$$

Pero de la termodinámica tenemos que una de las expresiones que nos da la entropía es la ecuación de Euler:

$$S = \frac{U}{T} + \frac{PV}{T} - \frac{\mu N}{T}.$$

Dividiendo toda la expresión entre el volumen  $V$  y reordenando los términos, obtenemos que la densidad de entropía termodinámica es:

$$s = -\left(\frac{\mu}{T}\right)n + \left(\frac{1}{T}\right)e + \frac{P}{T}. \quad (5.6)$$

Comparando las expresiones (5.5) y (5.6) tenemos que:

$$\alpha = -\left(\frac{\mu}{T}\right), \quad (5.7)$$

$$\beta = \left(\frac{1}{T}\right), \quad (5.8)$$

$$\sum_{k=0}^8 \ln(1 - n_k) = \frac{P}{T}. \quad (5.9)$$

Por lo que la ley de distribución queda:

$$n_k^0 = \frac{1}{1 + \exp\left[\left(\frac{1}{T}\right)(-\mu + \epsilon_k)\right]}. \quad (5.10)$$

Ahora nos enfocaremos a encontrar las propiedades termodinámicas (Salcedo & Retchman, 1991), tales como  $P, T, \mu$ , a partir de las funciones de distribuciones de equilibrio  $n_k$ . Reacomodando la expresión (5.10) obtenemos:

$$\frac{\mu}{T} = \frac{\epsilon_k}{T} + \ln\left[\frac{n_k}{1 - n_k}\right]. \quad (5.11)$$

Tomemos (5.11) para  $k = 1$  y  $k = 2$ , generando un sistema de dos ecuaciones que resolvemos por igualación, siendo el término común  $\mu/T$ . Realizando esta operación resulta que:

$$\ln\left[\left(\frac{n_1}{1 - n_1}\right)\left(\frac{1 - n_2}{n_2}\right)\right] = \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{T}.$$

Pero sabemos que  $\epsilon_2 - \epsilon_1 = 1/2$  resultando la siguiente expresión para la temperatura:

$$\frac{1}{T} = 2 \ln\left[\left(\frac{n_1}{1 - n_1}\right)\left(\frac{1 - n_2}{n_2}\right)\right]. \quad (5.12)$$

Para obtener  $\mu$  sustituimos (5.12) en el miembro derecho de la ecuación (5.11) para  $k = 1$ :

$$\frac{\mu}{T} = \ln\left[\left(\frac{n_1}{1 - n_1}\right)^2\left(\frac{1 - n_2}{n_2}\right)\right].$$

Por último, la presión  $P$  resulta de despejar la ecuación (5.9):

$$P = T \sum_{k=0}^8 \ln(1 - n_k).$$

Todas las otras propiedades termodinámicas, como podrían ser el calor específico por ejemplo, pueden ser encontradas a partir de las distribuciones de equilibrio correspondiente.

## 5.5 Hidrodinámica discreta

En esta sección expondremos brevemente la hidrodinámica de un gas en red. Tomemos el campo booleano  $S_k(r, t)$ , el cual representa el número de partículas

en el sitio  $r$  al tiempo  $t$ , con velocidad  $v_k$ . Las reglas del autómatata pueden ser escritas como:

$$S_k(r + v_k, t + 1) - S_k(r, t) = \Omega_k. \quad (5.13)$$

donde  $\Omega_k$  denota la razón de cambio en el tiempo del número de partículas debido a las colisiones, mientras que las correspondientes rapidezces  $\{v_k\}$  toman los valores de  $0, 1, \sqrt{2}$ . La formulación explícita de  $\Omega_k$  no será necesaria en lo que sigue. De la ecuación (5.13) obtenemos la ecuación cinética para  $S_k$ ,

$$\frac{\partial S_k}{\partial t} - v_k \cdot \nabla S_k = \Omega_k. \quad (5.14)$$

Las magnitudes fundamentales que se conservan en una colisión elástica son, en primer lugar la masa  $m$  de una molécula, también se conservan cada una de las componentes de la cantidad de movimiento total de las moléculas que chocan. Finalmente, suponiendo que las energías internas de todas las moléculas permanecen invariables en las colisiones, la energía cinética total de las moléculas que chocan también se conserva (Reif, 1968). Para ello requerimos que las reglas de colisiones cumplan las siguientes relaciones,

$$\sum_{k=0}^8 \Omega_k = 0, \quad (5.15)$$

$$\sum_{k=0}^8 v_k \Omega_k = 0. \quad (5.16)$$

$$\sum_{k=0}^8 \frac{1}{2} (v_k)^2 \Omega_k = 0. \quad (5.17)$$

Tomemos  $S(\cdot) = \{S_k(r), a = 0, 1, \dots, 7, 8\}$  como el ensamble del campo booleano  $S_k$ , y tomemos  $P(S(\cdot))$  como la probabilidad del ensamble. Definimos el ensamble promedio como la función de distribución  $n_k$ :

$$n_k = \langle S_k \rangle = \sum_{S(\cdot)} S_k P(S(\cdot)). \quad (5.18)$$

Es claro que la densidad macrocópica del número de partículas  $n$  del momento  $n v$ , y la energía interna  $n \varepsilon$  se expresa como,

$$n = \sum_{k=0}^8 n_k, \quad (5.19)$$

$$\varepsilon = \sum_{k=0}^8 \epsilon_k n_k. \quad (5.20)$$

$$n\mathbf{v} = \sum_{k=0}^8 \mathbf{v}_k n_k. \quad (5.21)$$

Si tomamos la ecuación 5.14 y aplicamos la definición 5.18 obtenemos la siguiente relación para el ensamble promedio  $n_k$

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} - \mathbf{v}_k \cdot \nabla n_k = \Omega_k. \quad (5.22)$$

Las propiedades que caracterizan a cada partícula de un gas en red con temperatura son la masa  $m$  (cuyo valor es 1 en el modelo), la cantidad de movimiento  $m\mathbf{v}_k$  y la energía  $\epsilon_k = \frac{1}{2}(\mathbf{v}_k - \mathbf{v})^2$ , siendo  $\mathbf{v}$  la velocidad media del sistema de partículas. Si multiplicamos ambos lados de la ecuación 5.22 por la masa  $m$ , y luego sumamos sobre el índice  $k$ , obtenemos:

$$\sum_k \frac{\partial n_k}{\partial t} + \sum_k \mathbf{v}_k \cdot \nabla n_k = \sum_k \Omega_k.$$

Notese que el lado derecho de la ecuación anterior debido a 5.15 se anula mientras que el miembro izquierdo se puede reescribir,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \sum_k n_k \right] + \nabla \cdot \left[ \sum_k \mathbf{v}_k n_k \right] = 0.$$

Por último, observemos que las cantidades entre corchetes pueden ser sustituidas usando las relaciones 5.19 y 5.18, obteniendo así la ecuación de continuidad de la hidrodinámica.

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot n\mathbf{v} = 0. \quad (5.23)$$

De forma análoga podemos multiplicar la ecuación 5.22 por las otras propiedades como son el momento o la energía de cada partícula obteniendo las restantes ecuaciones que gobiernan la hidrodinámica (Retchman, Salcido y Bagnoli, 1990),

$$n \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) \mathbf{v}_k = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{P}}, \quad (5.24)$$

$$\frac{\partial(n\epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (n\epsilon\mathbf{v} + \mathbf{q}) + \hat{\mathbf{P}} : \nabla\mathbf{v} = 0, \quad (5.25)$$

$\hat{\mathbf{P}}$  es el tensor de esfuerzo definido como,

$$\begin{aligned} P_{ab} &= \sum_k n_k (v_k - v)_a (v_k - v)_b \\ &= \pi_{ab} - n u_a u_b \end{aligned} \quad (5.26)$$

y

$$\pi_{ab} = \sum_k n_k c_k (e_k)_a c_k (e_k)_b,$$

es el tensor de flujo de momento (no olvidemos que  $v = c_k e_k$ ). En 5.25  $q$  es el vector de flujo de calor, definido como,

$$q_a = \sum_k n_k \frac{1}{2} (v_k - v)^2 (v_k - v)_a.$$

En seguida, se hacen unos breves comentarios acerca del tensor de esfuerzo  $\hat{P}$ , en los modelos de los autómatas celulares. El modelo HPP, el cual es el más simple, posee propiedades notables como son un equilibrio termodinámico local, y el surgimiento de una escala de separación, es decir, la escala típica del movimiento colectivo  $L$  es mucho mayor que el camino libre medio  $l_n$ :  $L \gg l_n$ . El modelo HPP tiene todos los elementos correctos excepto uno: isotropía bajo el grupo de rotaciones de la red. Lo que provoca que la macrodinámica a la que da origen tiene una forma no física, lo cual es poco útil para simular flujos bidimensionales. El tensor de flujo de momento  $\pi_{ab}$  debe reducirse a un escalar por isotropía, lo cual resulta imposible para una red cuadrada. En dos dimensiones, la vecindad que tiene los requerimientos mínimos de simetría es la vecindad hexagonal del modelo FHP.

Suponiendo que una distribución arbitraria  $n_k$  se puede expandir en una serie infinita alrededor de la distribución de equilibrio (expansión de Chapman-Enskog), y considerando además que la velocidad colectiva  $v$ , de las partículas es mucho menor que las velocidades de las partículas  $v_k$ , el lado derecho de la ecuación 5-26 se transforma en una expresión en la cual uno de sus términos es un tensor de cuarto orden (Chen, 1989). No todos los autómatas celulares tienen asociados tensores isotrópicos de cuarto orden. Tales tensores no existen para el modelo HPP, lo cual hace que el tensor esfuerzo no sea isotrópico, y que en este modelo no sea posible observar efectos hidrodinámicos. Para modelos con mayor número de velocidades el tensor de cuarto orden sí puede ser isotrópico, como es el caso del modelo FHP.

En el modelo de 9V, en el caso más general, el tensor de flujo de momento no es isotrópico lo cual produce que la presión efectiva de este modelo tenga la forma siguiente,

$$p^* = n\varepsilon - p_1 n v^2,$$

donde  $p_1 = (1-3\varepsilon)/4\varepsilon$  (Chen, 1989). Vemos que la presión depende de la velocidad macroscópica del fluido. Esta dependencia puede causar oscilaciones no físicas en los gases en redes (Dalhburg, Montgomery y Doolen, 1987). Sin embargo, es interesante notar que cuando  $\varepsilon = 1/3$ , el término no físico se anula lo cual muestra que para ese valor de la energía interna, el término  $v^2$  desaparece del modelo. Bajo condiciones especiales, cuando  $n \leq 3$ , la energía  $\varepsilon$  tiene un valor mínimo cerca de

$n=2$  y cerca de este punto  $\varepsilon$  varía lentamente. Esto nos hace recobrar la isotropía del tensor de esfuerzo (Chen, 1989).

Como hemos podido mostrar hasta ahora, esta nueva área de la simulación de fluidos ha cobrado gran desarrollo, pese a que también se han encontrado problemas teóricos de envergadura que tendrán que ser resueltos en un futuro. Pero por otro lado, los logros también han sido sorprendentes ya que se han podido obtener resultados de manera sencilla sin pasar por los pesados cálculos numéricos que muchas veces involucra el resolver los problemas de dinámica de fluidos. Motivados por esto dimos el paso siguiente, es decir, tratar de generar un nuevo modelo usando gases en redes para simular la dispersión de contaminantes. Esta nueva alternativa para resolver problemas de contaminación será el tema del siguiente capítulo.

---

## UN MODELO ALTERNATIVO PARA DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES

---

En la actualidad, la contaminación atmosférica es un problema que ocupa la atención mundial. México no es la excepción de lo que sucede internacionalmente: sus principales ciudades y zonas industriales (que en los casos más críticos conforman un todo geográfico), registran una alta y peligrosa contaminación del aire.

Por ello resulta incuestionable la importancia que poseen las investigaciones sobre los fenómenos de transporte, dispersión y transformación química de contaminantes en la atmósfera. Numerosos investigadores han dedicado grandes esfuerzos al estudio de estos fenómenos utilizando diferentes enfoques y técnicas de modelación, simulación y experimentación.

A pesar de esto, la mayoría de los modelos utilizados actualmente para la regulación y control de la calidad del aire en México, y en otros países, se basan en una gran cantidad de hipótesis que sobresimplifican los diferentes procesos dinámicos, térmicos y químicos que ocurren en la atmósfera. Así, por ejemplo, como ya se hizo mención en el segundo capítulo, la elevación de una pluma se describe usando algunas fórmulas empíricas o semiempíricas cuyos fundamentos físicos no son del todo claro; para la dispersión horizontal y vertical de la pluma se consideran modelos Gaussianos que describen este proceso de una manera completamente desacoplada de la dinámica de la elevación y del transporte a lo largo de la dirección del viento; los efectos de las complejidades del terreno y de otros obstáculos fijos son introducidos de manera muy forzada y, en ocasiones, un tanto simplista (Zanetti, 1990).

La dirección que han tomado las investigaciones y las limitaciones de sus métodos, mencionados en el párrafo anterior, tiene su justificación, en que el transporte atmosférico y la dispersión del aire contaminado son fenómenos situados en el reino de la turbulencia, la rama más interesante, pero a su vez menos entendida de la mecánica de fluidos. El comportamiento macroscópico del movimiento del fluido es descrito por la ecuaciones de Navier-Stokes(NS), las cuales forman un sistema acoplado y no lineal de ecuaciones diferenciales parciales. Para pequeñas velocidades, las ecuaciones de NS pueden ser linealizadas y resueltas sin muchas dificultades, analíticamente, siempre que las fronteras sólidas involucradas sean simples; de otra forma se opera numéricamente. Sin embargo, si las velocidades del fluido son grandes aparece la inestabilidad, y los métodos analíticos ya no pueden ser usados. Aún así, los métodos numéricos son difíciles de usar y requieren de sistemas de cómputo muy grandes en cuanto a las capacidades de memoria y de

rapidez de cálculo; por ello resulta muy costosa la utilización de este enfoque para el estudio de estos fenómenos. Introducimos aquí la propuesta de modelar los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes usando la técnica de los autómatas celulares, debido a que estos modelos, pese a que también requieren de sistemas de cómputo rápido y con gran capacidad de memoria, no implican el uso de técnicas numéricas de solución de ecuaciones diferenciales. En efecto, como se verá más adelante, todas las leyes físicas fundamentales que rigen el modelo, tales como la conservación de la masa, momento y energía, se introducen a nivel microscópico.

## 6.1 Definición e Implementación del Modelo

En la metodología de la modelación de determinado sistema o fenómeno físico, primero es necesario extraer los elementos más importantes que rigen su evolución. Siguiendo este camino extraigamos los elementos más representativos que participan en el complejo fenómeno de la dispersión de contaminantes. Por un lado, tenemos un gas, la atmósfera (en realidad su composición es más compleja, como lo hemos mencionado en los primeros capítulos, sin embargo el objetivo es simplificar el problema al máximo), cuya dinámica parece caótica, a primera vista; no obstante para determinadas condiciones atmosféricas se tienen comportamientos regulares que han sido estudiados por la meteorología.

Por otro lado, tenemos otro gas, que llamaremos contaminante, de densidad por lo general distinta a la densidad atmosférica, de temperatura bastante más alta y cuya velocidad con la cual viene inyectado verticalmente a la atmósfera es grande.

Tenemos el problema reducido a un gas contaminante generado por una fuente puntual (la chimenea), el cual se dispersa dentro de otro gas (el atmosférico) cuya dinámica está regida por las leyes de la meteorología, bajo condiciones de un campo externo (campo gravitacional), y bajo condiciones de frontera que pueden ser tan irregulares como lo puede ser la geometría del terreno que se encuentra alrededor de la chimenea.

Todo estos elementos se pueden simular en forma "relativamente" fácil creando un modelo de un gas en red. En este capítulo proponemos un modelo radicalmente diferente para simular la dinámica del transporte y la dispersión atmosférica de contaminantes sobre terrenos complejos. El modelo consiste en un autómata bidimensional con estados de 18 bits que simula el comportamiento de un gas con 2 especies químicas no-reactivas bajo la acción de un campo de fuerza externo.

El fluido que se modeló es muy similar al del modelo de 9V; sin embargo, como iremos viendo más adelante las nuevas variantes agregadas, como por ejemplo el tener dos especies químicas, lo hacen esencialmente diferente e interesante.



Consideremos una red de retículo bidimensional cuadrada  $L$ , con  $N \times N$  sitios y la siguiente colección de vectores:

$$e_\alpha = \begin{cases} \sin\left(\frac{\alpha\pi}{4}\right)u_1 + \cos\left(\frac{\alpha\pi}{4}\right)u_2, & \alpha = 0..7; \\ 0, & \alpha = 8. \end{cases}$$

En este modelo, el estado  $\sigma$  en el sitio  $r$  al tiempo  $t$  está dado por la pareja de 2 números enteros  $S$  y  $E$  en sistema binario. Por lo que tenemos que :

$$\sigma(r, t) = (S(r, t), E(r, t)),$$

donde

$$S(r, t) = \sum_{k=0}^8 S_k(r, t) \cdot 2^k,$$

y

$$E(r, t) = \sum_{k=0}^8 E_k(r, t) \cdot 2^k.$$

Siendo  $S_k$  y  $E_k$  variables booleanas que toman los valores de 0 y 1 para  $k = 0, 1, 2..8$ . La representación geométrica de estos dos números se puede visualizar, como una torre donde cada piso tiene 2 habitaciones (ver figura 6.1).

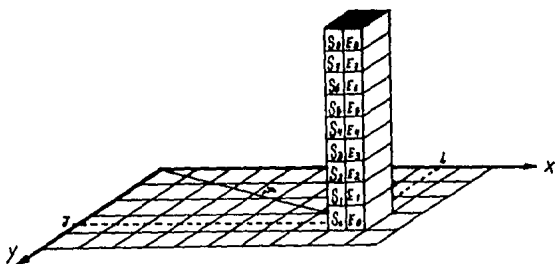


Fig. 6.1. Representación geométrica del estado  $\sigma(r, t)$  en el modelo propuesto.

¿Qué interpretación física le damos a estos dos números? La interpretación usada en este modelo es la siguiente :

$$S_k = \begin{cases} 1, & \text{En el sitio } r \text{ existe una partícula que se mueve} \\ & \text{en la dirección } e_k \text{ con rapidez } c_k. \\ 0, & \text{En el sitio } r, \text{ no existe una partícula que se mueve} \\ & \text{en la dirección } e_k. \end{cases}$$

y

$$E_k = \begin{cases} 1, & \text{Si } S_k = 1 \text{ y la partícula es contaminante.} \\ 0, & \text{Si } S_k = 1 \text{ y la partícula no es contaminante} \\ & \text{ó } S_k = 0. \end{cases}$$

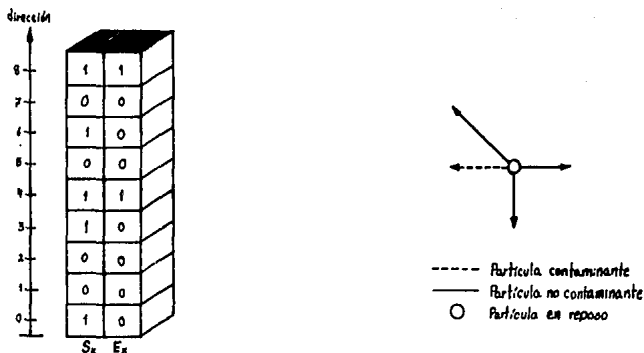


Fig. 6.2. Visualización (a) geométrica y (b) física del estado  $\sigma$ .

siendo las posibles magnitudes de la velocidad  $c_k$  :

$$c_k = \begin{cases} 0, & \text{si } k = 8 \\ 1, & \text{si } k = 0, 2, 4, 6 \\ \sqrt{2}, & \text{si } k = 1, 3, 5, 7. \end{cases}$$

Esta interpretación de las variables  $S_k$  y  $E_k$  implican lo siguiente:

- El sistema está formado por dos tipos de partícula.  $S_k$  nos dice si existe o no partículas en el sitio  $\mathbf{r}$  y, si existe,  $E_k$  se encarga de decirnos de que tipo es: contaminante ó no. Una de estas dos especies representa el aire atmosférico; la otra, el gas formado por los contaminantes (ver figura 6.2).
- Las partículas de cualquiera de las especies puede moverse solamente a lo largo de las direcciones definidas por los vectores  $\mathbf{e}_k$ , con  $k = 0, 1, \dots, 7$  o encontrarse en reposo (es decir moviéndose en la dirección  $\mathbf{e}_8$ ).
- En cada sitio  $\mathbf{r}$  de la redícula pueden encontrarse hasta 9 partículas de las 2 especies, moviéndose en direcciones  $\mathbf{e}_k$  diferentes. En cualquier sitio  $\mathbf{r}$  de la redícula sólo es posible encontrar una y sólo una partícula sin distinción de la especie, moviéndose en una dirección  $\mathbf{e}_k$  dada (Principio de Exclusión).

(d) A partir de un sitio  $r$  de la red, una partícula solamente puede alcanzar uno de los 8 sitios que constituyen los primeros y segundos vecinos del sitio  $r$  o permanecer en reposo en dicho sitio.

La evolución temporal del sistema, al igual que en el modelo de  $9V$ , se implementa en términos de un conjunto de reglas de actualización, que definen la dinámica del modelo. A nivel global, el conjunto de todos los autómatas individuales se representa matemáticamente por la matriz  $\Omega$ .

Lo que denominamos la evolución del autómata celular al tiempo  $t + 1$  es el resultado de la transformación de la matriz  $\Omega(t)$  por un conjunto de operadores determinados por la física del problema :

$$\Omega(t + 1) = F \circ O \circ C \circ T[\Omega(t)].$$

A continuación, vamos a hablar con más detalle de cómo funcionan y cómo se implementan cada uno de estos operadores.

**El operador de Traslación T.** Este operador se encarga de que en un intervalo de tiempo  $\delta t = 1$  todas las partículas de la malla se trasladen al sitio correspondiente indicado por la velocidad de cada una de estas partículas. Al igual que en el modelo de  $9V$ , a nivel de un autómata la regla de actualización viene dada por:

$$\sigma(t + 1) = \sigma(r - v_k, t),$$

más detalladamente

$$\sigma(t + 1) = \sigma(S(r - v_k, t), E(r - v_k, t)).$$

Para toda  $k = 0, 1, \dots, 8$  y todo sitio  $r$  que pertenezca a la malla. Donde  $v_k$  no es mas que la velocidad de las partículas dada por:

$$v_k = c_k e_k.$$

De forma semejante al modelo de  $9V$ , a nivel global, el conjunto de todos los autómatas se puede ver como una matriz muy particular, ya que cada elemento de la misma está constituido por una pareja de números binarios. Esta matriz denotada  $\Omega(t)$  tiene como elementos los  $\sigma(r, t)$ . De aquí que la evolución más simple estaría dada por la translación de las partículas :

$$\Omega(t + 1) = T[\Omega(t)].$$

**El operador de colisión C.** Las partículas de un gas, además de moverse, pueden chocar unas con otras y dispersar sus direcciones de movimiento durante las colisiones. Estas interacciones se traducen en el comportamiento macroscópico de un gas con efecto de viscosidad y difusión. Para introducir estos elementos en nuestro

modelo es necesario incluir en su dinámica reglas de actualización que representen de manera físicamente razonable a las colisiones entre las partículas. Esto significa que estas reglas deberán obedecer los principios de conservación: del número de partículas de cada especie, del momento y de la energía. En el modelo, el operador  $C$  a nivel local (es decir a nivel de un autómata) debe substituir el estado  $\sigma(r, t)$  por otro estado  $\sigma(r, t + 1)$  de tal manera que queden garantizados los principios de conservación mencionados, es decir, de manera que satisfagan las siguientes relaciones :

(i) *Conservación del número de partículas*

$$\sum_{k=0}^8 S_k(r, t + 1) = \sum_{k=0}^8 S_k(r, t),$$

$$\sum_{k=0}^8 E_k(r, t + 1) = \sum_{k=0}^8 E_k(r, t).$$

(ii) *Conservación del momento*

$$\sum_{k=0}^8 H_k(r, t + 1) M_0 v_k + \sum_{k=0}^8 E_k(r, t + 1) M_1 v_k =$$

$$\sum_{k=0}^8 H_k(r, t) M_0 v_k + \sum_{k=0}^8 E_k(r, t) M_1 v_k.$$

(iii) *Conservación de la energía*

$$\sum_{k=0}^8 H_k(r, t + 1) M_0 c_k^2 + \sum_{k=0}^8 E_k(r, t + 1) M_1 c_k^2 =$$

$$\sum_{k=0}^8 H_k(r, t) M_0 c_k^2 + \sum_{k=0}^8 E_k(r, t) M_1 c_k^2.$$

Siendo  $H_k = S_k(r, t)$  XOR  $E_k(r, t)$ ,  $M_1$  la masa de la partícula contaminante y  $M_0$  la masa de la partícula atmosférica. En el modelo más simple se consideran todas las masas igual a la unidad :

$$M_0 = M_1 = 1.$$

Lo cual corresponde físicamente al caso de un gas en el que las dos especies son dinámicamente equivalentes.

Las reglas que definen al operador de colisión-dispersión son en la práctica, implementadas mediante una tabla de actualización en la que cada renglon contiene como primera columna al estado (S, E) de entrada, y como columnas siguientes a todos los estados (S', E') que satisfacen, junto con (S, E), todas las ecuaciones anteriores.

En la figura 6.3 se presenta un ejemplo que ilustra las acciones del operador de colisión-dispersión para el caso en que las masas de las partículas de las dos especies son iguales a la unidad. La tabla de colisiones corresponde a la interacción de 2 y 3 partículas.

La dinámica de las partículas del gas se ve enriquecida con este nuevo operador, el cual nos aproxima un poco más al comportamiento de un gas. Matemáticamente la evolución global se expresa como:

$$\Omega(t+1) = C \circ T[\Omega(t)].$$

**El operador de colisión con obstáculos fijos O.** Para simular la presencia de fronteras en el modelo, cada sitio de la retícula tiene asociada una variable de campo booleana  $B(r)$  cuyo valor indica si existe o no una frontera sólida en cada sitio de la retícula. Así,  $B(r) = 1$  indica que el sitio pertenece a una frontera sólida, y  $B(r) = 0$  indica justamente lo contrario. Cuando una o varias partículas alcanzan un sitio con  $B(r) = 1$ , sufren una colisión con la frontera existente en ese sitio. El efecto de esta colisión puede incluirse en el modelo de diferentes maneras según sea la situación física que se quiera simular. En este modelo, las colisiones de las partículas del gas con las fronteras sólidas pueden ser de los siguientes tipos :

- (a) Reflexión especular
- (b) Inversión completa
- (c) Absorción total y parcial.

En la *reflexión especular* cada partícula que incide sobre una frontera sólida modifica su velocidad de tal manera que se conserva su componente tangencial, mientras que su componente normal solamente cambia de signo. Este tipo de colisiones de las partículas con las fronteras sólidas permiten, a nivel colectivo, la simulación del comportamiento de un fluido que resbala sobre la frontera.

Por otra parte, en la *inversión completa* ocurre que las partículas que chocan con una frontera sufren una inversión en su velocidad; las dos componentes de la velocidad, la tangencial y la normal, invierten su signo. Este modelo de choque con frontera sólidas permite simular, a nivel colectivo, el caso de un fluido que se adhiere a las superficies sólidas; se trata del caso de un fluido viscoso.

Finalmente, el caso de la *absorción total* corresponde a una situación en que toda partícula que llega a una frontera sólida es absorbida completamente por ésta;

Colisión binaria		Colisión triple		

Fig. 6.3.  
Colisión de 2 y 3 partículas

en la *absorción parcial* sólo son absorbidas completamente aquellas partículas que pertenecen a una determinada especie.

La implementación de cualquiera de estas reglas de interacción de las partículas con las fronteras puede realizarse de una manera relativamente sim-

ple en el programa de simulación del modelo.

**El operador de fuerza externa F.** Este operador F, de fuerza externa, ha sido introducido con el objeto de tomar en cuenta efectos gravitacionales tales como la *flotación*. Este operador fue implementado de la siguiente forma: para cada sitio de la malla el operador F encuentra la diferencia  $\delta n = (n_0 - n_1)$  de la densidad de masa de la especie 0 (aire) y 1 (contaminante). Si  $\delta n > 0$ , el momento a lo largo de la dirección Y es incrementado en 1 con una probabilidad proporcional al valor absoluto de  $\delta n$ ; de lo contrario (si  $\delta n < 0$ ) dicho momento se decrementa en 1.

Esta explicación resumida la extendaremos con más detalle en una sección aparte donde se expondrán de una forma más elaborada los efectos de la flotación.

## 6.2 El Problema De Las Condiciones Iniciales

Comenzar a operar nuestro modelo de dispersión y transporte de contaminantes nos enfrenta a la difícil tarea de crear las condiciones iniciales a partir de las cuales evolucionará el sistema. Como vimos en la última sección del capítulo anterior unas ecuaciones significativas para reproducir las ecuaciones de la hidrodinámica son,

$$n = \sum_{k=0}^8 n_k. \quad (6.1)$$

$$\varepsilon = \sum_{k=0}^8 \varepsilon_k n_k. \quad (6.2)$$

$$n\mathbf{v} = \sum_{k=0}^8 \mathbf{v}_k n_k. \quad (6.3)$$

Donde podemos observar que las variables macrocópicas importantes son la densidad  $n$ , la velocidad del viento o velocidad media de las partículas  $\mathbf{v}$  y la temperatura  $T$  del gas, misma que está relacionada con la energía  $\varepsilon$ . Las expresiones explícitas de estas distribuciones nos las proporciona la ciencia de la meteorología, ya sea deduciéndolas teóricamente o bien a partir de relaciones fenomenológicas, en casos más complejos. Los perfiles verticales que se usaron en este modelo fueron,

$$n(z) = n_0 e^{-\alpha z}, \quad (6.4)$$

$$T(z) = T_0 e^{-\lambda z}, \quad (6.5)$$

$$v(z) = v_0 \left( \frac{z}{z_0} \right)^{1/7}. \quad (6.6)$$

Donde todas los valores de las constantes que aparecen en las tres últimas ecuaciones, dependen de observaciones experimentales. A continuación, con el objeto de ir poniendo a nivel microscópico las distribuciones adecuadas de partículas para obtener de este modo las distribuciones macroscópicas dadas por las tres ecuaciones anteriores, nos vamos ayudar de la hipótesis de que existe equilibrio local en el fluido; esto quiere decir que, si hacemos una partición suficientemente fina del espacio y tomamos una vecindad del fluido, vemos que en su interior las propiedades termodinámicas tales como  $n, T$  y  $p$  varían *poco* de un punto a otro en un instante dado, o en otras palabras tenemos que en esa vecindad se ha alcanzado el equilibrio termodinámico. Desde el punto de vista de la mecánica estadística en el interior de esa vecindad existe una distribución de equilibrio  $n_k^0$ , la cual podemos obtener, utilizando el mismo método del capítulo anterior, o sea maximizando la entropía  $s$  dada por la expresión,

$$s = -k \sum_{k=0}^8 \left[ n_k \ln(n_k) + (1 - n_k) \ln(1 - n_k) \right], \quad (6.7)$$

constrañida a las tres ecuaciones subsidiarias 6.1, 6.2 y 6.3.

Como solamente tenemos que las distribuciones de  $n, T$  y  $v$  varían con la altura  $z$ , efectuamos una partición a lo largo de este eje dada por el siguiente conjunto de puntos  $M = \{z_i, i = 0, 1, \dots, m\}$  los cuales se hallan en la vecindad  $i$  correspondiente.

La idea será ir maximizando la entropía con las condiciones subsidiarias ya señaladas y obtener la distribución de equilibrio para cada una de las vecindades, lo cual nos dará la pauta para ir llenándolas de partículas hasta cubrir todo el espacio que nos interesa.

Usando la técnica de los multiplicadores de Lagrange, creamos la función extendida  $s'$  a maximizar :

$$s' = s + \alpha \left[ n - \sum_{k=0}^8 n_k \right] + \beta \left[ \varepsilon - \sum_{k=0}^8 \epsilon_k n_k \right] + \gamma \cdot \left[ n\mathbf{v} - \sum_{k=0}^8 \mathbf{v}_k n_k \right]$$

Del cálculo, sabemos que la condición de máximo viene dada por la relación  $\delta s' = 0$ . Por lo que a continuación aplicando el operador diferencial  $\delta$  a  $s'$  y desarrollando la expresión, obtenemos :

$$\delta s' = - \sum_{k=0}^8 \left[ \delta n_k \ln(n_k) - \delta n_k \ln(1 - n_k) \right] - \alpha \sum_{k=0}^8 \delta n_k - \beta \sum_{k=0}^8 \epsilon_k \delta n_k - \gamma \cdot \sum_{k=0}^8 \mathbf{v}_k \delta n_k.$$

Tomamos en cuenta que tanto  $n, \varepsilon, v$  como  $\alpha, \beta, \gamma$  son constantes y agrupando todos los términos que tienen  $\delta n_k$ , tendremos que :

$$\delta s' = - \sum_{k=0}^8 \left[ \alpha + \beta \epsilon_k + \gamma \cdot \mathbf{v}_k + \ln \left( \frac{n_k}{1 - n_k} \right) \right] \delta n_k.$$



Como pedimos  $\delta s = 0$  para cualquier variación  $\delta n_k$ , concluimos que :

$$\alpha + \beta \epsilon_k + \gamma \cdot \mathbf{v}_k + \ln \left( \frac{n_k}{1 - n_k} \right) = 0.$$

Resultando la distribución de equilibrio  $n_k$  como :

$$n_k = \frac{1}{1 + \exp[\alpha + \beta \epsilon_k + \gamma \cdot \mathbf{v}_k]}. \quad (6.8)$$

Sin embargo, desconocemos los valores de  $\alpha, \beta, \gamma$ . Con el fin de encontrarlos introducimos la expresión anterior de la distribución de equilibrio (6.8), en la expresión de la entropía (6.7), obteniendo así la entropía de equilibrio :

$$s = - \sum_{k=0}^8 \left[ \ln(1 - n_k) - [\alpha + \beta \epsilon_k + \gamma \cdot \mathbf{v}_k] n_k \right].$$

Simplificando esta expresión usando las ecuaciones (6.1), (6.2) y (6.3) obtenemos:

$$s = \alpha n + \beta \epsilon + \gamma \cdot (n \mathbf{v}_k) - \sum_{k=0}^8 \ln(1 - n_k). \quad (6.9)$$

Notemos ahora que la densidad de entropía  $s$  es función de la energía total  $\epsilon$  y no de la energía interna  $e$ . Como posteriormente queremos comparar la expresión (6.9) con la relación de Euler, nos debemos de montar en un sistema de referencia  $O'$  para lograr la independencia del movimiento colectivo de todas las partículas que forman al sistema (Landau, 1970). Este sistema  $O'$  es justamente el que viaja a la velocidad media  $\mathbf{v}$ , y es desde aquí donde a la termodinámica le interesa describir el sistema. Para ello usamos la siguiente transformación de velocidades ( Transformación de Galileo ) :

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{v}_k - \mathbf{v}.$$

De donde deducimos que la relación entre la energía  $\epsilon$  de un sistema de partículas medidas en un sistema inercial cualquiera  $O$  y la energía  $e$  (que no es más que la energía interna) medida en el sistema  $O'$ , es :

$$\epsilon = \frac{1}{2} n \mathbf{v}^2 + e, \quad (6.10)$$

siendo  $e = \sum \epsilon'_k n_k$  y  $\epsilon'_k = \frac{1}{2} u_k^2$

Sustituyendo la expresión (6.10) en la expresión (6.9) y renombrando, ponemos finalmente a la densidad de entropía como función de la energía interna  $e$  :

$$s = \alpha n + \beta e + \frac{1}{2} \beta n \mathbf{v}^2 \gamma \cdot (n \mathbf{v}_k) - \sum_{k=0}^8 \ln(1 - n_k). \quad (6.11)$$

De la termodinámica sabemos que la densidad de entropía  $s$  no es función de la velocidad media  $\mathbf{v}$  del conjunto de partículas que conforman al sistema, sino que depende solamente de  $e$  y  $n$ . Por lo que :

$$\left[ \frac{\partial s}{\partial \mathbf{v}} \right]_{e,n} = 0.$$

Derivando parcialmente la expresión (6.8) con respecto a la velocidad  $\mathbf{v}$ , obtenemos:

$$\beta n \mathbf{v} + n \boldsymbol{\gamma} = 0.$$

De donde resulta :

$$\boldsymbol{\gamma} = -\beta \mathbf{v}. \quad (6.12)$$

Colocando el valor de  $\boldsymbol{\gamma}$  en la expresión (6.11) de la entropía :

$$s = \left[ \alpha - \frac{1}{2} \beta v^2 \right] n + \beta e - \sum_{k=0}^8 \ln(1 - n_k). \quad (6.13)$$

Como hemos constatado, esta última ecuación se ha obtenido estrictamente a partir de principios de mecánica estadística. A continuación se hará una comparación con la ecuación de Euler deducida por la termodinámica:

$$s = -\left(\frac{\mu}{T}\right)n + \left(\frac{1}{T}\right)e + \frac{P}{T}.$$

con la finalidad de encontrar cuales son los parámetros termodinámicos (macroscópicos), relacionados con los dos coeficientes restantes  $\alpha, \beta$  :

$$\alpha - \frac{1}{2} \beta v^2 = -\left(\frac{\mu}{T}\right). \quad (6.14)$$

$$\beta = \left(\frac{1}{T}\right). \quad (6.15)$$

Por último, para completar la deducción de las distribuciones de equilibrio debemos ver cómo nos queda el término  $\xi = \alpha + \beta e_k + \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{v}_k$  de la expresión (6.8), sabiendo el valor de  $\boldsymbol{\gamma}$  (expresión 6.12).

$\xi$  visto desde un sistema inercial  $O$  :

$$\xi = \alpha + \beta e_k + \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{v}_k,$$

$$\xi = \alpha + \beta \left[ \frac{1}{2} v_k^2 \right] - \beta \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}_k,$$

$$\xi = \alpha - \frac{1}{2} \beta v^2 + \frac{1}{2} \beta [v_k - v]^2,$$

$\xi$  visto desde el sistema inercial  $O'$ :

$$\xi = \left[ \alpha - \frac{1}{2} \beta v^2 \right] + \beta \epsilon_k,$$

finalmente :

$$\xi = -\left(\frac{\mu}{T}\right) + \left(\frac{1}{T}\right) \epsilon'_k.$$

De aquí que la expresión final de la distribución de equilibrio  $n_k^0$  sea :

$$n_k^0 = \frac{1}{1 + \exp \left[ \left(\frac{\mu}{T}\right) [-\mu + \epsilon'_k] \right]}. \quad (6.16)$$

Cabe mencionar que hasta ahora no hemos aún tratado el *problema* de las condiciones iniciales. Una vez obtenidos los valores de las distribuciones  $n_k^0$ , con la finalidad de comprobarlos, se substituyeron en las expresiones (6.1), (6.2), (6.3) obteniendo como resultado, tanto para la expresión (6.1) como para (6.2), que el lado derecho de la ecuación reproducía los valores de  $n$  y  $\epsilon$ ; sin embargo de la expresión (6.3) nunca obtuvimos la misma velocidad  $v$  que dimos al principio, por lo que nos encontramos ante el difícil problema de que las  $n_k^0$  de equilibrio no cumplan la identidad (6.3).

Lo interesante, sin embargo, fué que si resolvíamos el sistema, como si el mismo ya tuviera una velocidad media  $v$  igual a cero entonces las  $n_k^0$  que se obtenían arrojaban a través de las expresiones (6.1), (6.2) y (6.3) los mismos valores de  $n$ ,  $\epsilon$ ,  $v$  que se daban al principio, concluyendo de aquí, que el problema se presentaba por tratar de describir las propiedades del sistema (en este caso las distribuciones  $n_k^0$  de equilibrio) desde un sistema inercial  $O'$  en movimiento.

El problema llega a ser de fondo para los autómatas celulares ya que está en juego un principio fundamental de la física no relativista : El Principio de Invariancia Galileana. En efecto queda como un problema abierto el responder a la siguiente pregunta : *Las propiedades físicas (en nuestro caso de la mecánica estadística) dentro de un autómata celular ¿son invariantes ante una transformación de Galileo ?* En el caso de no cumplirse la invariancia, queda como una obligación de futuras investigaciones abordar esta complicada y estimulante tarea con la finalidad de encontrar *para un autómata*, cuales son las transformaciones de coordenadas, entre dos sistemas inerciales, tales que las propiedades físicas permanezcan invariantes.

Por ser éste un problema de futuras investigaciones y con el fin de no desviarnos del objetivo de esta tesis "*le dimos la vuelta al problema*": lo resolvimos presuponiendo que el gas no se encontraba en equilibrio local sino "*ligeramente*" fuera de equilibrio, de manera de aplicar teoría de perturbaciones a primer orden:

$$n'_k = n_k^0 + \delta n_k. \quad (6.17)$$

Siendo  $n'_k$  la nueva distribución fuera del equilibrio,  $n_k^0$  distribución de equilibrio que ya sabemos como obtener (expresión (6.16)) y  $\delta n_k$  la perturbación que debemos hallar.

Pedimos que las nuevas distribuciones  $n'_k$  cumplan :

$$n = \sum_{k=0}^8 n'_k, \quad (6.18)$$

$$\varepsilon = \sum_{k=0}^8 \varepsilon_k n'_k, \quad (6.19)$$

$$n\mathbf{v} = \sum_{k=0}^8 \mathbf{v}_k n'_k, \quad (6.20)$$

Desarrollando (6.18) tenemos que :

$$n = \sum n_k^0 + \sum \delta n_k = n^0 + \delta n,$$

siendo

$$\delta n = \sum \delta n_k. \quad (6.21)$$

Desarrollando (6.20) vemos que :

$$n\mathbf{v} = \sum \mathbf{v}_k n_k^0 + \sum \mathbf{v}_k \delta n_k.$$

de donde

$$n\mathbf{v} = \sum \mathbf{v}_k \delta n_k. \quad (6.22)$$

Con el objeto de resolver el sistema de ecuaciones (6.21) y (6.22) suponemos  $\delta n_k = 0$  para todas las direcciones excepto para 3 direcciones escogidas al azar (arbitrariamente se eligió  $k = 0, 1, 2$ ), quedando el siguiente sistema por resolver :

$$\begin{pmatrix} \delta n \\ n v_x \\ n v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta n_0 \\ \delta n_1 \\ \delta n_2 \end{pmatrix}.$$

Un sistema lineal de 3 ecuaciones, con 3 incógnitas  $\delta n_0$ ,  $\delta n_1$  y  $\delta n_2$ .

Finalmente, es importante mencionar que, pese a que hallamos un problema de fondo inherente a los modelos de autómatas celulares, con este último método se resuelve el problema de la inicialización dentro del modelo de dispersión de contaminantes, quedando el modelo capacitado para manejar condiciones iniciales (perfiles de densidad, temperatura y viento) tan arbitrarias como las proporcionadas por los estudios meteorológicos.

### 6.3 Efectos Gravitacionales de Flotación

La simulación de la gravedad dentro de un gas discreto es sumamente compleja. Si bien estamos modelando fluidos, en nuestro caso dos de diferentes densidades y no-reactivos (el aire y el contaminante), sabemos desde hace mucho tiempo que los efectos gravitacionales se manifiestan con el surgimiento de una nueva fuerza llamada flotación, la cual actúa sobre el fluido de menor densidad inmerso en el de mayor densidad. Siendo el sentido de esta fuerza siempre opuesto al de la gravedad, es decir si la gravedad apunta hacia abajo la flotación apunta hacia arriba.

La tarea que nos propusimos fue simular la fuerza de flotación, por ser su implementación más sencilla. La expresión matemática para este efecto nos la sugiere el Principio de Arquímedes, principio que como en la actualidad lo entendemos, no pertenece a la extensa lista de los fundamentales, ya que es deducido de las leyes de Newton. No obstante, de una forma sencilla nos explica qué le pasa a un cuerpo sumergido en un fluido de distinta densidad, sea este agua (como el océano) o un gas (como la atmósfera). No olvidemos en efecto que lo que nosotros estamos manejando son partículas contaminantes (un gas) sumergidas en la atmósfera (otro gas).

La ley de Arquímedes nos dice : *Un cuerpo total o parcialmente sumergido en un fluido es empujado hacia arriba con una fuerza  $F_b$ , denominada fuerza de flotación, que es igual al peso del fluido desplazado por dicho cuerpo* (figura 6.4).

Aplicando la segunda Ley de Newton a un cuerpo sumergido tenemos

$$M_c \frac{dv}{dt} = P_c + F_b.$$

Quitándole el carácter vectorial a la ecuación precedente trabajamos solamente con una ecuación escalar, ya que tanto el peso como la flotación se encuentran sobre una misma línea:

$$M_c \frac{dv}{dt} = -M_c g + \rho_f V_c g,$$

siendo  $\rho_f$  la densidad del fluido donde el cuerpo se encuentra sumergido,  $V_c$  el volumen sumergido del cuerpo y  $g$  la aceleración de la gravedad. Desarrollando la expresión anterior :

$$\rho_c \frac{dv}{dt} = (\rho_c - \rho_f) g.$$

siendo  $\rho_c$  la densidad del cuerpo.

Por lo tanto, si un cuerpo asciende o desciende depende de las densidades respectivas. Notemos que esta regla macroscópica la podemos extender a un elemento de volumen que por comodidad consideraremos unitario. Notemos que

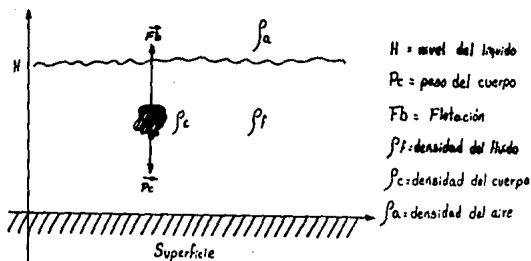


Fig. 6.4. Diagrama de fuerzas aplicado a un cuerpo sumergido.

lo que estamos haciendo es reducir nuestro cuerpo a niveles más pequeños que nuestro volumen unitario y es aquí donde estamos aplicando la ley de Arquímedes:

$$\rho_c = n_c / \text{volumen unitario} = n_c,$$

donde  $n_c$  es el número de partículas que forman el cuerpo y están dentro del volumen unitario. Así tenemos:

$$\rho_f = n_f / \text{volumen unitario} = n_f,$$

siendo  $n_f$  el número de partículas del fluido que están dentro del volumen unitario. Por lo que a nivel local se cumple que :

$$n_c \frac{dv}{dt} = (n_f - n_c) g.$$

Esta relación fué la que básicamente se utilizó en el modelo, donde ahora cantidades tales como  $n_c$  representan el número de partículas contaminantes en el sitio y  $n_f \equiv n_a$  el número de partículas del fluido (aire) en el sitio. De aquí que se presentara la siguiente situación :

$$n_c \frac{dv}{dt} = (n_a - n_c) g \left\{ \begin{array}{l} \text{Si } n_c < n_a \text{ la partícula contaminante asciende} \\ \text{Si } n_c = n_a \text{ la partícula contaminante permanece} \\ \text{en la misma posición} \\ \text{Si } n_c > n_a \text{ la partícula contaminante desciende} \end{array} \right.$$

La fuerza de flotación además tiene una intensidad que depende del valor absoluto de la diferencia  $(n_a - n_c)$ . La gran ventaja de simular la flotación en vez de la

gravedad, como regla de actualización  $F$  (recordemos que es el operador de fuerza externa), es que ésta última no se aplica más que a los sitios donde se encuentran partículas de ambas especies, lo que evidentemente hace más rápida la evolución del autómata celular.

A continuación mostraremos diferentes resultados obtenidos utilizando este modelo. Algunos no tienen que ver directamente con dispersión de contaminantes, sin embargo nos son de utilidad pues nos muestran que este modelo con temperatura se comporta adecuadamente en ciertos casos especiales. Por lo demás es importante comentar que aunque en este trabajo no se muestra teóricamente que el autómata celular de  $9V$  se comporta como un fluido viscoso Newtoniano( i.e. que obedece las ecuaciones de Navier-Stoke ), las simulaciones realizadas, mismas que se presentan en el siguiente capítulo, muestran que el sistema es capaz de simular el comportamiento de tales fluidos como, por ejemplo, los flujos de Poiseuille y Couette.

## SIMULACIONES Y RESULTADOS

En este capítulo presentamos los resultados de cuatro simulaciones diferentes. Las primeras tres nos muestran que el modelo definido en el capítulo anterior se comporta, al menos cualitativamente, como esperábamos al pasar un fluido a través de un obstáculo fijo, mientras que la cuarta, muestra el levantamiento de la pluma y su dispersión atmosférica.

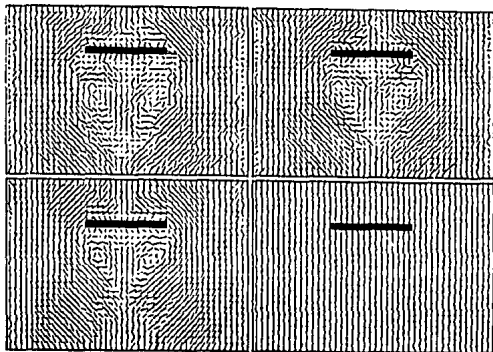


Fig. 7.1. Secuencia del fluido pasando una barra sólida

La figura 7.1. muestra una secuencia del campo de velocidades de la simulación de un flujo alrededor de una barra. Se utilizó una retícula con  $300 \times 200$  sitios, siendo restringido el modelo solamente para el caso de partículas de una sola especie. El flujo se creó, colocando partículas al azar con un número de ocupación promedio de 2.7 partículas por sitio, en dirección vertical. Las partículas que abandonan la retícula por la parte superior son reinyectadas al sistema por la parte inferior en sitios elegidos al azar y con un movimiento hacia arriba en promedio.



Esto se hizo así para mantener constante la densidad media del gas y conseguir así un flujo que evolucionara hacia un régimen estacionario. El operador obstáculo fué definido en el otro lado de la retícula y sobre la frontera del mismo fue definida la condición de inversión completa con el fin de simular el flujo de un fluido viscoso. La secuencia corresponde a 2000 pasos temporales de evolución del autómata. El campo de velocidades fue construido a partir de las funciones de distribución experimentales definidas como el promedio de las variables  $S_k$  sobre las celdas, conteniendo  $7 \times 7$  sitios.

Esta secuencia muestra el desarrollo de 2 vórtices, detrás de la barra sobre la que incide el flujo modelo, los cuales son esperados en este fluido para algún número de Reynolds. Notemos también que la velocidad del fluido se hace cero en las fronteras sólidas.

Dos simulaciones muy recientes (Salcido y Retchman, 1993 y Salcido, Merino y Saldaña, 1993) se han efectuado usando un modelo de *lattice gas* con propiedades termodinámicas. En la primera, utilizando el modelo propuesto se simuló un fenómeno de difusión en un medio poroso bidimensional aleatorio. Para los casos considerados, la difusión es normal y puede ser descrita por una simple aproximación de un campo promedio.

En la segunda, se modeló un gas con una sola especie de partículas con la finalidad de reconstruir un campo de viento sobre un terreno complejo. Con ello se trató de estimar el comportamiento del viento, utilizando datos meteorológicos obtenidos de mediciones en algunos sitios dentro del dominio seleccionado. Para probar este modelo se efectuaron tres simulaciones distintas. Las primeras dos mostraron que el gas discreto se comporta como lo predicen las ecuaciones de Naviers Stokes para el caso del flujo bidimensional dependiente del tiempo de Couette y Poiseuille, mientras que la tercera mostró el proceso de reconstrucción del campo de viento sobre un terreno complejo.

Para el flujo bidimensional de Couette se utilizó una malla bidimensional de  $100 \times 100$  sitios. Las funciones iniciales de distribución del gas de partículas fue calculado asumiendo al gas en reposo con una densidad promedio de 1.43 partículas por sitio y una temperatura promedio de  $293 \text{ }^\circ\text{K}$ . El gas fué limitado por dos líneas rectas en  $y = 0$  (base de la malla) y  $y = 100$  (vertice de la malla). El operador de frontera B fue definido en la base de la malla de tal forma que modelara una frontera estacionaria rígida. Las primeras cinco filas superiores de sitios de la malla fueron considerados como puntos de control donde se impuso una velocidad estacionaria horizontal promedio de 0.2 (en las unidades naturales del *lattice gas*, que en el caso de la velocidad serían pasos temporales entre pasos espaciales). Por el contrario, en el lado derecho y izquierdo de la malla se impusieron condiciones de frontera periódicas. Diez simulaciones de 10000 pasos temporales cada una se efectuaron con las mismas condiciones iniciales y de frontera. Los perfiles de las velocidades promedio  $v_x(y)$ , para los tiempos  $t = 200, 600, 1000, 2000, 4000, 6000, 8000$  y  $10000$  son mostrados en la figura 7.2.

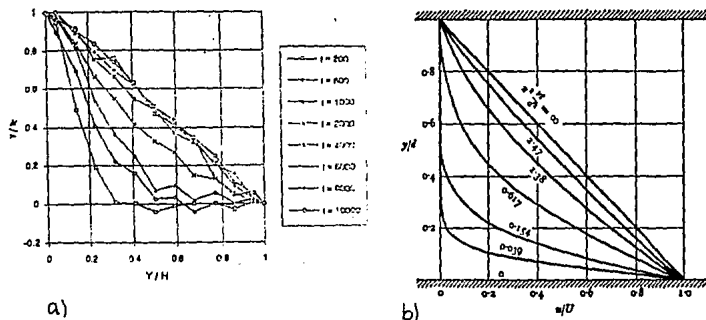


Fig. 7.2.a) La evolución de un flujo estacionario en reposo entre dos planos paralelos en movimiento relativo. b) Lo mismo, pero en un fluido continuo (Batchelor, 1967)

En ella podemos observar los efectos que producen las condiciones de frontera en la parte inferior, al parecer insignificantes al principio, gradualmente influyen en la variación de la velocidad. Como es predicho por las ecuaciones de Navier-Stokes (Batchelor 1967), la velocidad en este modelo tiende asintóticamente a la velocidad dada por un flujo estacionario entre dos planos rígidos en movimiento relativo (flujo de Couette).

El segundo conjunto de simulaciones estudió la relajación al equilibrio del flujo bidimensional entre dos fronteras rígidas rectilíneas. Nuevamente se usó una malla de  $100 \times 100$ , pero las condiciones iniciales y de frontera fueron modificadas. Las funciones de distribución iniciales fueron calculadas presuponiendo un flujo horizontal con velocidad uniforme de 0.15. La densidad promedio inicial del gas fue de 2.0 partículas por sitio y la temperatura promedio de 10.0. El operador de frontera B fue definido en la parte superior e inferior de tal forma que se simulara un flujo a lo largo de una canal bidimensional.

Se impusieron condiciones periódicas de fronteras en los otros dos lados de las fronteras, de modo que no se hiciera presente un gradiente de presiones en el canal y la evolución del sistema estuviera influenciada solamente por las condiciones de frontera rígidas y estacionarias. Los perfiles promedio de las velocidades para diferentes tiempos se muestran en la figura 7.3. donde podemos observar como el perfil parabólico de velocidades disminuye conforme pasa el tiempo, mostrándonos con ello que el momento y la energía fueron disipados debido a las colisiones de las partículas del gas con las fronteras sólidas del sistema.

Por último, en la figura 7.4, se presenta una secuencia del campo de velocidades obtenido de la simulación del flujo del viento sobre un terreno complejo.

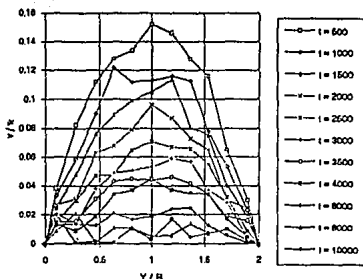


Fig. 7.3. Relajación hacia el equilibrio de un flujo uniforme entre dos planos paralelos estacionarios

En este caso se usó una malla con  $300 \times 200$  sitios. Inicialmente, el gas estaba en reposo con una densidad uniforme,  $n = 2.0$ , y temperatura,  $T = 10.0$ , en promedio. En la parte inferior de la malla fue definido un dominio de sitios prohibidos para las partículas del gas con el objeto de representar algunas complejidades del terreno tales como construcciones y montañas.

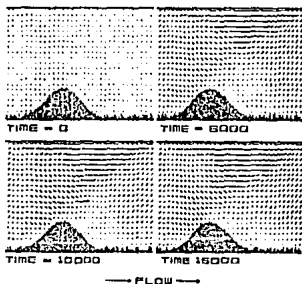


Fig. 7.4. Reconstrucción del campo de vientos sobre un terreno complejo.

El movimiento del gas fue manejado por las primeras dos hileras superiores de sitios de la malla, mismas que fueron consideradas puntos de control, donde fue

impuesta una velocidad estacionaria horizontal de 0.20. Las partículas que salían del lado derecho de la malla fueron introducidas en el lado izquierdo con la misma velocidad pero cambiando aleatoriamente su posición vertical. Se obtuvo un viento casi estacionario después de 15000 pasos de tiempo en la evolución del autómata. Como era esperado, se produce una zona de estancamiento en la parte frontal de la pequeña montaña, mientras que en la parte opuesta se observa claramente, una onda turbulenta. La figura 7.5. muestra una secuencia del levantamiento de una pluma y el fenómeno de dispersión usando el modelo de gas discreto, aquí propuesto:

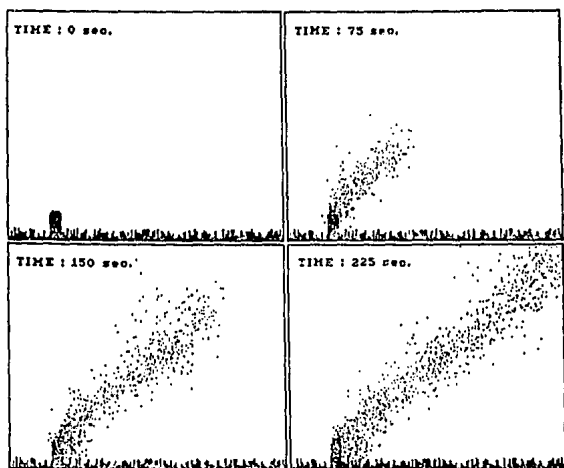


Fig. 7.5. Simulación del levantamiento de una pluma y fenómeno de dispersión de contaminantes.

Se utilizó una retícula de  $300 \times 300$  sitios. La distribución inicial de las partículas, que representan al aire atmosférico, fue calculada presuponiendo *condiciones neutrales* con una temperatura de superficie de  $295 \text{ }^\circ\text{K}$  y un perfil de velocidades del viento dado por:

$$v(z) = \left(1.0 \frac{m}{s}\right) \left[\frac{z}{10.0 m}\right]^{1/7}$$

La evolución de cada paso temporal del autómata fué equivalente a 0.5 s. mientras que los intervalos de la malla, entre un nodo y otro fué de 4 mt. El sistema se dejó evolucionar unos 500 pasos temporales antes que la chimenea empezara a emitir el gas contaminante. La altura de la chimenea fue de 100 mt., y tanto la velocidad de salida como la temperatura fueron de  $7\text{ m/s}$  y  $423\text{ }^\circ\text{K}$ , respectivamente. La masa molar del contaminante fue 28. Cada cuadro de la figura anterior representa una área de  $945 \times 1200$  mt. El operador obstáculo (para las condiciones de inversión completa) fué definido sobre las fronteras sólidas, las cuales se incluyeron en la parte inferior del gas. Se mantuvo un viento estacionario mediante la imposición de algunas condiciones de frontera en la parte superior y en el lado izquierdo de la malla, de tal forma que los perfiles atmosféricos iniciales, fueran mantenidos en las primeras 9 columnas de los sitios de la malla, durante la simulación.

Descamos comentar rápidamente que los resultados obtenidos son representativos de una atmósfera neutral aunque en el próximo capítulo haremos una crítica más extensa de los mismos. Queremos recalcar nuevamente que los resultados son fundamentalmente cualitativos.

---

## CONCLUSIONES

---

En este trabajo, hemos revisado la problemática de la contaminación atmosférica poniendo de relieve su complejidad y las principales dificultades que se encuentran al realizar un estudio de modelación de los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera.

El problema es extraordinariamente complejo por muchas razones, principalmente porque su régimen dinámico es turbulento e involucra escalas espaciales que van desde milímetros hasta cientos de metros. Esto impide la solución numérica, honesta, y limpia de las ecuaciones diferenciales que gobiernan los fenómenos atmosféricos del transporte y la dispersión.

Para el estudio de la dispersión de contaminantes atmosféricos existen numerosos modelos que han sido desarrollados por investigadores de diferentes partes del mundo. Muchos de ellos han sido evaluado por la EPA, la cual ha elaborado una selección de modelos que considera adecuados para el estudio de estos problemas, clasificándolos en preferidos y alternativos.

Casi todos los modelos preferidos por la EPA son Gaussianos o Gaussianos Híbridos y a pesar de todas sus deficiencias desde el punto de vista físico, todos ellos pueden proporcionar una gran cantidad de información útil para la definición de estrategias para el control, mejoramiento y conservación de la calidad del aire. Por lo demás, el uso de estos modelos requiere de información experimental sobre la micrometeorología de la zona de interés la cual no siempre se encuentra disponible.

Los mejores modelos de la EPA requieren de un conocimiento a priori de la capacidad dispersiva de la atmósfera, lo cual significa conocer los mecanismos del transporte turbulento de masa, momento y energía dentro de la capa límite planetaria de la atmósfera. Este es un problema que actualmente se está resolviendo a través de diferentes esquemas de parametrización de la turbulencia atmosférica, los que descansan sobre una base experimental. Desgraciadamente, en México no existen estaciones meteorológicas equipadas con sensores de turbulencia, y ni siquiera con una configuración instrumental mínima que permita la estimación de los parámetros turbulentos de manera indirecta.

En los capítulos 2 y 3 de este trabajo hemos intentado resumir brevemente los aspectos meteorológicos importantes en el estudio de la dispersión de contaminantes atmosféricos, así como los diferentes métodos de modelación matemática que en la actualidad se están usando para estos estudios.

Todos estos esfuerzos son importantes y valiosos, pero muy convencionales

desde el punto de vista del tratamiento dinámico de los fenómenos atmosféricos del transporte y la dispersión. En la actualidad, nuevos métodos y técnicas de simulación del comportamiento de los fluidos se están desarrollando en base a sistemas dinámicos discretos, como en el caso de los gases en redes.

En este trabajo, particularmente en los capítulos 6 y 7, hemos presentado el desarrollo de un modelo alternativo para la simulación de los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes, con base en los métodos de los autómatas celulares y los gases en redes.

El modelo que hemos desarrollado consiste en implementar un modelo de gases en redes con la finalidad de simular los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes atmosféricos.

Con este modelo hemos realizado varias simulaciones de prueba, algunas de las cuales fueron efectuadas con el objeto de probar si el modelo se comportaba, al menos, cualitativamente como un fluido. Dos simulaciones mostraron que el gas en red se comporta similarmente a las ecuaciones de Naviers-Stokes para el caso del flujo bidimensional dependiente del tiempo de Couette y Poiseuille, mientras que la tercera, mostró el proceso de reconstrucción del campo de viento sobre un terreno complejo. En la cuarta prueba se simuló la elevación y dispersión de una pluma de gases contaminantes para el caso de una atmósfera en condiciones neutrales.

Los resultados obtenidos son positivos en cuanto a las tres primeras simulaciones, ya que reproduce el comportamiento cualitativo de un fluido real: mientras que en la simulación de la pluma y su dispersión de contaminantes pudo observarse que la distribución de contaminantes en la pluma evoluciona hacia un perfil Gaussiano, y que el efecto de "downwash" se presenta de manera natural en el comportamiento del modelo.

Queremos establecer que dentro, de los muchos problemas que este modelo no ha resuelto, los más significativos son :

(i) *El problema de las condiciones iniciales.*

Como observamos anteriormente, el problema de fondo que queda por estudiar es comprobar rigurosamente si los fenómenos físicos modelados por el autómata son invariantes ante una transformación de Galileo. De no ser así, nos vemos ante la necesidad de encontrar cuáles son las transformaciones válidas para que los fenómenos físicos no dependan del sistema de referencia dentro del modelo del autómata. Una vez conocidas estas nuevas transformaciones, es de obligación compararlas con las transformaciones de coordenadas físicamente aceptables, con el objeto de conocer hasta qué punto puede ser válida la modelación de la física por los autómatas celulares.

(ii) *El problema de la gravedad.*

En el modelo, el efecto físico simulado fue el de la flotación, que no es más que una consecuencia del campo gravitacional dentro de una mezcla de fluidos de distintas densidades. Como en nuestro modelo tratamos en la medida de lo posible de hacer una simulación microscópica de la dinámica de un gas a partir de primeros principios, con respecto al campo gravitacional no cumplimos este objetivo. Faltó realizar una simulación más realista de la gravedad a partir de primeros principios.

Por ser este un proyecto sumamente complejo, se prefirió resolver el problema de una forma más sencilla simulando el efecto que produce la gravedad sobre una mezcla de gases: el efecto de flotación.

(iii) *El problema de las masas de las especies.*

En nuestro modelo, las masas de las especies las consideramos fueron consideradas iguales. De no ser así, la tabla de colisiones se haría enorme y por lo tanto el modelo perdería velocidad. Incluso en máquinas tan poderosas como la RISK, la evolución del modelo se haría extremadamente lento.

El efecto, de que los gases contaminantes puedan ser más pesados que el aire, los toma en cuenta la flotación. Sin embargo un modelo más completo debería tomar en cuenta el difícil problema de implementar una tabla de colisiones para un gas formado por partículas de distinta masa, sin que la rapidez del modelo se vea afectada.

(iv) *El problema de los gases reactivos.*

El modelo que proponemos, no toca el complejo problema de las transformaciones químicas, las cuales pueden llegar a ser fundamentales en la simulación de cierto tipo de contaminación, como del *smog fotoquímico* (óxidos de nitrógeno,  $NO_x$ ).

(v) *El problema teórico de la dinámica del modelo.*

Este problema es sumamente complejo, pues plantea encontrar las ecuaciones dinámicas del modelo a nivel macroscópico a partir del comportamiento microscópico del autómata, y posteriormente efectuar una comparación con las ecuaciones de Naviers-Stokes, mismas que reflejan el comportamiento de un fluido real.

(vi) *Problema de las mediciones en el modelo.*

Existe el problema de efectuar las mediciones de las propiedades termodinámicas tales como la presión P, la temperatura T y el potencial electroquímico  $\mu$  una vez que se han difundido los contaminantes en la atmósfera. Como ya vimos anteriormente, para colocar las distribuciones iniciales de las partículas en el gas aplicamos el método de perturbación a primer orden, puesto que el gas lo consideramos ligeramente fuera del equilibrio.



Esta suposición hace que las propiedades termodinámicas, una vez que el autómata ha evolucionado, no sean posible medirse (al menos hoy en día) con las herramientas que actualmente poseemos. Si queremos que nuestro modelo sea cuantitativo es de prioridad resolver el problema (i). Mientras esto no se haga el modelo seguirá siendo fundamentalmente cualitativo.

De todo esto podemos concluir:

- a) Respecto del modelo desarrollado, los resultados, pese a ser cualitativos aún, son alentadores ya que reproducen algunos de los fenómenos esperados producidos en la dispersión de contaminantes.
- b) Respecto a la idea de usar gases en redes para los problemas de contaminación atmosférica, podemos decir que todavía existen bastante problemas inherentes a los autómatas celulares, como pudimos constatar para el caso del problema de las condiciones iniciales. Sin embargo, conforme vaya evolucionando la teoría de los gases en redes habrán más alternativas para seguir desarrollando simulaciones de este tipo en los problemas de contaminación.
- c) Respecto al trabajo que queda por hacer en esta dirección, podremos decir que es inmenso; por ejemplo el modelo que se desarrolló se encuentra todavía en etapa de evaluación, lo cual implica la realización de muchas pruebas para ver los límites de su aplicabilidad. Por otro lado, se tienen que resolver las numerosas dificultades antes mencionadas que nos encontramos en el camino, lo cual implica un esfuerzo y tiempo considerable. Por último, no hay que olvidarse de la parte teórica de los gases en redes, ya que solamente cuando tengamos una teoría sólida con respecto a ellos tendremos una mayor comprensión de las posibilidades de este tipo de modelación para los fenómenos naturales.
- d) Respecto a los gases en redes en general, es una alternativa de simulación para dinámica de fluidos que se ha venido desarrollando recientemente con resultados sorprendentes, ya que se logra evitar resolver las ecuaciones diferenciales de la hidrodinámica. Sin embargo, la discretización de los parámetros como velocidad, espacio y tiempo ha llevado a problemas teóricos importantes, los cuales tendrán que ser estudiados en un futuro cercano.

Resumiendo todas estas ideas, creo que es prematuro en este momento dar un juicio acertado en cuanto a la validez de esta línea de investigación, ya que por lo expuesto anteriormente, nos percatamos que falta todavía mucho camino por recorrer. Hacia dónde llevarán todos estos esfuerzos, nadie lo puede predecir con certeza; sin embargo, no debemos olvidar que la tecnología computacional avanza a pasos de gigante, lo cual nos puede brindar en un futuro cercano gratas sorpresas, en particular, en el área de las simulaciones de fenómenos físicos por computadora que son inimaginables hoy en día.

---

## APENDICE

---

### *downwash:*

Término en inglés con el que se denota al reflujó de gas contaminante que se crea a un costado de la chimenea y abajo de la dirección de la pluma. En efecto se crea un vórtice pequeño de gas contaminante que baña el piso y las paredes de la chimenea en una vecindad cercana a la misma, después de que ésta lleva emitiendo durante un cierto tiempo.

### *entrainment:*

Capa o estrato que se encuentra situado en la parte superior de la capa de mezcla, y cuya situación atmosférica es estable y se comporta como una barrera que impide el ascenso de los vientos de aire caliente ascendente (thermals).

### *ensemble:*

Existen un gran número de puntos  $\Gamma_n = (x_1, v_1, \dots, x_n, v_n)$  en el espacio fase (espacio de coordenadas y de velocidades), es decir un gran número de configuraciones de nuestro sistema que son compatibles con los valores del número limitado de variables que estamos en libertad de especificar. Estas consideraciones, condujeron a Gibbs a proponer que en vez de considerar como sujeto de interés un sólo sistema dinámico, deberíamos estudiar las propiedades promedio de una colección o "ensamble" de sistemas, todos idénticos respecto a las variables macroscópicas generales que pueden ser especificadas, pero cuya distribución en el espacio fase no se encuentra especificado de otro modo (Dunderstam y Martin, 1983).

### *I.M.E.C.A.:*

Índice Metropolitano de la Calidad del Aire que actualmente se utiliza en la zona metropolitana de la ciudad de México (ZMCD). El IMECA aplica el índice de 100 al valor correspondiente a la norma de la calidad del aire para cada uno de los contaminantes (es decir las concentraciones que se han reportado que no producen daño a la salud humana); y de este valor se tiende una línea recta hasta el valor de 500, que corresponde al mismo índice PST (ver en este mismo apéndice). El procedimiento de aplicación del IMECA consiste en determinar en tiempo real los valores de monitoreo de una serie de estaciones (un total de 25 en la ZMCD) agrupadas en cinco zonas "representativas" de la actividad urbano-industrial. Para cada zona se toma el promedio aritmético de cada contaminante, y el valor máximo resultante de cada zona se utiliza para reportar la calidad del aire aplicando la función lineal respectiva. De esta forma solo se reporta el máximo por

zona (CNDH, 1992).

**P.S.T.:**

El PST (Pollution Standard Index) es el índice de la calidad del aire utilizado en los Estados Unidos. Generalmente se contruye una función segmentada por el índice de calidad. En el eje de las "x's", se establece la escala de concentraciones de contaminantes en valores reales (parte por millón ó microgramos por metro cúbico); en el eje de las "y's" se fija el índice, el cual es una escala arbitraria que generalmente va de 500 a más. Los puntos de quiebre ( $a_i, b_i$ ) de la línea segmentada, representan los puntos críticos de evaluación. Por ejemplo, es común que sea asignado un valor de índice  $a_3 = 100$ , a las concentraciones  $b_3 = [x]$ , siendo esta concentración la que equivale a la norma de calidad de aire para el contaminante en cuestión.

Esto es, cada par de ( $a_i, b_i$ ), relaciona un punto del índice de calificación con una concentración por arriba del cual se tienen evidencias de algún posible efecto de la salud para el contaminante evaluado. Hay que subrayar que los valores de concentración son dependientes totalmente del tiempo de exposición. De esta forma, los índices calificarán la calidad del aire a partir de datos de monitoreo reales obtenidos en una zona de interés (CNDH, 1992).

**smog:**

Palabra de origen inglesa derivada de dos términos: smoke -que significa humo- y fog- que quiere decir niebla-. Este vocablo se popularizó a partir de los años cincuenta en que la ciudad de Londres tenía un alto índice emisiones de contaminantes y que aunado a la espesa niebla que frecuentemente cubría la ciudad en épocas invernales, impedían que se dispersaran los mismos.

**temperatura potencial:**

La temperatura potencial es un parámetro importante que se define a partir de la relación entre la presión y la temperatura absoluta en condiciones adiabáticas. Tal relación puede escribirse como sigue

$$T_o = T \left( \frac{p_o}{p} \right)^\alpha,$$

donde  $p_o$  y  $T$  son los valores de la presión y la temperatura del aire en algun estado de referencia y  $\alpha = R/c_p$ . En estas condiciones, si la presión de referencia se toma como el valor de la presión atmosférica al nivel medio del mar (usualmente igual a 1000 mbar), entonces la ecuación anterior define un parámetro

$$\Theta = T \left( \frac{1000}{p} \right)^{R/c_p},$$

donde  $R/c_p$  resulta igual a 0.286 y la presión  $p$  se expresa en mbar. Este parámetro se conoce como la *temperatura potencial*. En otras palabras, la temperatura potencial de una masa de aire a la temperatura absoluta  $T$  y a

la presión  $p$  es la temperatura final que esta masa de aire tendrá una vez que sea llevada adiabáticamente desde la presión  $p$  hasta la presión de referencia de 1000 mbar (Salcido, Sozzi y Alvaro, 1993).

---

## BIBLIOGRAFIA

---

- Alfonso Marcelo, Eduard Finn: Fundamentos cuanticos y estadísticos. Argentina: México, Addison-Wesley, 1986, 533-534.
- Baas A.F, H.van Dop, F.T. Niuwstand: An Application of the Langevin equation for inhomogeneous conditions to dispersion in a convection boundary layer. *Quarterly J. Roy. Meteor. Soc.*, **112** (1986) 165-180
- Batchelor, G.K.: An Introduction To Fluid Dynamics, Cambridge University Press, Cambridge, 1967. pp. 190-193.
- Briggs, G.A.: Plume rise. AEC Crit. rev. Ser., TID - 25075. U.S. A.L. Energy Comm., Div. Tech.Inform. Ext., Oak Ridge, Tennessee, 1969.
- Briggs, G.A.: Discussion of chimney plumes in neutral and stable surroundings. *Atmos. Environ.*, **6** (1972) 507-510.
- Briggs G.A.: Plume rise predictions. Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analyses, Workshop Proceedings, Boston, Massachusetts. September 29 - October 3. , American Meteorological Society. Boston, Massachusetts, 1975. pp. 59-111.
- Bringfelt, B: *Atmos. Environ.*, **3** (1969) 609.
- Brunmage, K.G.: The calculation of atmospheric dispersion from a stack. Stichting CONCAWE, the Hague, the Netherlands, 1966.
- Calder, K.L.: Proceedings, 2nd Meeting of Expert Panel Air Pollution Modeling, NATO/CCMS Air Pollution, No. 5, 1971.
- Cantú Martínez P.C.: Contaminación Ambiental, Diana. México. 1992.
- Carpenter, S.B., T.L. Montgomery, J.M. Leavit, W.C. Colbaugh. and F.W. Thomas: *JAPCA*, **21** (1971) 491.
- Carras, J.M., and D.J. Williams: Experimental Studies of plume dispersion in convective conditions. *Atmos. Environ.*, **18** (1984) 185-144.
- Chen S., Lee M., Zhao K. H., Doolen G. D.: A Lattice Gas Model with Temperature. *Physica D* **37** (1989) 42.
- Comisión Nacional de Derechos Humanos (CNDH): La contaminación atmosférica en México: sus causas y sus efectos. México, CNDH. 1992, 35-40 y 83-87.

- Dalburg J.P., D. Montgomery and G. Doolen, *Phys. Rev. A* **36** (1987) 2471.
- Davis, R.E.: On relating Eulerian and Lagrangian velocity statistics: Single particles in homogeneous flows. *J. fluid Mech.*, **114** (1982) 1-26.
- Deardorff, J.W.: Three-dimensional numerical study of the height and mean structure of a heated planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteor.*, **7** (1974) 81-106.
- d'Humieres D., Lallemand P., Frisch U., *Europhys. Lett.*, **2** (1986) 291.
- Donaldson, C. du P.: Construction of a dynamic model for the production of atmospheric turbulence and the dispersal of atmospheric pollutants. Workshop on Micrometeorology, Ed. D. A. Haugen. American Meteorological Society, Boston, 1973. pp. 313-392.
- Duderstadt James J., William R. Martin: *Teoría del Transporte*, C.E.C.S.A., (1983), 40-41.
- Enger, L.: A higher order closure model applied to dispersion in a convective PBL. *Atmos. Environ.*, **20** (1986) 879-894.
- Fay, J.A., M. Escudiers, and D.P. Hoult: *JAPCA*, **20** (1970) 391
- Frisch U., Hasslacher B., Pomeau Y., *Phys. Rev. Lett.*, **56** (1986) 1505.
- Gacetas Ecológicas de la Secretaría de Desarrollo Urbano y Ecología. Nos. 1-9, Vols. I y II, (1989-1990).
- Gifford, F.A. and Hanna S.R.: Modeling urban air pollution. *Atmos. Environ.*, **7** (1973) 131-136.
- Glendening, J.W., J.A. Businger, and R.J. Farber: Improving plume rise prediction accuracy for stable atmospheres with complex vertical structure: *JAPCA*, **34** (1984) 1128-1133.
- Golay, M.W.: Numerical Modeling of buoyant plumes in a turbulent, stratified atmosphere. *Atmos. Environ.*, **16** (1982) 2373-2381.
- Hall, C.D.: The simulation of particle motion in the atmosphere by a numerical random-walk model. *Quarterly J. Roy. Meteor. Soc.*, **101** (1975) 235-244.
- Hanna, S.R.: Some statistics of Lagrangian and Eulerian wind fluctuations. *J. Appl. Meteor.*, **18** (1979) 518-525.
- Hanna, S.R., G.A. Briggs, Jr Hosker: Handbook on atmospheric diffusion. U.S. Department of energy, Office of Health and Environmental Research Document DOE/TIC - 11223. 1982.

Hanna, S.R., L.L. Schulman, R.J. Paine, y J.E. Pleim: User guide to the offshore and coastal dispersion (OCD) model. Environmental Research and Technology, Concord, Massachusetts. Contract No. 14-08-0001-21138, 1984.

Hardy J., O. de Pazzis and Y. Pomeau. Phys. Rev. A 13. (1976) 1949.

Henderson-Sellers, B.: Modeling of plume rise and dispersion - The University of Salford Model: USPR. Lecture Notes in Engineering, edited by C.A. Brebjan y S.A. Orszag. Berlin: Springer-Verlag, 1987.

Hockney, R.W. and Eastwood J.W.: Computer Simulation Using Particles. New York: McGraw-Hill Inc, 1981.

Holland, J.Z.: Meteorology survey of the Oak Ridge area. ORO - 99. U.S. At. Energy Comm., Oak Ridge, Tennessee, 1953.

Jensen, N.O. and Peterson E.L.: The box model and the acoustic sounder, a case study. Atmos. Environ., 13 (1979) 717-720.

iv. Tech.Inform. Ext., Oak Ridge, Tennessee, Keller L. V., Friedmann A. A.: Differentialgleichung für die turbulente Bewegung einer Kompressiblen Flüssigkeit, Proc. 1st Intern. Congr. Appl. Mech., Delft, (1924) 395-405.

Lamb, R.G.: A numerical simulation of dispersion from an elevated point source in the convective planetary boundary layer. Atmos. Environ., 12 (1978) 1297-1304.

Lamb, R.G.: Note on application of K-theory to turbulent diffusion problems involving chemical reaction. Atmos. Environ., 7 (1973) 235

Landau L.D. and Lifshitz E.M.: Statistical physics. U.S.A., Addison-Wesley Publishing Company. 1970. Vol. 5. pp. 29-40.

Lettau, H.H.: Physical and meteorological basis for mathematical models of urban diffusion processes. Proceedings, Symposium on Multiple-Source Urban Diffusion Models. U.S. EPA Publication No. AP-86.

Lewellen, W.S., and Sykes R.I.: Second-order closure model exercise for the Kincaid Power Plant Plume. Electrical Power Research Institute. Palo Alto California. Report EA-1616-9. 1983.

Lewellen, W.S., and Teske M.E.: Second-order closure modeling of diffusion in the atmospheric boundary layer. Boundary-Layer Meteor., 10 (1976) 69-90.

Longhetto. A.: Atmospheric Planetary Boundary Layer Physics. New York, Elsevier, 1980.

Lurmann, F.W., Gooden D.A., and Collins H.M., Eds.: User's guide to the PLMSTAR air quality simulation model. Environmental Research & Technology, Inc., Newbury Park, California. Document M-2206-100 1985.

Lyons ,W.A., y H.S. Cole: Fumigations and plume trapping on the shores of Lake Michigan during stable onshore flow. *J. Appl. Meteor.*, **12** (1983) 494-510

Martin, D.O.: An urban diffusion model for estimating long-term average value of air quality. *JAPCA*, **21** (1971) 16-23

Meszaron, E., Varhelyi and Haszpra L.: On the atmospheric sulfur budget over Europe. *Atmos. Environ.*, **12** (1978) 2273-2277.

Nieuwstadt, F.T., Brost R.A., and van Stijn T.L.: Decay of convective turbulence, a large eddy simulation. Proceeding, 199 Euromech meeting on Direct and Large Eddy Simulation of Turbulence, Munchen, 1985.

Niuwstadt, F.T., and J.P. de Valk: A large-eddy simulations of buoyant and non-buoyant plume dispersion in the atmospheric boundary layer. *Atmos. Environ.* **21** (1987) 2573-2587.

Normas Oficiales Mexicanas. Secretaría de Comercio y Fomento Industrial. Dirección General de Normas. 1988.

Novikov, E.A., *Appl. Match. Mech.*, **33** (1969) 887.

Novikov, E.A.: The Lagrangian-Eulerian probability relations and the random force method for nonhomogeneous turbulence. *Phys. of Fluid.*, **29** (1986) 3907-3909.

Rechtman R., A. Salcido, F. Bagnoli: "Thermodynamical effects in a nine velocities two-dimensional Lattice Gas Automaton" en *On Statistical Physics*. 2-5 January, 1990. Oaxtepec, México.

Reif F.: *Fundamentos de física estadística y técnica*. McGRAW-HILL BOOK COMPANY, España, 1968.

Reiquam, H., *Atms. Environ.*, **4** (1968) 233.

Runca, E.: Transport and diffusion of air pollutants from a point source. *Proceedings, IFIP Working Conference on Modeling and Simulation of Land, Air and Water Resource System*. Ghent, Belgium, 1977.

Salcido A.: Lattice Gas Model for Transport and Dispersion Phenomena of Air Pollution. En *Air Pollution*. Eds. P. Zanetti, C.A. Brebbia, J.E. Garcia Gardea y G. Ayala Milian. Computational Mechanics Publications y Elsevier Applied Science, 1993. pp. 173-181.

Salcido A., Merino R., Saldana R.: Lattice Gas Model For Wind Fields Over Complex Terrains. En *International Symposium on HEAT AND MASS TRANSFER in ENERGY SYSTEMS AND ENVIRONMENTAL EFFECTS*. Cancún, México August 22-25, 1993. pp. 526-531.

Salcido A., Rechtman R.: Equilibrium Properties of a Cellular Automaton for Thermofluid Dynamics. En: *Nonlinear Phenomena in Fluids, Solids and*



Other Complex Systems. Eds: P. Cordero, B. Nachtergaele. Elsevier Science Publishers B. V., 1991. pp. 217-229.

Salcido A., Retchman R.: Lattice Gas Simulations of Flows Through Two-Dimensional Porous Media. En *Internacional Symposium on HEAT AND MASS TRANSFER in ENERGY SYSTEMS AND ENVIRONMENTAL EFFECTS*, Cancún, México August 22-25, 1993. pp. 222-226.

Salcido A., Saldaña R.: Modelación y Dispersión de Contaminantes Atmosféricos. *Boletín IIE*, marzo-abril, (1993).

Salcido A., Sozzi R., Alvaro N.: ESTUDIO DE LA MICROMETEOROLOGIA DEL VALLE DE MEXICO. En *Metodología Para La Estimación de los Flujos Turbulentos En La Capa Superficial De La Atmósfera*. IIE/15/5546/1 01/F, Diciembre de 1993, Tomo III. pp. 1.22 y 1.23.

Seigneur C.: Understand the Basics of Air-Quality Modeling, *Chemical Engineering Progress*, March, 1992. pp. 68-74.

Seinfeld, J.H.: *Air Pollution - Physical and Chemical Fundamentals*. New York; McGraw-Hill, 1975.

Schatzmann, M.: An integral model of plume rise. *Atmos. Environ.* **13** (1979) 721 -731.

Smith F.B.: Conditioned particle motion in a homogeneous turbulent field. *Atmos. Environ.* **2** (1968) 491-505.

Stern, A.C.: *Air Pollution*. Grid Edition, Volumen I. New York: Academic Press, 1976.

Stuhmiller, J.: Development and validation of a two-variable turbulence model. Science Applications, Inc., Report SAI-74-509-LJ, La Jolla California.

Stull R. B.: *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. London. 1989. pp 1-27.

Sykes, R.L., Lewellen W.S., Parker S.F., Heim D.S.: A hierarchy of dynamic plume models incorporating uncertainty. Vol 2: Stack exhaust model(SEM). A.R.A.P. Division of California Research & Technology, Inc., Princeton, New Jersey. Final report EA-6095 Vol 2. 1989.

Tran, K.: Users's guide for photochemical trajectory model TRACER. Applied Modeling, Inc., Report S1/003. California. 1981.

Srimaitis, D.G., D.C. DiCristofaro, and T.F. Lavery: The complex terrain dispersion model. EPA Document EPA-600-D-85/220. Atmospheric Sciences Research Laboratory, Research Triangle Park, North Carolina, 1986.

- Turk A., Turk J., Wittes J. T.: *Ecología - Contaminación - Medio Ambiente*, Nueva Editorial Interamericana. México, 1973.
- Turner, D.B.: *Workbook of atmospheric dispersion estimate*. EPA, Research Triangle Park, North Carolina. U.S. EPA ref. AP-26 (NTIS PB 191-482), 1970.
- Turner, D.B.: Proposed Pragmatic methods for estimating plume rise and plume penetration through atmospheric layers. *Atmos. Environ.*, 21 (1985) 2573-2585.
- Ulbrick, E.A., *Socio-Econ. Plan. Sci.*, 1 (1968) 423.
- Van Dope, H., R. Steenkist, y F.T. Nieuwstadt: Revised estimates for continuous shoreline fumigation. *J. Appl. Meteor.* 18 (1979) 133-137
- Van Haren, L., y F.T. Nieuwstadt: The behaviors of passive and buoyant plumes in a convective boundary layer, as simulated with a large-eddy model. *J. Appl. Meteor.*, 28 (1989) 818.
- Venkatram, A.: An examination of box models for air quality simulation. *Atmos. Environ.*, 12 (1978) 2243-2249.
- Vernier J.: *El Medio Ambiente, Serie ¿Qué sé?*, Publicaciones Cruz O., México, No. 23 1992.
- Von Neumann, J.: *Theory of Self-Reproducing Automata*, University of Illinois Press, 1966.
- Weisbuch G.: *Complex System Dynamics, Lecture Notes Volume II*, Santa Fe Institute Studies in the Sciences of Complexity. Addison-Wesley, 1991
- Zannetti, P.: Some aspects of Monte Carlo type modeling of atmospheric turbulent diffusion. Preprints, Seventh AMS conference on Probability and Statistics in Atmospheric Sciences. Monterey, California. November, 1978.
- Zannetti, P.: New Monte Carlo scheme for Simulating Lagrangian particle diffusion with wind shear effects. *Appl. Math. Modeling*, 8 (1984) 188-192.
- Zannetti, P., G. Carboni, R. Lewis, y L. Matamala: *AVACTA II - Users's Guide*. Aeroenvironment Inc. Document AV-R-86/580, 1986.
- Zannetti P.: *Air Pollution Modeling. Theories, Computational Methods and Available Software*, Computational Mechanics Publications. Southampton, Boston, Van Nostrand Reinhold. New York, 1990.