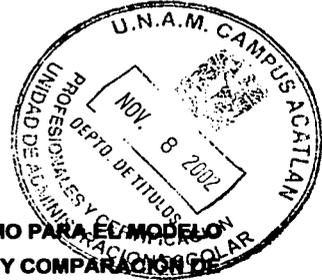


19



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MÉXICO

ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS PROFESIONALES
ACATLÁN



DISEÑO E IMPLEMENTACIÓN DE UN ALGORITMO PARA EL MODELO
MARKOVIANO DE DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA Y COMPARACIÓN DE
RESULTADOS CON EL MODELO GAUSSIANO DE DISPERSIÓN

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
LICENCIADA EN MATEMÁTICAS APLICADAS Y
COMPUTACIÓN

P R E S E N T A

Ana Luisa Hernández Martínez

ASESORA:
Ing. Elvira Beatriz Clavel Díaz



FALTA DE ORIGEN
TESIS CON

Noviembre, 2002



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

PAGINACION DISCONTINUA

A mis padres Jorge Hernández y Teresa Martínez.

A mis hermanas Patricia y Velia.

En especial a mi hermano Jorge Luis y a mi sobrina Romina.

INDICE GENERAL

Lista de figuras	i
Lista de tablas	iv
Lista de símbolos	vi
Introducción	x

I. Contaminación y dispersión atmosférica.

SINOPSIS	1
1.1 Concepto de atmósfera	2
1.2 Descripción de las capas que conforman la atmósfera	3
1.3 Concepto de contaminación atmosférica	4
1.4 Principales contaminantes atmosféricos	5
1.4.1 Materia particulada	6
1.4.2 Monóxido de carbono (CO)	7
1.4.3 Dióxido de azufre (SO ₂)	8
1.4.4 Hidrocarburos	9
1.4.5 Óxidos de nitrógeno	10
1.4.6 Oxidantes fotoquímicos	11
1.4.7 Asbestos y metales	11
1.5 Dispersión de contaminantes atmosféricos	12
1.5.1 Turbulencia	13
1.5.2 Turbulencia térmica	14
1.5.2.1 Temperatura y tasas de cambio	15
1.5.2.2 Estabilidad atmosférica	17
1.5.2.3 Tipos de inversiones	18
1.5.3 Turbulencia mecánica	20
1.5.4 Circulación del viento	22
1.5.5 Tipos de fuentes de emisión	23
1.5.6 Características generales de las plumas de las chimeneas	24

II. Descripción de modelos de dispersión atmosférica.

SINOPSIS	27
2.1 Modelación de sistemas	29
2.2 Modelos de calidad del aire	30
2.3 Modelo lineal regresivo	32
2.4 Modelos empíricos simples	33
2.5 Modelos matemáticos simples	35
2.5.1 Modelo de pluma Gaussiano	35
2.6 Modelos de dispersión tratados desde un punto de vista complejo	36
2.6.1 Introducción de turbulencia en modelos de difusión	36
2.6.2 Método Euleriano	37
2.6.2.1 Modelo simple de caja	40
2.6.2.2 Modelo Slug	41
2.6.2.3 Modelo de caja múltiple	42

INDICE GENERAL

2.6.3 Método de Lagrange.....	43
2.6.3.1 Modelos de caja de Lagrange	47
2.6.3.2 Modelo Gaussiano.....	48
2.6.3.3 Modelos de partículas.....	49
III. Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión.	
SINOPSIS	68
3.1 Conceptos generales de simulación	70
3.2 Método general de la simulación.....	71
3.2.1 Definición del sistema y formulación del modelo	74
3.2.2 Métodos auxiliares empleados en la simulación.....	85
3.2.2.1 Método de interpolación de Davis para la generar las isopletas.....	85
3.2.2.2 Métodos de generación de números aleatorios.....	88
3.2.3 Colección de datos	96
3.2.4 Implementación del modelo en la computadora	104
3.2.4.1 Manual del usuario para el modelo LAGDIS (Modelo LAGrangiano de DISpersión atmosférica)	104
IV. Comparación de resultados obtenidos mediante el modelo gaussiano y el modelo markoviano.	
SINOPSIS	116
4.1 Evaluación del modelo	118
4.2 Características del modelo LAGDIS (modelo LAGrangiano de DISpersión atmosférica) y descripción de la ejecución de la simulación	120
4.3 Evaluación cualitativa temporal del modelo LAGDIS con datos reales	125
4.4 Evaluación cuantitativa del modelo LAGDIS con datos reales.....	126
4.5 Descripción del modelo INPUFF (Gaussian Integrated PUFF model) .	127
4.6 Comparación cualitativa espacial del modelo LAGDIS con resultados obtenidos mediante el modelo INPUFF	129
4.7 Comparación cualitativa temporal del modelo LAGDIS con resultados obtenidos mediante el modelo INPUFF	131
4.8 Comparación cuantitativa del modelo LAGDIS con resultados obtenidos mediante el modelo INPUFF	134
CONCLUSIONES.....	139
ANEXO A DEDUCCIÓN DEL GRADIENTE ADIABÁTICO SECO	
ANEXO B DEDUCCIÓN DEL GRADIENTE ADIABÁTICO HÚMEDO	
ANEXO C DEDUCCIÓN DE LA TEMPERATURA POTENCIAL	
ANEXO D DEDUCCIÓN DE LA ECUACIÓN DE CONCENTRACIÓN DE ESPECIES	
GLOSARIO	

HIPÓTESIS.

Si la ecuación de Langevine para la fluctuación de la velocidad instantánea de una partícula puede expresarse mediante una secuencia de Markov, entonces se puede utilizar ésta para determinar la posición de la partícula y con ello estimar la concentración en un punto receptor.

OBJETIVO.

Dar la concentración de un contaminante poco reactivo en un punto receptor dada una fuente de emisión puntual (chimenea) y conociendo la meteorología del lugar.

LISTA DE FIGURAS Y DIAGRAMAS

Número	Título de la figura
1.1	Estratificación vertical de la atmósfera según su temperatura.
1.2	Esquema del ciclo de vida de los contaminantes.
1.3	Remolinos generados por el ascenso de térmicas.
1.4	Tasa de cambio relacionada con la estabilidad atmosférica (tasa de cambio ambiental -, tasa de cambio adiabática —).
1.5	(a) Inversión formada por calentamiento adiabático debido a subsidencia. (b) En un anticiclón. (c) En la falda de una montaña. (d) En celdas de convección entre nubes.
1.6	Turbulencia generada por desviaciones del flujo debidas a obstáculos como árboles o edificios.
1.7	Perfiles típicos de velocidad, temperatura y forma de las plumas, para diferentes condiciones atmosféricas (tasa de cambio adiabática seca ---; tasa de cambio ambiental -.) a) de espiral, gran inestabilidad; b) de cono, cerca de la estabilidad neutral; c) de abanico, inversión de superficie; d) de fumigación, inversión de flotación; e) de flotación, inversión por debajo de la chimenea; f) de atrapamiento, inversión por debajo y por encima de la altura de la chimenea.
2.1	Ecuaciones usadas para describir los fenómenos que intervienen en el proceso de contaminación atmosférica.
2.2	Diagrama del modelo de pluma gaussiano.
2.3	Diagrama que muestra los elementos básicos de un modelo de caja.
2.4	Esquema de un modelo de trayectoria o Lagrangiano.
2.5	Sistema de referencia Euleriano (a) y Lagrangiano (b) para el movimiento atmosférico.
3.1	Diagrama de flujo general.
3.2	Diagrama de flujo de la subrutina LEER ENTRADAS E INICIALIZAR VARIABLES.

Número	Título de la figura
3.3	Diagramas de flujo que representan los algoritmos para la determinación de la posición de la partícula y la fluctuación de la velocidad.
3.4	Diagrama de flujo que muestra el algoritmo para estimar la desviación estándar con respecto al centro de masa de cada partícula emitida.
3.5	Diagrama de flujo que muestra el algoritmo para obtener la concentración en un punto receptor.
3.6	Diagrama de flujo que muestra el algoritmo para generar la isopleta.
3.7	Diagrama de flujo que muestra el algoritmo para generar números aleatorios para una variable con distribución normal.
3.8	Ventanas donde se muestra (a) el contenido del disco de instalación y (b) el mensaje acerca del nombre del programa y derechos de autor.
3.9	Figura que muestra (a) la ventana de instalación y (b) mensaje de término de la instalación.
3.10	Ventana que muestra las opciones con las que cuenta el modelo LAGDIS.
3.11	Ventana correspondiente a la captura de datos meteorológicos necesarios para ejecutar el modelo de dispersión.
3.12	Ventana que solicita la información para consultar un conjunto de información meteorológica.
3.13	Ventana que despliega y permite modificar la información de parámetros meteorológicos correspondientes a una clave determinada.
3.14	Ventana que permite elegir las características de la simulación.
3.15	Ventana de elección del archivo de receptores.
3.16	Ventana de visualización de la información contenida en el archivo de receptores.
3.17	Ventana de elección del archivo que contiene la información de las fuentes de emisión.
3.18	Ventana de visualización de la información contenida en el archivo de emisiones.

Número	Título de la figura
3.19	Ventana de confirmación de ejecución de la simulación.
3.20	Ventana que muestra una isopleta generada mediante las concentraciones estimadas por LAGDIS.
3.21	Ventanas que muestran: (a) elección de un archivo LAG y (b) desplegado de un archivo LAG donde se puede consultar la información de la concniente a la ejecución de una simulación.
4.1	Ubicación de los puntos de medición de inmisiones de dióxido de azufre
4.2	Gráfica de la serie de tiempo de concentraciones simuladas por el modelo LAGDIS y datos observados reales para el día 27 de mayo de 1994, en el receptor con coordenadas UTM (471.439, 2214.755)
4.3	Isopletas para datos de concentraciones estimados por (a) INPUFF y b (LAGDIS), correspondientes al 23 de Junio de 1994 a las 20 horas
4.4	Gráfica de la serie de tiempo de concentraciones simuladas por los modelos INPUFF y LAGDIS para los días 23 y 24 de junio de 1994, en el receptor ubicado en las coordenadas (0,500) metros.
4.5	Gráfica de la serie de tiempo de concentraciones simuladas por los modelos INPUFF y LAGDIS para los días 23 y 24 de junio de 1994, en el receptor ubicado en las coordenadas (0,2500) metros.
4.6	Gráfica de la serie de tiempo de concentraciones simuladas por los modelos INPUFF y LAGDIS para los días 23 y 24 de junio de 1994, en el receptor ubicado en las coordenadas (0,5000) metros.
4.7	Gráfica de la serie de tiempo de concentraciones simuladas por los modelos INPUFF y LAGDIS para los días 23 y 24 de junio de 1994, en el receptor ubicado en las coordenadas (0,7500) metros.

LISTA DE TABLAS

Número	Título de la tabla
1.1	Composición química del aire atmosférico seco.
1.2	Relación entre el parámetro de estabilidad, n , en la ecuación y la condición de estabilidad en la atmósfera.
1.3	Clasificación de los tipos de fuentes de emisión.
2.1	Resistencia de acuerdo al tipo de suelo rc.
3.1	Variables exógenas o independientes pertenecientes a el sistema de dispersión de contaminantes.
3.2	Variables endógenas o dependientes del sistema de dispersión de contaminantes.
3.3	Parámetros utilizados en el modelo de dispersión atmosférica.
3.4	Constantes utilizadas en el modelo de dispersión atmosférica.
3.5	Ecuaciones utilizadas en el modelo de dispersión.
3.6	Información de emisiones de dióxido de azufre provenientes de las chimeneas de la refinería de Tula.
3.7	Campos de los archivos obtenidos durante la campaña junio-agosto de 1994
3.8	Clave de las categorías de estabilidad según el método SDRT .
3.9	Estructura de los archivos obtenidos durante los radiosondeos.
3.10	Descripción del archivo de datos meteorológicos.
4.1	Ubicación del punto 2 de muestreo de inmisiones en el sistema civil de proyección (latitud y longitud), el sistema militar o UTM y en coordenadas polares.
4.2	Datos meteorológicos y micrometeorológicos correspondientes al día 27 de mayo de 1994 utilizados en la simulación, además se muestran los valores de inmisiones reales y los pronósticos obtenidos mediante la ejecución de LAGDIS.

Número	Título de la tabla
4.3	Estadísticos estimados a partir de los datos de concentraciones reales y pronosticadas de dióxido de azufre.
4.4	Datos meteorológicos y micrometeorológicos correspondientes al día 23 de junio de 1994.
4.5	Ubicación de los máximos de concentración de SO₂ correspondientes al día 23 de junio de 1994.
4.6	Ubicación de los receptores para los cuales se gráfica la serie de tiempo de concentraciones.
4.7	Estadísticos estimados para comparar los resultados de los modelos INPUFF y LAGDIS, considerando valores de las concentraciones estimadas en μgm^3.

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Descripción	Unidades
b_0	Punto de intersección de la recta en el eje y	
b_1	Pendiente de la recta	
C_p	Calor específico a presión constante	KJ/kg°C
C_v	Calor específico a volumen constante	KJ/kg°C
c	Concentración de la especie	g/m ³
c'	Fluctuación de la concentración de la especie	g/m ³
ΔC	Diferencia de concentración	µg/m ³
C_o	Concentración observada	µg/m ³
C_p	Concentración pronosticada	µg/m ³
D	Difusividad de la especie	
d_a	Diámetro de la chimenea	metros
f	Parámetro de Coriolis	sec ⁻¹
F_b	Fuerza ascensional del flujo	m ⁴ s ⁻³
F_m	Cantidad de movimiento del flujo	m ⁴ s ⁻²
g	Gravedad	m/sec ²
H	Altura efectiva de la chimenea	metros
h	Altura de la capa de mezcla	metros
h_a	Altura de la chimenea	metros
Δh	Elevación de la pluma	metros
ΔH	Calor latente	
k	Constante de Von Karman	

Símbolo	Descripción	Unidades
L	Longitud de Monin-Obukhov	metros
Ma	Peso molecular del aire	
P	Presión	mbar
Q	Razón de emisión	gramos/sec
r	Coefficiente de correlacion	
R	Constante universal de los gases	
R_L	Correlación de la velocidad lagrangiana	
s	Parámetro de estabilidad	°Kelvin/metros
T_L	Escala de tiempo lagrangiana	segundos
T	Temperatura	°Kelvin o °C
T_a	Temperatura de ambiente	°Kelvin
T_s	Temperatura de salida del gas de la chimenea	°Kelvin
ΔT	Incremento de la temperatura	°Kelvin
(ΔT)_c	Incremento de la temperatura límite	°Kelvin
t	Tiempo	segundos
u*	Velocidad de fricción	metros/sec
u	Velocidad del viento	metros/sec
ū	Velocidad media del viento en la horizontal	metros/sec
u'	Fluctuación de la velocidad del viento	metros/sec
V	Volumen	m ³
V_d	Velocidad de depositación	metros/sec
v̄	Velocidad media del viento en la horizontal	metros/sec
v_s	Velocidad de salida del gas de la chimenea	metros/sec

Símbolo	Descripción	Unidades
w	Relación entre la masa de vapor de agua y la masa de aire seco	
w^*	Escala de velocidad	metros/sec
\bar{w}	Velocidad media del viento en la vertical	metros/sec
x	Vector de coordenadas	
$x(t)$	Vector de coordenadas en el tiempo t	
z	Distancia sobre la vertical	metros
Δz	Incremento en la altura	metros
z_0	Longitud de rugosidad	metros
Γ	Gradiente adiabático seco o húmedo	$^{\circ}\text{C}/\text{m}$
θ	Temperatura potencial	$^{\circ}\text{Kelvin}$ o $^{\circ}\text{C}$
σ_o	Desviación estándar de los valores observados	$\mu\text{g}/\text{m}^3$
σ_p	Desviación estándar de los valores pronosticados	$\mu\text{g}/\text{m}^3$
σ_x	Desviación estándar de la distribución horizontal	metros
σ_y	Desviación estándar de la distribución horizontal	metros
σ_z	Desviación estándar de la distribución vertical	metros
σ_u	Desviación estándar de la velocidad del viento en la horizontal (eje x)	metros/sec
σ_v	Desviación estándar de la velocidad del viento en la horizontal (eje y)	metros/sec
σ_w	Desviación estándar de estándar de la velocidad del viento en la vertical (eje z)	metros/sec

Símbolo	Descripción	Unidades
σ_{ϕ}	Desviación estándar de la elevación angular del viento.	radianes
Φ	Latitud	grados, minutos y segundos
Ω	Velocidad de rotación de la tierra	radianes/sec

INTRODUCCIÓN

El uso de modelos matemáticos ha encontrado una amplia de aplicación en el área de contaminación atmosférica, se han desarrollado modelos para inventarios de emisiones, otros describen los fenómenos que tienen lugar en la atmósfera como la dispersión, el transporte y la depositación de contaminantes; además de las reacciones químicas que ocurren en ella.

En el presente trabajo se desarrolla un modelo sencillo para determinar las concentraciones de contaminantes poco reactivos, dadas fuentes de emisión puntuales (chimeneas) y conociendo la información meteorológica del lugar.

En el primer capítulo se dan los conceptos básicos para entender el fenómeno de la dispersión atmosférica de contaminantes, se describe la estructura de la atmósfera y el comportamiento térmico vertical de ésta, haciendo énfasis especial en la capa límite, por ser la capa en la cual tiene lugar el proceso de dispersión de contaminantes; después se da una breve definición del significado de contaminación atmosférica, así como una reseña de los principales contaminantes del aire. Por otro lado, se trata el tema de estabilidad ya que ésta es una medida para estimar la capacidad de dispersión de la atmósfera, además se abordan los aspectos elementales del fenómeno de la turbulencia, tanto térmica como mecánica; debido a que junto con el viento son los dos mecanismos por los cuales tiene lugar el proceso de dispersión.

En el segundo capítulo, se hace un señalamiento acerca de las áreas donde han sido utilizados como herramientas los modelos ambientales de calidad del aire, así como los aspectos que deben de considerarse para la elección de un modelo; posteriormente se describen los diferentes tipos de modelos de dispersión, desde los empíricos hasta los complejos, estos últimos así considerados debido a que introducen una serie de ecuaciones matemáticas que describen varios fenómenos que ocurren en la atmósfera. Se incluye también una explicación acerca de los dos enfoques o métodos mediante los cuales se ha estudiado el fenómeno de la dispersión de contaminantes: el **euleriano**, cuya característica fundamental se encuentra en que se basa en un sistema de coordenadas fijo y que consiste en resolver la ecuación de la concentración de especies (contaminantes) mediante diversos métodos numéricos. El otro método llamado **lagrangiano**, se aborda con más profundidad, debido a que el modelo que se desarrolla en el presente trabajo se apoya en un esquema lagrangiano, este método considera un sistema de coordenadas móvil, en el cual la trayectoria de las partículas contaminantes emitidas por una fuente se trata de manera individual y la concentración en los puntos de interés se obtiene definiendo celdas en las regiones de estudio y contando el número de partículas que se encuentran dentro del volumen definido; otra forma de obtener la concentración es asumiendo que ésta sigue el comportamiento de una cierta función de distribución, la más utilizada es la gaussiana, cuya justificación para su uso se hace en el momento oportuno. Se establecen también aspectos complementarios del modelo de partículas que son útiles más adelante, como las formulaciones para la obtención de la elevación del penacho emitido por una fuente

X

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

(chimenea en este caso), la determinación del campo medio de vientos y la pérdida de masa de una partícula por precipitación de material a la superficie (deposición).

En el tercer capítulo se diseña la simulación para el modelo de dispersión de partículas explicado en el capítulo II, asimismo se dan algunos conceptos necesarios en simulación y se listan unos pasos generales a seguir para el desarrollo del modelo. Una vez establecidos dichos pasos generales, se procede a aplicarlos para el caso de estudio, en primer lugar se definen los elementos del sistema, su interacción con el medio y el objetivo del estudio, se desglosan y clasifican en tipos de variables, parámetros y ecuaciones los elementos que conforman el sistema, después se presentan los diferentes diagramas de flujo que describen el algoritmo del modelo con la explicación correspondiente. Posteriormente se recolectan los datos que sirven para estimar los parámetros requeridos por el modelo, por otro lado, se explican algunas herramientas adicionales utilizadas para la implementación del modelo en computadora, como el caso del algoritmo para la construcción de isopletas (gráficas que definen el nivel de concentración de un contaminante en la región de estudio), el cual se basa en la obtención, por medio del método de interpolación de Davis, del valor de la concentración de un contaminante en un punto en base a valores de concentraciones estimados por el modelo. Otro método auxiliar empleado en la implementación del modelo es el utilizado para simular valores que siguen una distribución normal, se da un breve resumen de los principales métodos de generación de valores para variables aleatorias, en primer lugar se tratan métodos creados para generar números aleatorios que siguen una distribución uniforme, esto debido a que dichos números son utilizados por conveniencia en los métodos de generación de números aleatorios con distribución normal.

El cuarto capítulo trata sobre la verificación del modelo de dispersión además se hace una comparación en base a los criterios de evaluación de modelos de dispersión entre el modelo diseñado en el presente trabajo LAGDIS (Modelo LAGrangiano de DISpersión atmosférica) y un modelo aprobado por la EPA (Environmental Protection Agency) llamado INPUFF (Gaussian Integrated PUFF model).

La validación de un modelo de dispersión consta de dos etapas: en la primera nombrada **validación cualitativa**, se checa que los niveles de concentración pronosticados y reales coincidan en el tiempo y el espacio, para ello se utilizan isopletas y gráficas de series de tiempo de concentraciones, en esta fase no es importante que las magnitudes sean discrepantes, debido a que la afinidad entre los valores pronosticados y reales se prueba en una etapa de **validación cuantitativa**, en ella se estiman algunos estadísticos, entre los más utilizados están: el error de la raíz cuadrática media, el error de la raíz cuadrática media corregido, el coeficiente de correlación, la desviación estándar y el ajuste de valores a una línea recta.

Las etapas de experimentación y toma de decisiones en el desarrollo de una simulación quedan fuera de los objetivos del presente trabajo.

Finalmente, en las conclusiones se señalan las ventajas del modelo, así como sus limitaciones.

CAPITULO I.

Contaminación y dispersión atmosférica.

SINOPSIS

La atmósfera es una capa protectora que influye en gran medida en el desarrollo de vida en la Tierra. Desafortunadamente el hombre, en la búsqueda de beneficios, ha ejercido acciones que han provocado el deterioro de su medio ambiente, entre ellos la atmósfera.

En la actualidad en los grandes centros de población existe una concentración de elementos considerados contaminantes de la atmósfera, producto todos ellos de la vida diaria (actividad de las fábricas, flujo vehicular, etc).

Un elemento se considera contaminante cuando su presencia en la atmósfera en ciertas concentraciones y durante un lapso de tiempo determinado, resultan perjudiciales para las formas de vida existentes en la Tierra.

El ciclo de vida de un contaminante se inicia con su emisión a la atmósfera, luego estos elementos pueden ser dispersados en el aire; o bien sufrir transformaciones, en muchas ocasiones estas pueden llevar a la producción de nuevos contaminantes, llamados contaminantes secundarios. El ciclo termina con la depositación o absorción de contaminantes sobre superficies.

El presente trabajo se enfocará al proceso de dispersión de contaminantes emitidos por chimeneas a la atmósfera, más que a sus efectos. Sin embargo, el poder predecir la forma en cómo se van a dispersar ciertos contaminantes sobre una área, es de suma utilidad para determinar el impacto al medio ambiente de las distintas fuentes de emisión.

La **dispersión de contaminantes** en la atmósfera se da mediante dos mecanismos: la turbulencia térmica o mecánica y el transporte o advección. La capa atmosférica donde tienen lugar estos procesos se conoce como **capa límite**, la cual se caracteriza por su capacidad de transferencia de propiedades tales como: calor, humedad y movimiento.

La **turbulencia térmica** se determina por el ascenso o descenso de parcelas de aire (térmicas) que tienen una temperatura diferente al aire de sus alrededores, de acuerdo a las características térmicas de las parcelas de aire y su movimiento en la atmósfera, ésta se puede clasificar en tres tipos: inestable, estable y neutra. Cuando una parcela de aire tiene una temperatura mayor que su medio ambiente, entonces es

menos densa y por ende tiende a elevarse, este comportamiento es propio de atmósferas **inestables** en donde las térmicas constituyen remolinos que ayudan a una mejor dispersión. Las peores condiciones de dispersión se dan cuando las parcelas de aire son más densas que sus alrededores y por tanto más frías entonces, si existe algún factor que provoque el movimiento de la parcela ésta tenderá a regresar a su lugar original, este tipo de atmósfera se le conoce como **estable**. El tercer tipo de atmósfera es la **neutra** en la cual no existen movimientos adicionales a los generados por perturbaciones y tiene lugar cuando las parcelas de aire tienen una misma temperatura que las masas aledañas.

Otro mecanismo de dispersión ocurre cuando se generan remolinos por la fricción entre el aire y el suelo; o por el choque de masas de aire con obstáculos encontrados en la superficie, este tipo de perturbaciones recibe el nombre de turbulencia mecánica.

Otro fenómeno involucrado en el proceso de dispersión es la circulación del viento en la atmósfera, el cual está determinado por diferentes fuerzas que actúan sobre una masa de aire, tales como: la fuerza de presión, la deflexión horizontal (o fuerza de Coriolis) y la fuerza de fricción dentro de la capa límite. Estas fuerzas definen dos tipos de movimiento, aquellos que provocan el asentamiento de masas de aire y con ello una dispersión deficiente; y los que provocan la elevación de las capas de aire, una mayor capacidad de mezcla y un mejor proceso de dispersión.

Estos mecanismos son importantes para comprender posteriormente los distintos modelos de dispersión que se han desarrollado.

1.1 Concepto de atmósfera.

La **atmósfera** es una capa gaseosa que envuelve un planeta o una estrella, algunos de estos cuerpos celestes retienen los gases que constituyen la atmósfera mediante la gravedad y la temperatura.

La composición de la atmósfera de los cuerpos celestes varía, por ejemplo mientras la atmósfera de la Tierra está compuesta en un 70% de nitrógeno, la delgada capa de la Luna es rica en sodio.

Dado que el punto de interés es el fenómeno de dispersión ocurrido en la capa envolvente de nuestro planeta, se dará una definición de la atmósfera terrestre citada por el Sistema Internacional de Monitoreo Ambiental (SIMA):

"La atmósfera es una mezcla de gases y partículas que rodean nuestro planeta. La atmósfera sirve para varios propósitos; nos provee del aire que respiramos, sus gases retienen el calor que calienta la tierra; y su capa protectora de ozono bloquea los peligrosos rayos emitidos por el sol"^{1.1}

^{1.1} S.I.M.A. Sistema Internacional de Monitoreo Ambiental.

A continuación se presenta la clasificación de las regiones que constituyen la atmósfera terrestre.

1.2 Descripción de las capas que conforman la atmósfera.

La atmósfera de la Tierra se extiende aproximadamente 100 kilómetros por encima de la superficie terrestre, se clasifica principalmente de acuerdo a su comportamiento térmico vertical en: **troposfera**, **estratosfera**, **mesosfera** y **termosfera**; existen además capas de transición entre unas y otras. La **figura 1.1** muestra el comportamiento térmico vertical de la atmósfera.

La **troposfera** es la capa más cercana a la Tierra, puede tener un grosor de 6 hasta 17 kilómetros siendo más ancha en el ecuador. La temperatura en la troposfera disminuye mientras la altitud es mayor, esto debido a que los gases que la conforman son calentados por la radiación proveniente de la superficie terrestre.

Debido a que la troposfera es la región que más influye en la vida terrestre, se han hecho clasificaciones en cuanto a su estructura se refiere, tiene dos divisiones principales: la **atmósfera libre** y la **capa límite**; ésta última es la más cercana a la superficie y se encuentra definida por movimientos turbulentos producto del efecto de la superficie y factores meteorológicos.

Dentro de la capa límite se encuentran otras capas, la **capa turbulenta** caracterizada por la presencia de turbulencia de pequeña escala producida por superficies rugosas y convección; durante el día su altura se puede extender a 50 metros, pero en la noche cuando la capa límite disminuye es de unos cuantos metros solamente. Existen otras dos capas cuya profundidad también se encuentra controlada por las características de la superficie. La primera es la **capa rugosa** la cual se extiende arriba de 1 a 3 veces la altura de objetos encontrados en el suelo y es fuertemente dependiente de la constitución física del obstáculo. La segunda es la **capa límite laminar** la cual está en contacto directo con la superficie, es una capa no turbulenta, de solo unos pocos milímetros de altura, se adhiere a la superficie estableciendo un amortiguador entre esta y las capas superiores de la troposfera.

En la parte superior de la troposfera existe una delgada capa, llamada **tropopausa** que la separa de la estratosfera y se caracteriza por un decremento sumamente moderado de la temperatura según aumenta la altura.

En la **estratosfera** los gases son calentados por la radiación proveniente del sol y por tanto su temperatura aumenta cuando es mayor la altitud. La estratosfera alcanza un máximo de temperatura en una capa llamada **estratopausa**. En esta región se encuentra además la capa de ozono cuya función es impedir la entrada de radiación ultravioleta, peligrosa para la vida animal y vegetal.

La **mesosfera** es una capa donde la temperatura disminuye a un mínimo de 185 °K en promedio, la zona que divide a la mesosfera de la termosfera se conoce como **mesopausa**.

La capa más alejada de la superficie se conoce como **termosfera**, ésta región incrementa su temperatura conforme al aumento de altura en un orden de milésimas de grado. Consta de una capa llamada **exosfera**, que es la que se encuentra en contacto directo con el medio interplanetario. Las condiciones químicas y físicas de la termosfera difieren grandemente de las encontradas en la atmósfera baja, debido principalmente a que recibe energía proveniente del sol y los gases que se encuentran en esta capa tienen una densidad menor que en las demás regiones de la atmósfera.

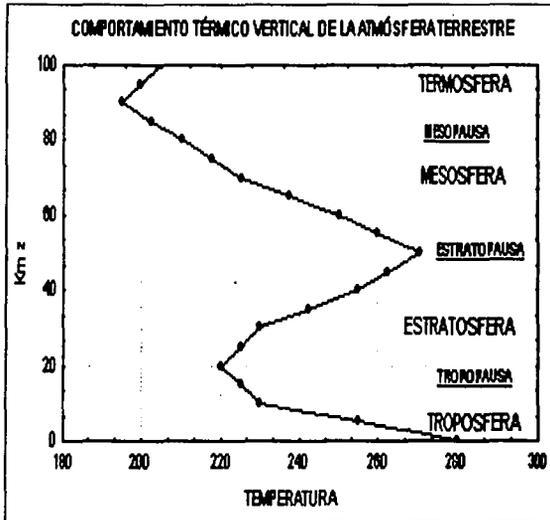


FIGURA 1.1 Estratificación vertical de la atmósfera según su temperatura.

1.3 Concepto de contaminación atmosférica.

Antes de pasar a describir el fenómeno de dispersión de contaminantes en el aire, es necesario señalar qué se entiende por *contaminación del aire*, según la definición dada por *Wark*, es:

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

"La presencia en la atmósfera exterior de uno o más contaminantes con sus combinaciones, en cantidades tales y con tal duración que sean o puedan afectar la vida humana, de animales, de plantas, o de propiedad, que interfiera el goce de la vida, la propiedad o el ejercicio de las actividades"^{1,2}.

Ahora bien, un contaminante se define tomando en cuenta los componentes ideales del aire atmosférico, también denominado *aire seco, limpio o normal*, y por lo regular se encuentra en las áreas rurales o sobre el océano. Un elemento se considera contaminante cuando excede la concentración permitida o también cuando es un material que no se encuentra dentro de la composición química de aire seco y que además su presencia daña a personas, animales, plantas o materiales.

En la **tabla 1.1** se da la composición del aire seco, cabe señalar que además de los elementos mencionados, el aire atmosférico contiene cantidades mínimas de dióxido de azufre, formaldehído, yodo, cloruro de sodio, amoníaco, monóxido de carbono, metano, polvo y polen.

TABLA 1.1 Composición química del aire atmosférico seco.

<i>Sustancia</i>	<i>Volumen(por ciento)</i>	<i>Concentración (ppm)^a</i>
Nitrógeno	78.084±0.004	780,900
Oxígeno	20.946±0.002	209,400
Argón	0.934±0.001	9,300
Dióxido de carbono	0.033±0.001	315
Neon		18
Helio		5.2
Metano		
Criptón		0.5
Hidrógeno		0.5
Xenón		0.08
Dióxido de nitrógeno		0.02
Ozono		0.001-0.04

FUENTE: Handbook of Air Pollution, Publicaciones PHS AP-44 (PB 190-247), 1968 (40). ^a ppm es una abreviatura de partes por millón.

En la siguiente sección se da una clasificación general de contaminantes del aire, así como una descripción de cada uno de ellos.

1.4 Principales contaminantes atmosféricos.

Un contaminante es toda materia o energía en cualquier estado físico que al incorporarse a la atmósfera es dañina para el ser humano, plantas, animales y materiales.

^{1,2} K. Wark, Contaminación del aire, origen y control (1994), p. 22.



Las concentraciones y el período de exposición para los cuales un contaminante resulta nocivo se han establecido mediante **normas ambientales**.

Los contaminantes se pueden clasificar en primarios y secundarios. Los **contaminantes primarios** son aquellos que permanecen en la atmósfera tal como fueron emitidos por la fuente (óxidos de azufre, monóxido de carbono, óxido de nitrógeno, hidrocarburos y partículas); los **contaminantes secundarios**, son producto de las reacciones químicas entre los contaminantes primarios y otros materiales químicos que se encuentran en la atmósfera (por ejemplo el ozono).

A continuación se presenta una breve descripción acerca de las características, fuentes de emisión y efectos en medio ambiente de los principales contaminantes atmosféricos.

1.4.1 Materia particulada.

☛ **Características.**

Es materia sólida y líquida, de composición química variada, que son dispersadas y transportadas por el aire, mayores que las moléculas individuales pero con diámetro menor a $500 \mu\text{m}$ ($1 \mu\text{m} = 1 \text{micrón} = 10^{-4} \text{cm}$) su tiempo de estancia en la atmósfera puede variar de acuerdo con su tamaño desde unos cuantos segundos hasta meses.

Las partículas cuyo diámetro se encuentra por arriba de $20 \mu\text{m}$ tienden a asentarse más pronto, debido a que la fuerza de gravedad actúa sobre ellas. Las partículas menores de $0.1 \mu\text{m}$ presentan un movimiento browniano, es decir la acción de la gravedad sobre las partículas es despreciable, presentando movimientos aleatorios producto de las colisiones entre las moléculas individuales. Además algunas son capaces de absorber y dispersar la luz, radiación solar, o bien sustancias químicas.

☛ **Fuentes de emisión.**

Cerca del 90% de las partículas que se encuentran en la atmósfera se derivan de **fuentes naturales** (incendios, erosión eólica y erupciones volcánicas). Las **fuentes antropogénicas** están principalmente asociadas con procesos de combustión (quema de carbón, combustóleo y diesel por procesos industriales y domésticos).

☛ **Efectos en el medio ambiente.**

Salud.

Quando las partículas son tóxicas y se asientan o son absorbidas por plantas provocan daños en la salud animal y humana. Por ejemplo, han ocurrido envenenamientos en ganado bovino y vacuno alimentados con plantas en las cuales se asentaron partículas que contenían arsénico.

Las partículas suspendidas en el aire y cuyo diámetro es menor a 0.1 μm son de naturaleza carcinogénica y respirables, penetrando en los pulmones y dañando al aparato respiratorio. Se ha encontrado una estrecha relación en la concentración de partículas y el índice de enfermedades respiratorias y afecciones cardíacas.

Vegetación.

Las partículas que contiene fluoruros parecen causar daños en plantas, el óxido de magnesio encontrado en algunas partículas provoca falta de crecimiento en plantas

Materiales.

Dependiendo de la composición química y su estado físico, las partículas pueden ensuciar superficies (paredes, ropa, etc.). Además debido a que algunas partículas tienen la capacidad de absorber sustancias químicas corrosivas que se encuentran en la atmósfera, pueden provocar corrosión en metales.

Otros.

Sirven como núcleos de condensación que influyen en la formación de nubes, lluvia y nieve. Algunas partículas absorben la luz y la dispersan provocando la reducción de visibilidad, limitando la percepción de objetos ubicados a cierta distancia.

1.4.2 Monóxido de carbono (CO).

☛ Características.

Es un gas incoloro e inodoro. Es muy estable y tiene un promedio de vida media en la atmósfera de 2 a 4 meses. Se puede oxidar en CO_2 aunque el proceso de transformación es muy lento o bien puede ser absorbido por los océanos. Pero la principal fuente de eliminación son los microorganismos encontrados en el suelo (por ejemplo hongos).

☛ Fuentes de emisión :

Una fuente principal de la formación de monóxido de carbono son los incendios. Otras fuentes importantes son aquellos procesos de combustión interna de hidrocarburos y sustancias que contienen carbono, como : gasolina, diesel, etc.; además se han observado mayores concentraciones de CO en lugares donde existe un alto congestionamiento vehicular o en lugares cerrados donde se emite humo de cigarrillos.

☛ Efectos en el medio ambiente.

El monóxido de carbono parece no tener efectos perjudiciales en materiales, por otro lado no provoca daños en plantas en concentraciones por debajo de 100 ppm.

Salud.

Causa cambios fisiológicos y patológicos y, finalmente la muerte (si se encuentra expuesto a una concentración de 750 ppm). El monóxido de carbono al ser inhalado provoca que los tejidos de cuerpo sean privados del oxígeno adecuado.

La carboxihemoglobina (COHb) encontrada en la sangre se encuentra en función del CO inhalado, los niveles normales de COHb son del 0.4 por ciento y un aumento en el nivel provoca cambios estructurales en el corazón y cerebro de animales, impedimentos en funciones psicomotoras, efectos en conducta y sistema nervioso, agudeza visual, dolores de cabeza, fatiga, fallas respiratorias y hasta la muerte.

Vegetación.

Provoca un aumento en el crecimiento de plantas.

Otros.

La radiación solar que se introduce a la atmósfera es de onda corta (0.4 μm a 0.8 μm), la superficie terrestre emite también radiaciones, pero estas son de onda larga (4 m a 12 m). A cantidades normales de CO₂ la energía solar que entra a la atmósfera es igual a la energía terrestre emitida al espacio, es decir existe un estado de equilibrio; este equilibrio podría romperse, debido a que las partículas suspendidas que contienen CO₂ son capaces de absorber la radiación de onda larga emitida por la superficie terrestre no así la radiación solar de onda corta; de esta manera se incrementa la cantidad de energía en la atmósfera y con ello la temperatura.

1.4.3 Dióxido de azufre (SO₂).

☛ Características.

El SO₂ es un gas incoloro, no flamable y no explosivo que provoca sensaciones gustatorias a concentraciones de 0.3 a 1.0 ppm, cuando las concentraciones exceden las 3.0 ppm, el gas tiene un olor acre e irritable. El SO₂ se convierte parcialmente en trióxido de azufre, que al combinarse con el agua se transforma en ácido sulfúrico.

☛ Fuentes de emisión :

Combustión de carbón, diesel, combustóleo y gasolina que contiene azufre; fundición de vetas metálicas ricas en azufre; procesos industriales; erupciones volcánicas.

☛ Efectos en el medio ambiente.

Salud.

Irritación en los ojos, reduce funciones pulmonares y agrava enfermedades respiratorias como el asma, la bronquitis crónica y el enfisema.

Vegetación.

Provoca lesiones en las hojas de las plantas y reducción en la fotosíntesis.

Materiales.

Los compuestos de azufre son los causantes de los principales daños en materiales: corrosión de metales, poca duración de superficies pintadas y secadas bajo exposición de SO_2 , daño en productos textiles, superficies de mármol, caliza, etc...

Otros.

Es el precursor del ácido sulfúrico cuyo principal efecto lo encontramos en el aumento de acidez del agua de lluvia. Además, provoca la disminución de la visibilidad al reaccionar químicamente con otros elementos generando gotitas de niebla de ácido sulfúrico que dispersan la luz, disminuyendo el campo visual.

1.4.4 Hidrocarburos.

⇒ *Características.*

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

⇒ *Fuentes de emisión.*

Anteriormente la mayor parte de los hidrocarburos se originaban en fuentes naturales mediante la descomposición de vegetación, en la actualidad cobran más importancia en su producción las fuentes antropogénicas, con la combustión de material que contiene carbono y la evaporación de gasolina.

⇒ *Efectos en el medio ambiente.*

Salud.

Transtornos en el sistema respiratorio, la exposición frecuente a hidrocarburos aromáticos que se encuentran en el hollín y los alquitranes parecen causar ciertas formas de cáncer a largo plazo.

Vegetación.

De todos los hidrocarburos sólo uno tiene efectos adversos en las plantas; el etileno, que limita el crecimiento en las plantas.

Materiales.

El hollín procedente de hidrocarburos no quemados, ensucian superficies

1.4.5 Óxidos de nitrógeno.

☛ Características.

De todos los óxidos de nitrógeno sólo el óxido nítrico(NO) y el dióxido de nitrógeno(NO₂) son importantes contaminantes del aire. El NO₂ es producto de la oxidación del NO, tiene capacidad para absorber la luz visible, es un gas de color café-rojizo de olor irritante.

☛ Fuentes de emisión.

Son producto de la descomposición orgánica en suelos y océanos, otra fuente de importante son los procesos de combustión de carbón y gas natural, al liberar óxido de nitrógeno.

☛ Efectos en el medio ambiente.

Salud.

El NO₂ es irritante y está potencialmente relacionado con la fibrosis pulmonar crónica. Agrava las enfermedades respiratorias y cardiovasculares.

Vegetación.

El NO₂ inhibe el crecimiento de las plantas, provoca la caída prematura de las hojas.

Materiales.

Destefimiento de pinturas.

Otros.

Al absorber el NO₂ la luz reduce la visibilidad, además al reaccionar con los hidrocarburos, juntos forman el smog fotoquímico.

1.4.6 Oxidantes fotoquímicos.

☛ *Características.*

Son conocidos como oxidantes fotoquímicos, aquellas sustancias que pueden oxidar el ion yoduro del yoduro de potasio, tales como: ozono (O₃), nitrato de peroxiacetilo (NPA) y nitrato de peroxibencilio (NPB). El ozono y el NPA están presentes en altas concentraciones.

☛ *Fuentes de emisión.*

Son producto de reacciones químicas de contaminantes primarios y otras sustancias.

☛ *Efectos en el medio ambiente.*

Salud.

El NPA y el NPB causan severa irritación en los ojos y, en combinación con el ozono, irritan la nariz y la garganta, producen constricción del pecho y a concentraciones altas (3,900 µg/m³) producen fuerte tos e incapacidad de meditación.

Vegetación.

El ozono provoca lesiones en las hojas de las espinacas, los frijoles pintos, los tomates, y los pinos blancos son los más susceptibles de ser atacados, además limita el crecimiento en los cítricos.

El NPA ataca igualmente a las hojas, cubriéndolas de un color planteado o bronceado, las hojas juvenes son las más sensibles al NPA.

Materiales.

El ozono ataca el hule sintético, con lo que reduce la vida de las llantas de autos, el aislamiento del hule, etc. También ataca la celulosa de los textiles, reduciendo su resistencia. Todos los oxidantes decoloran las telas.

Otros.

Participan en la reducción de visibilidad, dándole a la atmósfera un color parduzco.

1.4.7 Asbestos y metales.

☛ *Características.*

En algunos casos se les conoce como contaminantes menores, debido a que son emitidos en cantidades pequeñas, o se restringen a determinadas áreas. La mayoría de

las personas afectadas por este tipo de contaminantes tienen una estrecha relación con ellos, debido a su trabajo, para solucionarlo se han establecido normas de seguridad.

➤ Efectos en el medio ambiente.

Salud.

Los individuos cuyas ocupaciones los exponen al asbesto, tienen una mayor incidencia de cáncer bronquial. El berilio ha demostrado ser peligroso para la salud, al producir efectos letales tanto agudo como crónicos al ser inhalado, además produce daños en la piel y en los ojos. El mercurio causa daños en el sistema nervioso central, en los riñones y en el cerebro.

1.5 Dispersión de contaminantes atmosféricos.

Se puede considerar que el ciclo del aire contaminado consta de tres fases: la liberación del contaminante desde una fuente; el transporte y la dispersión en la atmósfera; y la recepción del contaminante por fuentes receptoras.

En el **esquema 1.2** se muestra el ciclo de vida de los contaminantes.



FIGURA 1.2 Esquema del ciclo de vida de los contaminantes.

En la primera fase del ciclo es importante, para efectos de calidad del aire, conocer ciertas características de las emisiones como son: el tipo de fuente de la cual provienen y la duración de la liberación de contaminantes.

Cuando los contaminantes se encuentran suspendidos en la atmósfera, puede ocurrir que estos sean dispersados en el aire y transportados por el viento, o bien, que sufran transformaciones químicas. La influencia de condiciones meteorológicas es relevante en ésta segunda fase del ciclo.

La *dispersión de los contaminantes atmosféricos* está controlada principalmente por dos mecanismos de circulación atmosférica: la turbulencia y el viento. Cuando tiene lugar un óptimo proceso de dispersión se registran niveles bajos de contaminación sobre la región considerada.

En términos generales, se puede decir que la turbulencia provoca una mezcla vigorosa en la región de la atmósfera conocida como capa límite. Esta mezcla se logra debido a la formación de remolinos, producidos por la fricción de las masas de aire con la superficie de la tierra, el choque de ráfagas de viento con obstáculos tales como edificios, árboles, etc., o bien, por calentamiento de parcelas de aire mediante el calor emitido por el suelo. El viento es importante porque su velocidad determina el transporte de los contaminantes y su dirección controla la trayectoria general de estos.

Por otro lado, cuando se encuentran suspendidos en la atmósfera, los contaminantes están sujetos a cambios físicos y químicos. Estas transformaciones están relacionadas con la abundancia de vapor de agua, la temperatura del aire, la intensidad de la radiación solar, y la presencia o ausencia de otras sustancias atmosféricas. De manera similar la remoción de contaminantes por el proceso de precipitación, por depositación gravitacional, o por absorción en superficies e impactación, están relacionadas con el estado de la atmósfera.

Finalmente, los contaminantes al ser inhalados por los seres vivos, podrían traer como consecuencia daños a corto y largo plazo en salud. Además al depositarse sobre superficies, algunos provocan el deterioro de determinados materiales y en el caso de las plantas pueden producir el desarrollo de enfermedades.

1.5.1 Turbulencia.

La turbulencia en términos generales implica un estado en el cual existen variables, que exhiben fluctuaciones aleatorias evidentes, de modo que en la práctica sólo se reconocen y están sujetas a análisis las propiedades estadísticas.

El viento, al igual que la temperatura son variables turbulentas por existir pequeñas perturbaciones en su comportamiento normal. En el caso del viento al chocar con obstáculos, tales como árboles o edificios se producen desviaciones en el flujo que pueden dar lugar a la formación de remolinos. La radiación solar, en días despejados calienta la superficie y esto provoca que las parcelas de aire se calienten y asciendan generando turbulencia.

Las características más sobresalientes de la turbulencia son que:

- ☛ Los movimientos no son predecibles en detalle.
- ☛ Las fluctuaciones son tridimensionales.
- ☛ Propiedades tales como el calor y la humedad son mezcladas eficientemente
- ☛ Es necesario introducir energía para mantener la turbulencia.

Debido a que es muy difícil predecir la evolución de un flujo turbulento en forma determinística, se ha utilizado un enfoque común al hacer un estudio de turbulencia que consiste en separar las variables en una parte promedio y una perturbación.

Existen dos tipos de turbulencia en la capa límite: la térmica, producida por el calentamiento de la atmósfera y la mecánica, producto de la acción cortante del viento. Es común que ambos efectos estén presentes en la atmósfera, sin embargo siempre va a dominar una de las dos turbulencias. Las turbulencias térmicas prevalecen en los días soleados con vientos ligeros; las turbulencias mecánicas dominan en las noches con vientos.

1.5.2 Turbulencia térmica.

A grandes rasgos se puede decir que la **turbulencia térmica o bouyancia** se presenta en días soleados y con vientos ligeros, cuando la radiación solar calienta la superficie y crea térmicas o parcelas de aire caliente que ascienden generando remolinos, como se observa en la **figura 1.3**. Dichos remolinos le dan a la atmósfera una mayor capacidad de mezcla, que permite una mejor dispersión de contaminantes.

Para estimar la capacidad de mezclado en la atmósfera es necesario determinar su grado de estabilidad. Una **atmósfera estable** es aquella que tiende a suprimir los movimientos verticales, por tanto entre menos estabilidad exista mejores serán las condiciones de dispersión.

Si se desea saber el grado de estabilidad de una atmósfera, debido a la turbulencia térmica; es necesario conocer el comportamiento vertical de la temperatura y el grado de humedad de la atmósfera, lo anterior se realiza mediante una comparación del gradiente de temperatura ambiental con la tasa de cambio adiabática seca o húmeda, dependiendo del tipo de atmósfera.

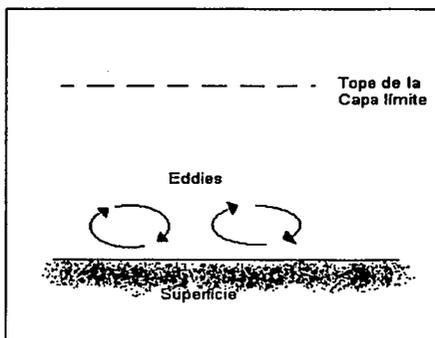


FIGURA 1.3 Remolinos generados por el ascenso de térmicas.

1.5.2.1 Temperatura y tasas de cambio.

➤ Variación vertical de temperatura.

En promedio la temperatura sobre la vertical tiende a disminuir conforme se incrementa la altura en la troposfera. Si esto no ocurre significa que existe una o más capas cuya temperatura es mayor que la de capas inferiores, entonces se dice que existe una inversión térmica.

A la razón de cambio de la temperatura con la altura se le denomina **gradiente térmico** o **perfil térmico**. Si se toma en cuenta la variación real de la temperatura con la altura de un lugar determinado, se dice que el gradiente térmico es real y se expresa por la siguiente ecuación.

$$\theta = -\frac{dT}{dz} \approx \frac{\Delta T}{\Delta z} = \frac{T_2 - T_1}{z_2 - z_1} \quad \text{1.1}$$

donde dT es el cambio de temperatura; dz el cambio de altura, y el signo menos se utiliza para indicar que la temperatura disminuye con la altura.

➤ Gradiente adiabático seco.^{1.3}

Para determinar el grado de estabilidad de la atmósfera en un lugar determinado es necesario hacer una comparación entre la tasa de cambio real y un gradiente de referencia. Este gradiente de referencia se determina mediante el método de la parcela, que supone el movimiento ascendente de una pequeña parcela de aire que al elevarse encontrará una presión menor y por tanto experimentará una expansión, dando como resultado una temperatura menor. Se presupone una expansión lo suficientemente rápida como para que el volumen de aire no intercambie energía con la atmósfera que la rodea (proceso adiabático).

La expresión que permite encontrar el valor del gradiente adiabático seco es la siguiente:

$$\Gamma_{\text{adi seco}} = -\frac{g}{C_p} \quad \text{1.2}$$

donde g es la aceleración de la gravedad y C_p es el calor específico a presión constante.

En unidades SI, C_p para el aire seco equivalente a 1.005 kJ/kg°C a la temperatura ambiente, y g es 9.806 m/s².

^{1.3} La deducción del gradiente adiabático seco se presenta en el ANEXO A.



Con base a dichos datos se tiene que $\Gamma_{\text{adia seca}} \approx 1^\circ\text{C}/100 \text{ m}$. Esto significa que el gradiente adiabático seco considera un decremento de 1°C cada 100 metros conforme se asciende en la troposfera.

➤ Gradiente adiabático húmedo.^{1.4}

Cuando la atmósfera está saturada con vapor de agua, el gradiente de referencia no es el mismo que para una atmósfera seca, debido a que al elevarse la parcela de aire parte del vapor de agua se condensa y durante este proceso el agua libera energía que tiende a elevar la temperatura del volumen de aire. Al mismo tiempo al expandirse la parcela de aire como resultado de una disminución de la presión la temperatura tiende a disminuir. En términos generales el gradiente adiabático húmedo significa una disminución de la temperatura conforme aumenta la altura, sin embargo ésta disminución será menor que para el caso del gradiente adiabático seco. La tasa de cambio adiabática saturada es aproximadamente igual a $0.6^\circ\text{C}/100 \text{ m}$.

La expresión matemática para el gradiente adiabático saturado es:

$$\Gamma_{\text{adiasat}} = \frac{g}{C_p} + \frac{\Delta H}{C_p} \frac{dw}{dz} \quad \text{1.3}$$

donde z es la altura en la vertical, g es la aceleración de la gravedad, C_p es el calor específico a presión constante, w es la relación entre la masa de vapor de agua y la masa de aire seco por volumen de aire atmosférico. Para un cambio diferencial dw del agua de la fase líquida, según asciende la porción de aire, la liberación de energía a la fase de vapor es $\Delta H dw$ en términos de la energía por masa unitaria de aire seco.

Cuando la temperatura ambiental real disminuye con la altura más rápidamente que el valor del gradiente adiabático seco, se dice que el gradiente térmico real es superadiabático.

Cuando el gradiente ambiental es menor que el gradiente adiabático, se dice que es subadiabático.

Temperatura potencial.^{1.5}

El viento y el calentamiento de la superficie terrestre mediante radiación solar provocan que el perfil real de temperatura en la atmósfera rara vez tenga un comportamiento adiabático, por ello es necesario relacionarlos de alguna manera.

^{1.4} La deducción del gradiente adiabático húmedo se presenta en el ANEXO B.

^{1.5} La deducción de la temperatura potencial se presenta en el ANEXO C.

La temperatura potencial es la que expresa la fluctuación del perfil real de temperatura con respecto al gradiente adiabático. Matemáticamente la temperatura potencial viene dada por:

$$\theta \cong T + \Gamma_z$$

Donde θ es la temperatura potencial, T es la temperatura real, Γ es el gradiente adiabático y z es la altura.

1.5.2.2 Estabilidad atmosférica.

Una atmósfera puede ser estable, inestable o neutra de acuerdo al tipo de equilibrio que ésta guarde. Es importante conocer el grado de estabilidad atmosférica, debido a que es útil para calcular su capacidad de dispersión de contaminantes.

Considérese una atmósfera cuya temperatura tiende a disminuir conforme aumenta la altura, si una parcela de aire se eleva y llega a estar más caliente que sus alrededores, debido a que su densidad es menor continuará elevándose; cuando la parcela de aire sufre un movimiento descendente ésta tendrá una temperatura menor que el aire circundante y por lo tanto continuará descendiendo. Este tipo de atmósfera se le conoce como **inestable**, en ella los movimientos ascendentes o descendentes de las masas de aire tienden a reforzarse. En la **figura 1.4** se muestra una gráfica donde se compara el comportamiento de la tasa de cambio ambiental con la tasa de cambio adiabática seca, además se fija el criterio de inestabilidad según el cual si el valor de la tasa de cambio ambiental es mayor que el gradiente adiabático seco entonces existirá inestabilidad en la atmósfera.

Se dice que una atmósfera es **estable** cuando tiende a suprimir los movimientos verticales, en este tipo de atmósfera la tasa de cambio ambiental es menor que el gradiente adiabático seco; en otras palabras, se observa un incremento de temperatura al aumentar la altura, cuando esto sucede las parcelas de aire que se elevan o descienden debido a una perturbación en la atmósfera, tienden a regresar a su posición original. Lo anterior se debe a que al elevarse una parcela de aire, ésta tiene una temperatura menor y por tanto una densidad mayor que las masas de aire aledañas, entonces la parcela se desplazará a su lugar de origen.

La atmósfera **neutra** se caracteriza por tener una temperatura uniforme, así cuando ocurren movimientos de masas de aire, estas no sufrirán desplazamientos adicionales a los provocados por las perturbaciones. La tasa de cambio ambiental de una atmósfera neutra es igual al gradiente adiabático seco.

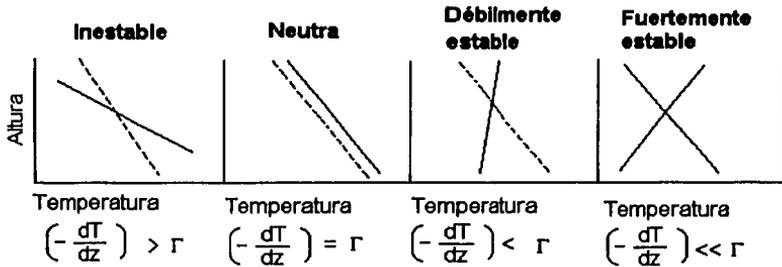


FIGURA 1.4 Tasa de cambio relacionada con la estabilidad atmosférica (tasa de cambio ambiental -, tasa de cambio adiabática —).

1.5.2.3 Tipos de inversiones.

Debido a la importancia de las inversiones térmicas en el proceso de dispersión, es conveniente dar una descripción de sus características y modo de generarse.

Por definición una inversión existe cuando el aire caliente se encuentra encima del aire frío. Esto puede llevarse a cabo por enfriamiento (usualmente radiativo) desde abajo; por calentamiento (usualmente adiabático) desde arriba; o por la advección de aire caliente sobre aire frío.

Inversiones debidas a enfriamiento.

Este tipo de inversiones ocurren cuando la superficie terrestre se enfría y por ende las capas de la atmósfera adyacentes a ésta alcanzan una temperatura inferior a las capas más elevadas, existe diversos factores que provocan el enfriamiento del suelo. La evaporación del agua en días lluviosos es uno de ellos.

Las inversiones por radiación también se deben al enfriamiento de la superficie. Durante el día la superficie de la tierra se calienta por radiación solar y por la noche el suelo sigue emitiendo radiación, enfriándose rápidamente. Las capas de aire cercanas al no recibir calor de la superficie se enfrían hasta alcanzar una temperatura inferior a la de las capas superiores, se forma entonces una capa de inversión adherida al suelo. La altura de esta capa de inversión puede extenderse de 50 a 100 metros. Las inversiones por radiación son características de la atmósfera baja en noches con cielos despejados y vientos ligeros o calmas.

Durante el período de **noches polares** en invierno y a grandes latitudes este tipo de inversión puede prolongarse por varias semanas.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Inversiones debidas a calentamiento.

Conforme el aire desciende en la atmósfera es sometido a presiones cada vez más altas, entonces el aire se comprime y calienta; hasta alcanzar una temperatura mayor a la del aire de las zonas más bajas a este tipo de inversión se le conoce como inversión de **subsistencia**. Durante los anticiclones (áreas de alta presión atmosférica) este fenómeno es bastante común, las masas de aire bajan lentamente a razón de 1 kilómetro por día (ver recorrido A-B en la figura 1.5 b). Si se supone que el aire no está saturado de vapor de agua, este podría calentarse de acuerdo al gradiente adiabático seco a razón de 1°C cada 100 metros. Para el descenso diario de la masa de aire, ésta podría calentarse a razón de 10 °C por día. En las latitudes medias la inversión por subsistencia debida a anticiclones puede persistir durante dos o tres semanas.

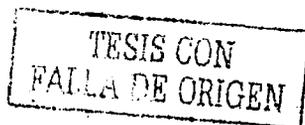
La subsistencia también puede ocurrir por el movimiento de masas de aire caliente encima de masas de aire estancadas y frías, como ocurre en zonas rodeadas por montañas en las cuales el aire estancado y frío es atrapado por masas de aire caliente, como se puede apreciar en la figura 1.5 c.

Una inversión de pequeña escala debida a calentamiento adiabático, es la formada en la base de nubes, son usuales de las tardes de verano cuando el cielo se encuentra cubierto de pequeñas nubes cúmulos. El patrón de nubes y la densidad no es casual, es una expresión visual de sistemas de circulación multi-celulares (ver figura 1.5 d). Estas nubes se forman mediante el ascenso de térmicas calientes y húmedas desde la superficie, en su camino dichas térmicas se enfrían y el vapor de agua se condensa dando lugar a la formación de nubes cúmulos, al condensarse el agua libera energía en forma de calor latente, esto da lugar a la formación de una capa más caliente por debajo de las nubes, la cual constituye a su vez una capa de inversión.

Inversión debida a advección.

Los frentes en meteorología son superficies que separan masas de aire contrastantes, siempre se caracterizan por una inversión debido a que la masas de aire caliente son invariablemente superiores a las de aire frío. Si el paso de un frente en un lugar determinado causa reemplazo del aire caliente por aire frío, entonces se llama **frente frío**, si ocurre el caso contrario se define un **frente caliente**. Debido a su movimiento las inversiones frontales tienen un periodo de vida corto y no son muy importantes en cuanto a calidad del aire. Sin embargo pueden ocurrir muchos problemas con movimientos lentos de frentes calientes, porque estos se restringen a regiones cerca de la superficie.

Las inversiones por advección también se dan cuando masas de aire caliente pasan sobre superficies frías, cuerpos de agua o terrenos cubiertos con nieve.



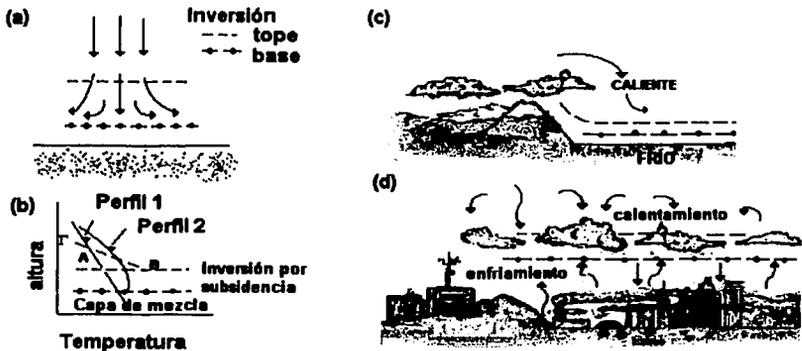


FIGURA 1.5 (a) Inversión formada por calentamiento adiabático debido a subsidencia. (b) En un anticiclón. (c) En la faldra de una montaña. (d) En celdas de convección entre nubes.

1.5.3 Turbulencia mecánica.

La turbulencia mecánica es resultado de la fricción entre el aire y la superficie, que causa cortante del viento en la vertical. Asimismo, obstáculos tales como árboles o edificios causan desviaciones en el flujo que pueden dar lugar a estelas turbulentas (figura 1.6).

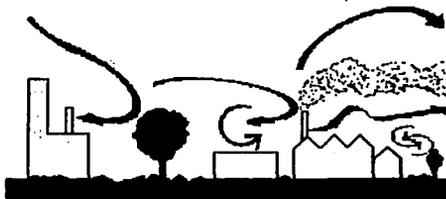


FIGURA 1.6 Turbulencia generada por desviaciones del flujo debidas a obstáculos como árboles o edificios.

➤ Perfil de velocidad del viento.

El comportamiento de la velocidad del viento en las diferentes capas adyacentes a la superficie varía dependiendo de diferentes factores, al cambio de velocidad con

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

respecto a la distancia sobre la vertical se le da el nombre de **perfil de velocidad del viento** o **gradiente de la velocidad del viento**, el cual se define como:

$$\frac{du}{dz}$$

donde u = velocidad del viento, z es igual a la distancia en la vertical.

El movimiento de las masas de aire cerca de la superficie se encuentra afectado por la configuración del terreno. Cuando el viento en su recorrido se encuentra con obstáculos, estos provocan la formación remolinos. Por otro lado las masas de aire al chocar con la superficie producen un efecto de fricción proporcional a la rugosidad del suelo que genera turbulencia, a mayor rugosidad del terreno será mayor el alcance del efecto de fricción. Estos factores provocan que la velocidad del viento en las distintas capas de la atmósfera baja tenga fluctuaciones.

Existe una altura donde la velocidad del viento se estabiliza, entonces el efecto de la fricción es despreciable, cuando esto ocurre, la turbulencia tiende a suprimirse y la velocidad del viento alcanza su máximo debido a que no es retrasado por la fricción.

Debido a los cambios de velocidad del viento con respecto a la altura, cualquier valor de velocidad del viento se deberá citar haciendo referencia a la elevación en que fue medida. La norma internacional convenida es de 10 metros.

Para conocer la velocidad del viento a una altura diferente a la norma se han establecido diferentes expresiones, sin embargo debido a la complejidad del fenómeno no se ha encontrado una expresión satisfactoria.

Una expresión utilizada es la ley de exponenciales de Deacon:

$$\frac{u}{u_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^p$$

donde u es la velocidad del viento a la altura z , u_1 es la velocidad del viento a la altura z_1 y p es el exponente positivo, con un valor entre cero y uno.

El espesor de la capa límite y del perfil de velocidad del viento, es una función de la estabilidad atmosférica, por ello para elegir p se consideran las condiciones de estabilidad de la atmósfera. La relación esta dada por:

$$p = \frac{n}{2-n}$$

Los valores de n están dados en la **tabla 1.2**.

Condición de estabilidad	n
Tasa de cambio grande	0.20
Tasa de cambio pequeña o cero	0.25
Inversión moderada	0.33
Inversión grande	0.50

TABLA 1.2 Relación entre el parámetro de estabilidad, n, en la ecuación y la condición de estabilidad en la atmósfera.

1.5.4 Circulación del viento.

Otro factor meteorológico que influye en la dispersión de contaminantes en la atmósfera es la circulación del viento, el cual depende de las distintas fuerzas que actúan sobre él, una de estas fuerzas es conocida como el **gradiente de presión**, el cual es originado por la diferencia de temperatura en la horizontal y que hace fluir el aire de las regiones de alta presión a las regiones de baja presión, es decir de las zonas calientes a las zonas frías; dicha diferencia de temperatura se debe a que la radiación solar que recibe la superficie varía de un punto a otro de acuerdo con la estación del año, la hora del día, la ubicación geográfica y la composición del terreno (el suelo desnudo accidentado absorbe mucha más radiación que el hielo o superficies rocosas altamente reflejantes).

Otra de las fuerzas que actúa sobre las masas de aire en las capas bajas de la atmósfera es la **fuerza de Coriolis**, en ocasiones también llamada **deflexión horizontal**, es una fuerza originada por la rotación de la tierra, la cual explica la aparente desviación de una porción de aire en movimiento, hacia la derecha con respecto a la dirección del viento. La fuerza de Coriolis (F_c) está en función de la velocidad de la porción de aire, la latitud y la velocidad angular de rotación de la Tierra. Es máxima en los polos terrestres y mínima en el ecuador.

El último tipo de fuerza que tiene influencia en la circulación del aire en la atmósfera baja se le llama **fuerza de fricción**, la cual es provocada por los obstáculos en la superficie terrestre y retrasa el movimiento del aire cerca ésta, además reduce la fuerza de Coriolis.

➤ Efecto de las fuerzas sobre una masa de aire contaminantes.

Dependiendo de las fuerzas que actúen sobre una masa de aire, estas tendrán diferente impacto en el medio ambiente.

Si se considera un sistema de alta presión, el flujo tiende a dirigirse hacia abajo, este flujo descendente se denomina **asentamiento** y es un posible inhibidor de la dispersión de los contaminantes en la atmósfera.

En un sistema de baja presión, el fluido tiende a dirigirse hacia arriba y con ello los contaminantes en la parte inferior de la atmósfera serán arrastrados hacia arriba y, por lo general, se dispersarán sobre una amplia área. Además, según se eleva el aire, se enfriará como resultado de la disminución de la presión a mayores elevaciones. Puede ser que el agua se condense dentro de la masa de aire ascendente. Este efecto podrá servir como una acción de limpieza sobre una atmósfera contaminada.

La dirección del viento en la capa límite planetaria tiene una importante repercusión sobre el patrón de dispersión de los contaminantes emitidos por chimeneas. El ángulo de desplazamiento de la dirección de viento debido a la fricción varía desde un valor máximo cerca de la superficie de la Tierra y cae esencialmente a cero en la parte superior de la capa límite.

1.5.5 Tipos de fuentes de emisión.

Un conocimiento completo de las emisiones requiere información de la *configuración de la fuente* incluyendo su forma, duración y altura. Estos criterios son utilizados en el esquema de clasificación de la **tabla 1.3**, la cual incluye varias de las fuentes encontradas en la capa límite. Las chimeneas son las más importantes de las **fuentes puntuales**, que además pueden originar altas concentraciones de material nocivo o extraño. Existe una considerable cantidad de trabajos acerca de la dispersión de efluentes emitidos por fuentes puntuales. Un camino altamente transitado es el ejemplo más común de **fuerza lineal** este asume que la integración de emisiones de vehículos separados constituye una línea continua. Las ciudades son las principales **fuentes de área**, en estas se agrupan las emisiones individuales de múltiples fuentes pequeñas para dar un promedio de área. En la práctica el modelo elaborado para una región urbana consiste frecuentemente en dividir la región en una malla cuadrículada, asignándole a cada cuadro una determinada emisión. Los congestionamientos vehiculares son tratados como fuentes lineales dependiendo de la densidad del tráfico, y la mayor parte de las fuentes puntuales son tratadas por separado. Esto sin embargo depende de la escala del estudio, por ejemplo, en un continente las ciudades podrían ser tratadas como fuentes puntuales.

Forma	Duración	Altura	Ejemplos
Puntual	Continua	Elevada	Emisión de chimenea
		Superficie	Fogata
	Instantánea	Elevada	Explosión de una bomba
Línea	Continua	Superficie	Explosión en zona minada
		Superficie	Congestionamiento
	Instantánea	Elevada	Ruta dejada por un avión de propulsión
Área	Continua	Elevada	Ciudades, incendios forestales

TABLA 1.3 Clasificación de los tipos de fuentes de emisión.

1.5.6 Características generales de las plumas de las chimeneas

Debido a las perturbaciones generadas por la turbulencia de la atmósfera, las formas geométricas generales de las plumas de gas emitidas por las chimeneas son muy diferentes. Puede también ocurrir una transición gradual de uno a otro tipo de pluma, dependiendo de como cambien las condiciones atmosféricas.

En la **figura 1.7** se muestra una clasificación del comportamiento de las plumas. Además se indican los perfiles aproximados de velocidad y temperatura.

La **pluma de espiral** (**figura 1.7a**) ocurre en condiciones altamente inestables. Este tipo de plumas dan lugar a que los contaminantes se dispersen en una amplia zona. Sin embargo también se generan remolinos suficientemente grandes que arrastran parte de la pluma a nivel del suelo durante breves periodos de tiempo, esto provoca que se den altas concentraciones en ciertas partes de las zonas aledañas a las emisiones.

La **pluma de cono** que se muestra en la **figura 1.7b** tiene lugar cuando existe poca turbulencia mecánica y una estabilidad cercana a la neutra. La superficie casi no es calentada por la radiación solar debido a la presencia de nubes que impiden su paso, los vientos van de moderados a fuertes. Cuando se da una pluma de este tipo los contaminantes son arrastrados a zonas alejadas de la fuente de emisión antes de que lleguen a nivel del suelo.

La **pluma de abanico** se forma cuando existe una fuerte inversión térmica por encima de la altura de la chimenea. La condición para que se de este tipo de pluma es una atmósfera extremadamente estable, sin turbulencia mecánica. Cuando la pluma tiene una densidad parecida a la del medio ambiente, entonces seguirá el camino trazado por la dirección del viento, sin tener fluctuaciones considerables en la altura (ver **figura 1.7c**).

Las **plumas de fumigación** (**figura 1.7d**) ocurre cuando existe una capa de inversión por encima de la altura de la fuente de emisión. Este tipo de pluma son típicas de mañanas soleadas con vientos ligeros, antecedidas por noches con inversiones estables. Durante la mañana la superficie se calienta mediante radiación solar, lo cual provoca la formación de una capa inestable que va aumentando en altura hasta superar el tamaño vertical de la chimenea, entonces se empieza a formar una pluma de fumigación. Las plumas de fumigación son desfavorables para efectos de calidad del aire, pues da lugar a altas concentraciones en superficie, afortunadamente este fenómeno sólo dura cerca media hora.

Las condiciones para que se de una **pluma de flotación** son contrarias a las de la pluma de fumigación. Existe una capa estable adherida a la superficie, cuya altura se encuentra debajo de la pluma. Después de esta capa se encuentra una capa inestable, en la cual la pluma se dispersa. A diferencia de las plumas de fumigación, las plumas

de flotación ocurren al caer la tarde, cuando hay cielos despejados. Este tipo de pluma resulta favorable para la dispersión de contaminantes, ya que estos son arrastrados sin dar lugar a altas concentraciones a nivel de superficie. Una pluma de flotación se observa en la figura 1.7e.

Cuando existe una inversión tanto por abajo como por arriba de la altura de la chimenea, se tiene como resultado un atrapamiento (ver figura 1.7f). La difusión de contaminantes se restringe a la capa entre las dos regiones inestables.

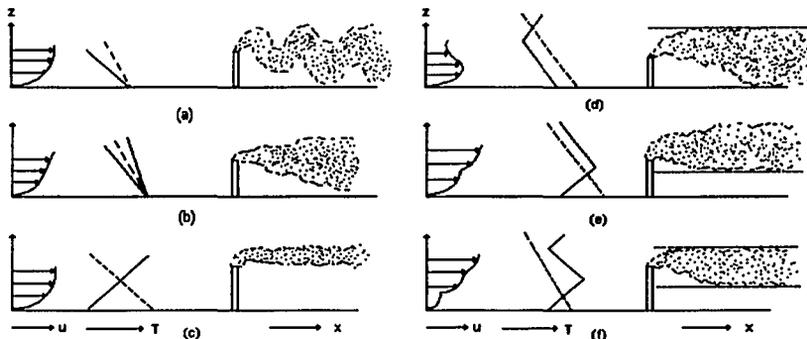


FIGURA 1.7 Perfiles típicos de velocidad, temperatura y forma de las plumas, para diferentes condiciones atmosféricas (tasa de cambio adiabática seca —; tasa de cambio ambiental -.) a) de espiral, gran inestabilidad; b) de cono, cerca de la estabilidad neutral; c) de abanico, inversión de superficie; d) de fumigación, inversión de flotación; e) de flotación, inversión por debajo de la chimenea; f) de atrapamiento, inversión por debajo y por encima de la altura de la chimenea.

Bibliografía

- ⊗ B. Raga Graciela (1996): *Diplomado en Meteorología*. Apuntes. UNAM, México D.F.
- ⊗ García-Colín Scherer, Varela Ham Juan Rubén (1996): *Contaminación Atmosférica*. Editorial El Colegio Nacional, México D.F.
- ⊗ K. Wark (1994): *Contaminación del aire, origen y control*. Editorial Limusa, México D.F.

- ⊗ O. G. Sutton (1955): *Atmospheric turbulence*. Methuen & Co.
- ⊗ Oke, T.R. (1978): *Boundary Layer Climates*. John Wiley & Sons, New York, NY.
- ⊗ Warneck, Peter (1988): *Chemistry of the natural Atmosphere*. Academic Press, inc.

CAPITULO II.

Descripción de modelos de dispersión atmosférica.

SINOPSIS

El uso de los modelos ya sean físicos o matemáticos ha encontrado una amplia aplicación en el área de contaminación del aire.

En la actualidad, dichos modelos son utilizados como una herramienta para tomar decisiones en cuanto a el establecimiento de legislaciones ambientales; la evaluación de técnicas y estrategias de control de emisiones; y la determinación de la ubicación de fuentes de emisión futuras de manera tal que afecten la calidad del aire lo más mínimo posible.

Para la selección y desarrollo del modelo adecuado es indispensable considerar ciertos puntos como son: determinar los contaminantes de interés, el periodo sobre el cual se van a realizar los pronósticos (corto o largo plazo), las limitaciones tecnológicas, las características de la zona de estudio y finalmente si se cuenta con los datos necesarios para alimentar el modelo.

En cuanto a los fenómenos físicos que se deben de incluir en el momento de desarrollar un modelo de calidad del aire están: la turbulencia en las capas bajas de la atmósfera, las reacciones químicas que tienen lugar en el aire, el transporte de material contaminante y la depositación de estos.

Para la representación de dichos fenómenos se utilizan tanto modelos deterministas como estadísticos. Además los modelos van desde aquellos sumamente sencillos hasta los que incorporan gran variedad de fenómenos.

Por otro lado los modelos de calidad de aire se pueden dividir dentro de los siguientes grupos: modelos de dispersión, modelos de receptores, modelos meteorológicos, modelos fotoquímicos y además se pueden utilizar métodos estadísticos para el estudio de la contaminación atmosférica. En el presente trabajo sólo se hará referencia a los modelos de dispersión.

El modelo más sencillo se conoce con el nombre de lineal regresivo, el cual se basa en la idea de que para disminuir la concentración de contaminantes se requiere una reducción de emisiones en las fuentes, este modelo funciona razonablemente si se aplica a contaminantes poco reactivos, pero en el caso de contaminantes secundarios el modelo tiene un amplio margen de error.

Los **modelos empíricos simples** siguen en la escala de complejidad, se basan en la medición de contaminantes y otras variables importantes (muchas de ellas meteorológicas) monitoreadas en la región de estudio, los modelos empíricos relacionan de alguna manera la información; el punto débil de dichos modelos se encuentra en que sólo son eficientes para pronósticos de corto plazo y son elaborados específicamente para una determinada región.

Los **modelos matemáticos simples** no se basan completamente en mediciones, pero suponen ciertas características. El más popular dentro de esta clasificación es el modelo gaussiano, el cual fue desarrollado en sus inicios para contaminantes poco reactivos y considera que la distribución de los contaminantes a través de la pluma emitida por una fuente tiene una forma gaussiana.

Los **modelos matemáticos complejos** introducen una serie de descripciones matemáticas de procesos que ocurren durante la dispersión de contaminantes como: la turbulencia, las reacciones químicas, el transporte y deposición de contaminantes. Estos modelos se basan para su formulación en dos métodos: los métodos eulerianos y los lagrangianos. El primero de estos métodos divide a las variables turbulentas en una parte media y una perturbación, luego sustituye dichos valores en la ecuación de concentración de especies reduciéndola aplicando promedios de variables turbulentas y de Reynolds; una vez aplicados los promedios surge el **problema de clausura** debido a la generación de nuevas variables que hacen que la solución analítica del sistema sea compleja, los métodos surgidos con la finalidad de resolver este problema se les conoce como métodos eulerianos siendo el más popular el de **teoría K**, cabe señalar que sólo se presentan las soluciones finales de este método pues el objetivo del presente trabajo es diseñar un modelo en base a métodos Lagrangianos.

El otro método para el tratamiento de dispersión atmosférica es el llamado **método de Lagrange**, el cual considera un sistema de parcelas de aire en movimiento. La concentración de las especies son tratadas como una cadena de markov, debido a que se considera que la probabilidad de transición de una partícula depende únicamente del estado actual. Varios autores han encontrado que la probabilidad de transición obedece a una función de distribución normal, cuando esto ocurre el modelo se convierte en gaussiano.

Existe también otro tipo de modelos lagrangianos en los cuales se trata a la fluctuación de la velocidad del viento como un proceso markoviano, estos modelos se basan en la ecuación diferencial estocástica de Langevin, en este tipo de modelos la posición de la partícula se obtiene en base a su posición anterior, y la concentración de un contaminante se obtiene mediante la suma de todas las partículas que en un momento t se encuentran dentro de una unidad de volumen. Otra forma de determinar la concentración es suponiendo que las partículas siguen el comportamiento de una función de distribución dada, siendo la más utilizada la distribución normal.

2.1 Modelación de sistemas.

Desde su origen el hombre ha tratado de predecir el comportamiento del mundo, en un principio utilizó caminos mágicos y religiosos. Posteriormente al intentar realizar una predicción científica de la naturaleza y de otros **sistemas** de interés hizo uso de las matemáticas. Lo anterior queda de manifiesto al recordar que aún los más elementales conceptos matemáticos provienen de la necesidad de crear un modelo para representar una realidad determinada; así la medición de tierras dio lugar al surgimiento de la geometría, los números negativos han sido utilizados para representar situaciones adversas como son las deudas o pérdidas en una empresa.

Sin embargo, al modelar un sistema no siempre se recurre a un **modelo matemático**, en algunas ocasiones se utiliza un **modelo físico**, los cuales pueden constituir modelos a escala que tratan de reproducir las leyes que rigen al sistema real.

Como se ha mencionado hasta el momento un modelo sirve para representar el comportamiento de un sistema. Antes de proseguir describiendo las diferentes clasificaciones de los modelos es necesario establecer que se entiende por **sistema**. En general se define un sistema como un conjunto de elementos que tienen una interacción entre sí. Un sistema está formado por **entidades** las cuales representan a cada uno de los elementos de interés del sistema; el término **atributo** se usa para denotar alguna característica de la entidad y las **actividades**, son aquellos procesos que provocan cambios en el sistema. Cuando una actividad que ocurre fuera del sistema provoca un cambio dentro de este se le da el nombre de **actividad exógena**; en caso contrario cuando la actividad ocurre dentro del sistema se le llama **actividad endógena**. Si los cambios dentro de un sistema suceden de manera suave el sistema es **continuo** de otra manera se dice que el sistema es **discreto**.

Supongamos el sistema dispersión de contaminantes, una de las muchas entidades que forman el sistema sería el viento, caracterizado por tener una dirección y velocidad (atributos), una de las actividades del viento en el proceso de dispersión es la de transportar los contaminantes en una dirección determinada.

En un **modelo matemático**, las entidades de un sistema y sus atributos se representan por medio de variables, mientras que las actividades se describen mediante funciones que interrelacionan a las variables.

Una primera clasificación de los modelos matemáticos los divide en **estáticos** y **dinámicos**, los primeros relacionan las entidades de un sistema en equilibrio, mientras que los modelos dinámicos reflejan la manera en que cambia el comportamiento del sistema.

No existe un procedimiento que permita construir un modelo matemático, pero sí se pueden seguir un conjunto de principios generales sobre los cuales elegir la información que se va a incluir en el modelo. Primeramente es necesario **describir el sistema mediante bloques** con el propósito de detallar las interacciones entre las distintas partes del sistema, cada bloque debe tener la menor cantidad de variables de entrada y salida, para posteriormente describir el sistema como un todo. El segundo

paso es hacer una selección de los **aspectos relevantes** del sistema de acuerdo a los objetivos de estudio, con el fin de hacer más sencillo el modelo, recuérdese que uno de los principios más hermosos de las matemáticas es la sencillez. El tercer principio guía para la elección de la información a incluir en un modelo es la **exactitud** de ésta, el grado de exactitud se debe de igual manera elegir de acuerdo al objetivo de estudio. El último principio es la **agregación**, que consiste en determinar el grado de agrupamiento de las diferentes entidades individuales en otras más grandes.

Por otro lado, los modelos matemáticos, se pueden clasificar de acuerdo a la forma de resolverlos en modelos **deterministas** y de **Incertidumbre**, los primeros presuponen un conocimiento profundo del objeto de interés, que permite certeza en las predicciones. Por otro lado los modelos de **Incertidumbre** se utilizan cuando nuestro conocimiento del sistema es insuficiente para predecir con exactitud un comportamiento futuro.

Los modelos de incertidumbre tienen como propósito sistematizar de alguna manera la información incompleta del sistema. Para lograr lo anterior se apoyan en la **teoría de la probabilidad y la estadística matemática**. La primera se utiliza cuando se conoce por lo menos la probabilidad de ocurrencia de los posibles acontecimientos, la estadística matemática se usa cuando existe un completo desconocimiento de la probabilidad y es necesario deducirla con base a métodos.

2.2 Modelos de calidad del aire.

Los **modelos de calidad del aire** son una herramienta indispensable para:

- ☛ El establecimiento de una legislación para el control de emisiones; es decir, determinar las razones máximas de emisiones que permitan mantener los estándares de calidad del aire.
- ☛ Evaluación de propuestas de técnicas y estrategias de control de emisiones.
- ☛ Seleccionar la localización de futuras fuentes de emisión de tal manera que sea mínimo el impacto al medio ambiente.
- ☛ Definición de las estrategias de control inmediatas para evitar severos episodios de contaminación atmosférica en una cierta región.
- ☛ Evaluación del estado actual de la relación entre las fuentes de emisión y los niveles de contaminación.

Se debe de hacer un énfasis especial en señalar que los modelos de calidad del aire no son la solución al problema de la contaminación, son únicamente una herramienta que permite realizar los análisis de las situaciones descritas anteriormente.

Un modelo de calidad del aire debe tomar en cuenta por lo menos uno de los siguientes fenómenos.

- ☛ El transporte de contaminantes en la atmósfera.

Descripción de modelos de dispersión atmosférica

- ☛ La turbulencia atmosférica.
- ☛ Las reacciones atmosféricas químicas y fotoquímicas.
- ☛ La depositación de contaminantes.

La correcta representación de estos fenómenos y sus interacciones requiere un conjunto de varias ecuaciones, como se ilustra esquemáticamente en la **figura 2.1**. Los modelos de calidad del aire abarcan un amplio rango que va desde modelos empíricos hasta aquellos que incorporan emisiones, meteorología, reacciones químicas y depositación de contaminantes.

Para realizar un análisis mediante un modelo de calidad del aire de alguno de los problemas mencionados al inicio de este apartado se pueden seguir los siguientes pasos generales.

☛ Análisis del problema.

El análisis del problema requiere como mínimo la identificación de:

- ☛ El tipo de contaminante a considerar (reactivo o no reactivo):
- ☛ El tiempo promedio de interés, es decir concentraciones instantáneas, para problemas de olores por ejemplo; promedios horarios, para pronósticos a corto plazo; o promedios anuales, para pronósticos a largo plazo.
- ☛ Las características del dominio, entendido como la configuración topográfica del terreno, ya sea llana o rugosa.
- ☛ Las limitaciones computacionales, es decir elegir el grado de complejidad de las expresiones usadas, dependiendo de las facilidades computacionales.

☛ Selección del modelo apropiado.

La selección del modelo se hace tomando en cuenta los puntos citados para el análisis del problema. Además se debe de considerar si los fenómenos son mejor representados por modelos deterministas o de incertidumbre.

☛ Aplicación del modelo seleccionado.

La aplicación óptima del modelo se logra mediante su validación con datos meteorológicos y de contaminantes monitoreados en la localidad de interés. Únicamente los modelos que han sido verificados con datos registrados en el pasado pueden ser usados para predicciones futuras.

Por otro lado, la validación del modelo es en algunos casos difícil, cuando los datos meteorológicos y de contaminantes no están disponibles, o es imposible obtenerlos.

En las siguientes secciones se examinarán algunos de los modelos de calidad del aire desarrollados.

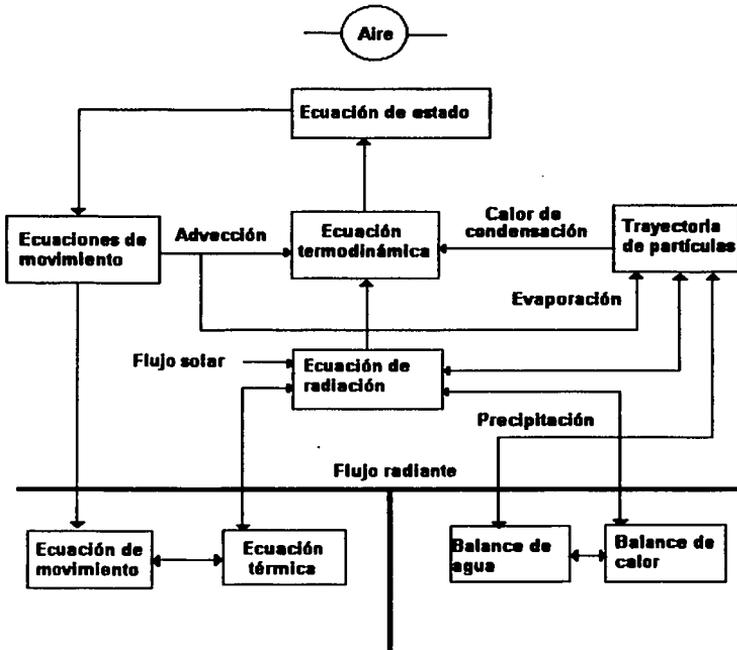


Figura 2.1 Ecuaciones usadas para describir los fenómenos que intervienen en el proceso de contaminación atmosférica.

2.3 Modelo lineal regresivo.

Este modelo se basa en asumir que las concentraciones de un contaminante disminuyen proporcionalmente al decrementar las emisiones de sus precursores. Para un contaminante tal como CO, por ejemplo, el porcentaje de las emisiones que se tendría que reducir para alcanzar el estándar de calidad del aire deseable (A_{CO}), en una

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

región que comúnmente ha registrado concentraciones tan altas como C_{CO} , es dado por la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \text{Porcentaje de reducción en las emisiones} &= \frac{(C_{co} - B_{co}) - (A_{co} - B_{co})}{C_{co} - B_{co}} \times 100 \\ &= \frac{C_{co} - A_{co}}{C_{co} - B_{co}} \times 100 \end{aligned}$$

donde B_{CO} es el contenido de CO que contiene el aire seco, el cual debe de ser tomado en cuenta.

Para contaminantes poco reactivos tales como CO, este modelo proporciona una estrategia de control razonable, si se considera la localidad, la distribución temporal y pocos cambios en las fuentes de emisión. Sin embargo para contaminantes secundarios como el ozono (O_3), el cual se forma a partir de reacciones químicas de contaminantes primarios, el modelo se torna simplista.

2.4 Modelos empíricos simples.

Los modelos empíricos simples correlacionan las concentraciones observadas de contaminantes en una localidad determinada, con otras variables relevantes. Las variables usadas son generalmente meteorológicas, ya que juegan un papel importante en la determinación de las concentraciones de contaminantes.

Un ejemplo de modelo empírico es el utilizado en la costa sur de California para predecir diariamente las concentraciones esperadas de ozono. El modelo se basa en el uso de un número de parámetros, principalmente meteorológicos, los cuales se miden constantemente durante el día. Estos parámetros son introducidos dentro del modelo para predecir la concentración pico de ozono y la visibilidad en ciertas localidades durante el día.

En un artículo publicado en 1975 por Zeldin y Thomas, se explica de manera detallada el procedimiento para la predicción de la concentración de ozono en la localidad de San Bernardino, ubicada cerca de Los Angeles California. Se asignan puntos de 0 a 10 (siendo 10 el máximo con respecto a la formación de oxidantes) a cada una de las siguientes categorías.

1. **Estabilidad (°C)** = $(T_{850mb} - T_{stc}) + (T_t - T_b)$

donde T_t = temperatura en el tope de la capa de inversión.

T_b = temperatura en la base de la capa de inversión.

T_{850mb} = temperatura en una altitud correspondiente a una presión de 850 mb.

T_{sfc} = temperatura en superficie

Este parámetro representa el alcance de la estabilidad con respecto a la capa de mezcla precisamente después de que se ha roto la inversión (primer término) más la intensidad de la inversión (segundo término).

2. **Temperatura (°C)** a una altura correspondiente a los 950 mb (~ 1800 pies), lo cual correlaciona aparentemente la intensidad de la radiación solar en la cual tienen lugar las reacciones fotoquímicas.
3. **Determinación de la altura** donde comienza la capa de inversión, lo anterior permite saber el volumen del aire dentro del cual los contaminantes son mezclados; cuando la altura de la capa de inversión es pequeña significa que los contaminantes se dispersan en un reducido volumen y que por lo tanto son de esperarse altas concentraciones.
4. **Obtención del gradiente total de presión** desde la costa hasta localidades ubicadas tierra adentro del sur de California. Esta medida determina el potencial de transporte de contaminantes desde zonas densamente pobladas como Los Angeles, hasta poblaciones que se encuentran tierra adentro.
5. **Día de la semana.** Los puntos asignados a esta categoría reflejan las diferencias de emisiones en los distintos días de la semana. En el área que comprende Los Angeles las emisiones provenientes de automóviles son importantes, por tanto es significativo considerar que el tráfico es menor los sábados y mayor los viernes.
6. **Mes del año.** Esta categoría refleja las diferentes intensidades de radiación solar en los meses de verano, comparada con los meses de invierno.

Los puntos asignados para cada categoría son agregados a una base de datos para predecir las concentraciones pico de ozono esperadas para un día determinado. En otras palabras, este modelo empírico se basa en el uso de observaciones de O_3 en la localidad de San Bernardino y desarrolla un sistema que reproduce los datos históricos registrados.

Los modelos empíricos son útiles para predicciones a corto plazo y en determinadas localidades, como el modelo descrito anteriormente. Además, los datos históricos deben de estar disponibles para desarrollar el modelo. Por otra parte, el modelo descrito no toma en cuenta cambios en la distribución de las fuentes de emisión, o en la mezcla de contaminantes. Finalmente la exactitud de las predicciones es baja para plazos mayores a un día, siendo imposible utilizarlos para estudios de efectos en el medio ambiente y determinación de estrategias de control.

2.5 Modelos matemáticos simples.

El siguiente paso en términos de sofisticación son los modelos matemáticos simples los cuales no se basan directamente en mediciones, pero ciertas características son inferidas a priori. Uno de los modelos más ampliamente usados es el modelo de pluma Gaussiano, originalmente desarrollado para contaminantes primarios y aplicado a plumas simples emitidas por fuentes puntuales. Posteriormente se ha ido haciendo más complejo.

2.5.1 Modelo de pluma Gaussiano.

El modelo básico de pluma Gaussiano describe la concentración de contaminantes provenientes de una fuente puntual, considerando una dirección del viento predominante. Si bien la aplicación más común se realiza con fuentes puntuales, ocasionalmente el modelo se aplica en fuentes lineales y de área.

El nombre se basa en la distribución de contaminantes através de la pluma, la cual tiene la forma de una campana de Gauss (figura 2.2). La concentración del contaminante [X] en varios puntos en el espacio con coordenadas (x,y,z), en dirección del viento desde la fuente de emisión, puede ser calculada usando este modelo si la altura efectiva de la fuente, la velocidad del viento y la estabilidad atmosférica son conocidas. Por ejemplo, para condiciones estables, o ilimitada mezcla vertical, la concentración de X se calcula con la ecuación:

$$[X] = \frac{10^6 Q e^{-y^2/2\sigma_y^2}}{U 2\pi\sigma_y\sigma_z} \left[e^{-z^2/2\sigma_z^2} + e^{-z-H)^2/2\sigma_z^2} \right]$$

[X] es la concentración del contaminante en μgm^{-3} en un punto con coordenadas (x,y,z), donde x se escoge de acuerdo a la principal dirección de transporte debida al viento, y es la distancia horizontal, z es la distancia vertical, Q es la razón de emisión de X desde la fuente (gm^{-1}), U es la velocidad del viento (ms^{-1}), H es la altura efectiva de la chimenea (en metros), la cual se obtiene considerando la máxima elevación que alcanzan los gases antes de que sea desviados en una dirección. Finalmente σ_y y σ_z son las desviaciones estándar de las distribuciones vertical y horizontal. Estas desviaciones estándar que describen la extensión de la pluma, dependen de parámetros meteorológicos.

El modelo inicial de pluma gaussiano se diseño para contaminantes poco reactivos tales como CO. Sin embargo, estos modelos han sido modificados para incluir contaminantes cuyas reacciones químicas pueden ser descritas por procesos de primer orden. Para obtener la concentración en una localidad determinada debido a un número de fuentes, simplemente se realiza una suma de la aportación individual de cada fuente.

La mayor desventaja del modelo Gaussiano es su incapacidad para tomar en cuenta las reacciones químicas involucradas en la formación de contaminantes secundarios, tales como O_3 , donde la simple adición de contribuciones para cada fuente puntual no es válida. Existen también otros problemas; por ejemplo, las variaciones en los parámetros meteorológicos sobre el área considerada no son fácilmente medibles.

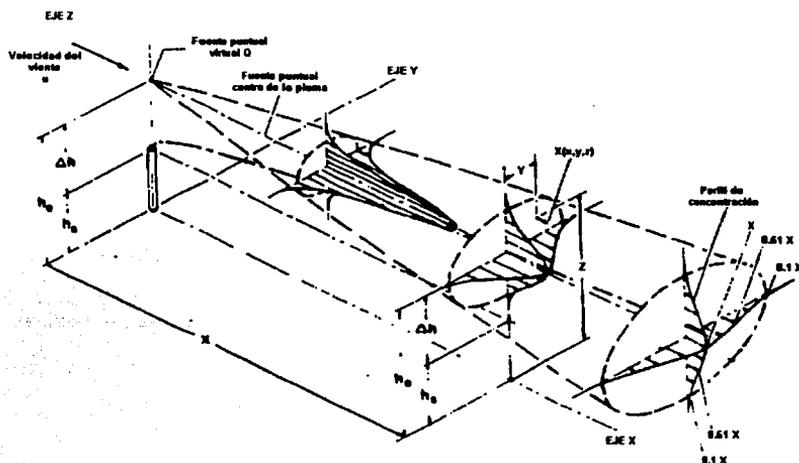


Figura 2.2 Diagrama del modelo de pluma gaussiano.

2.6 Modelos de dispersión tratados desde un punto de vista complejo.

Los modelos que tratan el problema de dispersión de una manera más compleja procuran incorporar descripciones matemáticas realistas de los diferentes procesos involucrados en el fenómeno de dispersión, tales como: especificación de emisiones, meteorología, química y disminución de la contaminación atmosférica.

2.6.1 Introducción de turbulencia en modelos de difusión

En el capítulo anterior se dió una idea intuitiva acerca del significado de turbulencia, en general se mencionó que la turbulencia implica la existencia de variables con

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

comportamiento irregular y fluctuaciones aleatorias, de manera tal que únicamente se pueden reconocer sus propiedades estadísticas. La turbulencia es un buen mecanismo para transportar calor, movimiento y otras propiedades representadas por variables que exhiben fluctuaciones.

Existen dos métodos para incorporar la turbulencia en el estudio de la difusión atmosférica. El **método de Euler**, el cual se caracteriza por dividir las variables turbulentas en una parte que represente el comportamiento medio y otra que refleje la perturbación. Después se sustituye dicha representación de las variables turbulentas en la ecuación de concentración, se aplican promedios de Reynolds y las nuevas variables generadas se parametrizan de acuerdo a diferentes métodos conocidos como eulerianos. El otro método utilizado en el estudio de la difusión atmosférica se le conoce como el **método de Lagrange**, en el cual los cambios de concentración en un punto son producto del movimiento del fluido, este último método es el que interesa en el presente trabajo.

Acerca del primer método sólo se darán referencias generales, pues el objetivo es desarrollar un modelo en base al método de Lagrange. Cabe señalar que el método de Euler requiere un tratamiento matemático más complejo y sin embargo, debido al problema de clausura, las soluciones que se obtiene no son exactas y por otro lado sólo son aplicables en ciertos casos.

2.6.2 Método Euleriano.

Si se consideran **N** especies contenidas en un fluido y la ecuación que describe la concentración de las especies queda determinada por^{2.1}:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j c_i) = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j \partial x_j} + R_i(c_1, \dots, c_N) + S_i(x, t) \quad i=1,2,\dots,N \quad \text{-----} 2.1$$

donde u_j es el j -ésimo componente de la velocidad del fluido, D_i es la difusividad de la especie i , R_i es el ritmo de producción de la especie i por reacción química y S_i es el ritmo de adición de la especie i en el punto $x=(x_1, x_2, x_3)$ en el tiempo t .

Esta ecuación debería resolverse conjuntamente con las ecuaciones de movimiento y de energía, sin embargo, se asume que debido a que las concentraciones de contaminantes son del orden de partes por millón no afectan de manera significativa a la meteorología de la región en estudio. Como consecuencia se resuelve de forma individual.

^{2.1} La ecuación de concentración se obtiene mediante un balance de masa, si el lector está interesado en la deducción para la obtención de esta ecuación consulte el ANEXO D

Descripción de modelos de dispersión atmosférica

Para determinar la concentración de una especie tomando en cuenta la turbulencia primero se dividen las variables aleatorias en una parte media y una perturbación que representa la turbulencia, la velocidad del viento u_j es una variable aleatoria, debido a que existen fluctuaciones en su comportamiento; por otro lado la concentración de las especies c_i al ser una variable dependiente del viento se convertirá en una variable aleatoria, es decir $u_j = \bar{u}_j + u_j'$ y $c_i = \bar{c}_i + c_i'$ siendo \bar{u}_j y \bar{c}_i el comportamiento medio del viento y la concentración promedio respectivamente, introduciendo estos cambios la ecuación 2.1 queda.

$$\frac{\partial(\bar{c}_i + c_i')}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_j + u_j')(\bar{c}_i + c_i) = D_i \frac{\partial^2(\bar{c}_i + c_i')}{\partial x_j \partial x_j} + R_i(\bar{c}_i + c_i', \dots, \bar{c}_N + c_N') + S_i(x, t)$$

donde $i=1,2,\dots,N$ _____ 2.2

En este punto es importante mencionar las siguientes reglas para promedios de variables turbulentas, que serán útiles posteriormente para reducir la ecuación de concentración con términos turbulentos.

Si **A** y **B** son dos variables con componentes media y turbulenta se cumplen las siguientes reglas de promedios.

$$\bar{c} = c \quad \text{si } c \text{ es una constante} \quad \text{_____} \quad 2.3$$

$$\overline{cA} = \bar{c}\bar{A} \quad \text{_____} \quad 2.4$$

$$\overline{(AB)} = \bar{A}\bar{B} \quad \text{_____} \quad 2.5$$

$$\overline{(A+B)} = \bar{A} + \bar{B} \quad \text{_____} \quad 2.6$$

$$\overline{\left(\frac{dA}{dt}\right)} = \frac{d\bar{A}}{dt} \quad \text{_____} \quad 2.7$$

Además se utilizan las siguientes herramientas denominadas Promedios de Reynolds:

$$\bar{A} = \overline{(A + a')} = \bar{A} + \bar{a'} \quad \text{donde } \bar{a'} = 0 \quad \text{_____} \quad 2.8$$

$$\overline{(AB)} = \bar{A}\bar{B} + \overline{a'b'} \quad \text{donde } \overline{a'b'} \neq 0 \quad \text{_____} \quad 2.9$$

El siguiente paso es obtener el promedio de la ecuación 2.2 y reducir de acuerdo a las reglas de promedios para variables turbulentas y a los promedios de Reynolds, la ecuación queda de la siguiente manera:

$$\frac{\partial(\overline{c_i})}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u_j} \overline{c_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j' c_i'}}{\partial x_j} = D_i \frac{\partial^2 \overline{c_i}}{\partial x_j \partial x_j} + \overline{R_i(c_i + c_i', \dots, c_N + c_N')} + S_i(x, t)$$

donde $i=1,2,\dots,N$ ————— 2.10

Como se puede observar ha aparecido una nueva variable dependiente $\overline{u_j' c_i'}$, en el caso de que se considerará una sola especie y además esta fuera una especie inerte, es decir $R=0$; entonces existirían más variables dependientes ($\overline{u_j' c_i'}$ y $\overline{c_i}$) que ecuaciones; cuando se presenta esta situación se dice que se existe un **problema de clausura** y si se generan otras ecuaciones para dichas variables, se generarían aún más variables dependientes.

Los métodos llamados eulerianos tratan de solucionar este problema relacionando de alguna manera las variables dependientes. El método euleriano más popular se conoce con el nombre de **teoría K**.

Este método relaciona los flujos turbulentos $\overline{u_j' c_i'}$ a las $\overline{c_i}$ mediante un modelo de longitud de mezcla, la relación viene dada por:

$$\overline{u_j' c_i'} = -K_{jk} \frac{\partial \overline{c_i}}{\partial x_k} \quad j = 1,2,3 \quad \text{————— 2.11}$$

donde K_{jk} es la difusividad del remolino.

La ecuación anterior es válida (Lamb 1973) únicamente cuando $\tau_0/T_c \ll 1$, donde τ_0 es el tiempo máximo sobre el cual los remolinos, en promedio, mantienen su integridad. T_c es la escala de tiempo de $\overline{c_i}$, es decir $\partial \overline{c_i} / \partial t \cong \overline{c_i} / T_c$. Esto significa que la **teoría K** sólo es aplicable cuando el campo medio de concentración $\overline{c_i}$ tiene una escala mayor que el transporte turbulento.

Para aplicar 2.11 se hacen las siguientes suposiciones:

☛ La difusión molecular es despreciable en comparación con la difusión turbulenta:

$$D_i \frac{\partial^2 \overline{c_i}}{\partial x_j \partial x_j} \ll \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{u_j' c_i'}$$

⇒ La atmósfera es incomprensible:

$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0$$

Introduciendo 2.11 en la ecuación 2.10.

$$\frac{\partial(\bar{c}_i)}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{c}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_{ij} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x_j} \right) + S_i(x, t) \quad \text{donde } i=1,2,\dots,N$$

La ecuación anterior se puede resolver por:

⇒ **Métodos analíticos**

Los cuales proporcionan una solución exacta de la ecuación.

⇒ **Métodos numéricos**

Proporcionan soluciones aproximadas y se resuelven computacionalmente por técnicas tales como:

- ⇒ Métodos de diferencias finitas.
- ⇒ Métodos de elementos finitos.
- ⇒ Métodos espectrales.
- ⇒ Métodos de frontera.
- ⇒ Métodos de partículas.

Existen diferentes modelos desarrollados de acuerdo a métodos eulerianos, algunos de los cuales se mencionan a continuación.

2.6.2.1 Modelo simple de caja.

En este modelo las masas de aire son tratadas como una caja dentro de la cual los contaminantes son emitidos y experimentan reacciones químicas (figura 2.3). El transporte, debido a procesos meteorológicos, que ocurre dentro y fuera de la caja es tomado en cuenta.

El modelo de caja está basado en la ecuación de conservación de masa y ha sido aplicado para contaminantes inertes y reactivos; en el último caso el modelo ha sido modificado para incorporar submodelos químicos.

La desventaja del uso de este tipo de modelos es que las predicciones no están afinadas, especialmente en términos de resolución espacial y temporal.

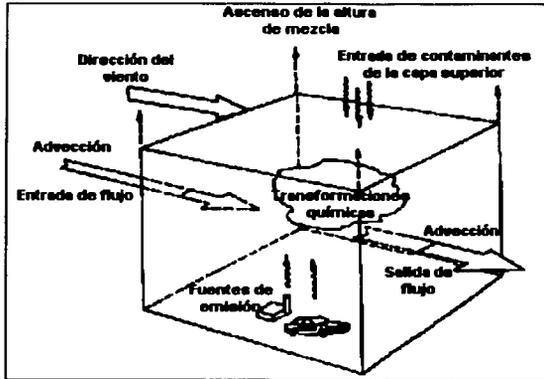


Figura 2.3 Diagrama que muestra los elementos básicos de un modelo de caja.

2.6.2.2 Modelo Slug.

En 1978 Venkatram mostró que el modelo simple de caja tiene una gran porción de inercia, pues no puede manejar cambios rápidos de la razón de emisión S y la velocidad u . El propósito del modelo Slug es introducir mejoras con respecto al modelo de caja.

El modelo permite variar la concentración c , a través del viento en la dirección x y en la vertical z , pero asume que la concentración no varía en y . Esto permite escribir la ecuación de concentración de masa (ecuación 2.1) en función de (x, z) ; además el término de difusión molecular es despreciable y no se considerarán reacciones químicas.

$$\frac{\partial (cz_i)}{\partial t} + u \frac{\partial (cz_i)}{\partial x} = S \quad \text{-----} \quad 2.12$$

donde x es la distancia viento abajo dentro de la caja. Se define la concentración promedio en x , $\overline{c(x)}$ donde:

$$\overline{c(x)}z_i(x) = \int_0^{z_i(x)} c(x, z) dz \quad \text{-----} \quad 2.13$$

donde $z_i(x)$ es la altura de la capa de mezcla, o también el tamaño vertical de la pluma generada por el nivel de emisiones S .

La solución de las ecuaciones 2.12 y 2.13 es la siguiente:

$$\overline{c(x, t)} = (x - ut) \frac{S}{z_i(x)}$$

El procedimiento para llegar a esta solución no se desarrolla, ya que se encuentra fuera de los objetivos del presente trabajo.

2.6.2.3 Modelo de caja múltiple.

El modelo simple de caja fue extendido al modelo de caja múltiple, en el cual se divide a la caja en un conjunto de celdas horizontales, la ecuación que describe éste modelo viene dada por:

$$\Delta c_{ij} = \frac{\left[(F_{i-1/2, j} - F_{i+1/2, j}) + (F_{i, j-1/2} - F_{i, j+1/2}) + S_{ij} \Delta t \right]}{V} \quad \text{2.14}$$

donde Δc_{ij} es la variación de la concentración promedio c_{ij} en la celda i, j durante el intervalo de tiempo Δt ; i, j son los índices horizontales de la celda; S_{ij} es la razón de emisión del contaminante de todas las fuentes contenidas dentro de la celda; y V es el volumen de la caja (es decir $V = \Delta x \Delta y h$, donde h es la altura de la caja). F representa el flujo del contaminante a través de las celdas;

$$F_{i \pm 1/2, j} = c_{i, j} A_{i \pm 1/2, j} u_{i \pm 1/2, j} \quad \text{2.15}$$

$$F_{i, j \pm 1/2} = c_{i, j} A_{i, j \pm 1/2} u_{i, j \pm 1/2} \quad \text{2.16}$$

donde A es el área de la celda, u es la velocidad del viento perpendicular a A , y el término $\frac{1}{2}$ indica el tamaño entre una celda y otra (es decir $\frac{1}{2}$ significa entre i e $i+1$, y $j-\frac{1}{2}$ significa entre $j-1$ y j).

Este modelo es útil cuando no se cuenta con información de emisiones y variables meteorológicas.

2.6.3 Método de Lagrange.

Otro tipo de modelo de dispersión más sofisticado que los vistos al principio de este capítulo, son los basados en el método de Lagrange; los cuales consideran una columna de aire que sigue una trayectoria de acuerdo a los diferentes factores meteorológicos prevaletientes (ver figura 2.4). Las parcelas de aire contienen ciertas concentraciones iniciales de contaminantes, pero también se considera la incorporación de nuevos contaminantes, la disolución y las reacciones químicas. Tales modelos son muy útiles para examinar el impacto de nuevas fuentes contaminantes y generalmente son menos caros que los modelos Eulerianos.

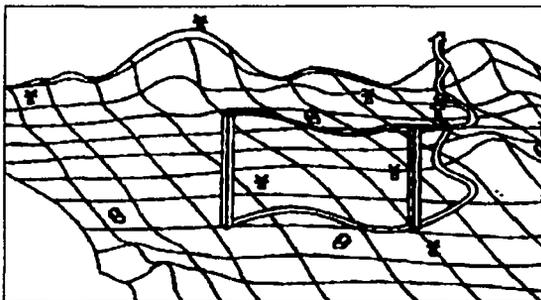
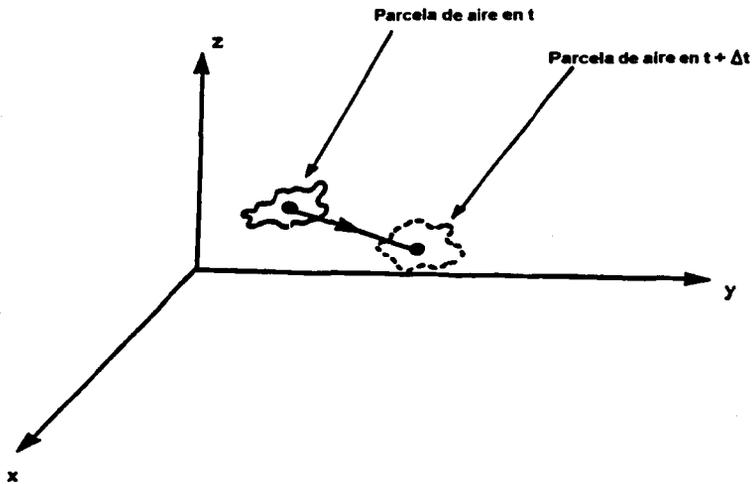


Figura 2.4 Esquema de un modelo de trayectoria o Lagrangiano.

Una diferencia significativa entre los métodos Eulerianos y los Lagrangianos es que el primero se basa en un sistema de coordenadas fijo, mientras que los métodos Lagrangianos se basan en un sistema de coordenadas que cambia de acuerdo a la trayectoria que sigue el fluido (ver figura 2.5).

Los modelos Lagrangianos dividen las plumas en "elementos" tales como segmentos, bocanadas o partículas ficticias.

(a)



(b)

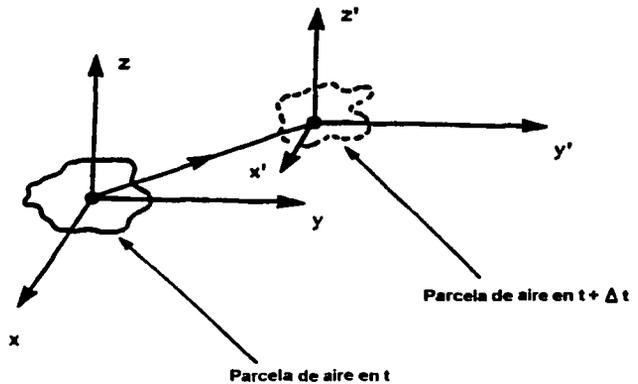


Figura 2.5 Sistema de referencia Euleriano (a) y Lagrangiano (b) para el movimiento atmosférico.

Aproximación de Lagrange.

El método de Lagrange se basa en el estudio del comportamiento de las partículas dentro de un fluido. Se considera primero el movimiento de una partícula que en el instante t' se encuentra en el punto x' en un flujo turbulento. El movimiento subsiguiente de la partícula puede expresarse por su trayectoria, $X[x', t'; t]$.

Además sea:

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) dx_1 dx_2 dx_3 = \Psi(x, t) dx \quad \text{-----} \quad 2.17$$

La función que representa la probabilidad de que en el instante t , la partícula este dentro de un volumen comprendido entre x_1 y x_1+dx , x_2 y x_2+dx y x_3 y x_3+dx

Por definición:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t) dx = 1 \quad \text{-----} \quad 2.18$$

Por otro lado la probabilidad de encontrar una partícula en el punto x en el instante t se puede expresar como el producto de dos probabilidades.

La probabilidad de una partícula que se encuentra en el punto x' en el instante t' tenga un desplazamiento que la coloque en el punto x en el instante t viene dada por la función $Q(x, t|x', t')$, a la cual se le llama **probabilidad de transición**.

Por consiguiente, la probabilidad de que la partícula se encuentre en x' en el instante t' , $\Psi(x', t')$, integrada con respecto a todos los posibles puntos de partida x' es:

$$\Psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(x, t|x', t') \Psi(x', t) dx \quad \text{-----} \quad 2.19$$

Hasta el momento se ha tratado la función de densidad de probabilidad con respecto a una sola partícula. Sin embargo, si se consideran un número inicial de m partículas y la función de densidad de probabilidad de la n -ésima partícula viene dada por $\Psi_i(x, t)$ la concentración media de partículas en el punto x viene dada por:

$$\overline{c(x, t)} = \sum_{i=1}^m \Psi_i(x, t) dx \quad \text{-----} \quad 2.20$$

Si se considera que en su trayectoria se irán adicionando nuevas partículas provenientes de otras fuentes la función de concentración vendría dada por:

$\overline{c(x, t)}$ = concentración inicial + partículas incorporadas en la trayectoria

$$\overline{c(x; t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(x, t|x_0, t_0) \overline{c(x_0, t_0)} dx_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^t Q(x, t|x', t') S(x', t') dt' dx \quad \text{--- 2.21}$$

La expresión anterior sólo es válida para contaminantes poco reactivos, sin embargo puede deducirse también una expresión para aquellos contaminantes producidos por procesos de primer orden; tal expresión vendrá dada como el producto de dos probabilidades que representen:

- ☛ La probabilidad $Q(x, t|x', t')$ de que la partícula sufra un desplazamiento desde x' hasta x en el intervalo de tiempo t' a t .
- ☛ La probabilidad de que la partícula no pierda su identidad por transformación química durante el intervalo de tiempo $t-t'$.

Cabe señalar que se considera que la transformación química de cada molécula se transforma individualmente y no afecta la transformación de las partículas restantes.

Si una partícula se transforma en el tiempo comprendido entre $t-t'$, ésta debe de ocurrir en un intervalo de tiempo que sea proporcional a dt . Por lo tanto la probabilidad de que la partícula no se transforme en el intervalo de tiempo kdt será $1-kdt$, donde k se conoce como la constante de transformación de primer orden. Cuando k varía con el tiempo, se considera la siguiente expresión:

$$\xi(t) = \int_{t'}^t K(t'') dt''$$

De esta manera la probabilidad de que la partícula no se transforme en un intervalo de tiempo es $1-d\xi(t)$. Si se divide el intervalo de tiempo $\xi(t) - \xi(t')$ en n intervalos iguales, la probabilidad de que la partícula no se transforme en ninguno de los subintervalos será: $(1-d\xi)^n$. Si se toma el límite cuando $d\xi \rightarrow 0$, la probabilidad de que la partícula no sufra ningún cambio en el intervalo $t-t'$ se convertirá en:

$$\lim_{d\xi \rightarrow 0} (1 - d\xi)^n = \lim_{d\xi \rightarrow 0} \left[1 - nd\xi + \frac{(nd\xi)^2}{2} - \dots \right] = \exp^{-\xi(t)} = \exp \left[- \int_{t'}^t K(t'') dt'' \right]$$

Así la función obtenida mediante el método de Lagrange para la concentración de partículas considerando transformaciones de primer orden es:

$$\begin{aligned} \overline{c(x, t)} = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(x, t | x_0, t_0) \overline{c(x_0, t_0)} \exp \left[- \int_{t_0}^t K(t'') dt'' \right] dx_0 \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^t Q(x, t | x', t') S(x', t') \exp \left[- \int_{t'}^t K(t'') dt'' \right] dt' dx' \end{aligned}$$

Tipos de modelos lagrangianos.

Existen varios tipos de modelos lagrangianos:

- ☛ Modelo de caja lagrangiano o de trayectoria, el cual es usado para simulaciones fotoquímicas.
- ☛ Modelo gaussiano.
- ☛ Modelos de partículas.

2.6.3.1 Modelos de caja de Lagrange

Los modelos de caja Lagrangianos son similares a los modelos de caja Eulerianos, la diferencia más sobresaliente entre ambos es que una caja Lagrangiana se mueve horizontalmente de acuerdo a la variación de la velocidad del viento y la dirección de éste. En cambio los modelos Eulerianos consideran un sistema de coordenadas fijo.

El uso de esta técnica ha resultado exitosa, especialmente para simulaciones fotoquímicas, proporcionando la concentración promedio estimada a lo largo de la trayectoria que recorre la caja. Una de las desventajas del modelo de caja Lagrangiano es la dificultad para comparar sus salidas con los datos de un sistema fijo de coordenadas (modelos eulerianos o monitoreo de datos).

Varios modelos de caja Lagrangianos han sido desarrollados para simular reacciones fotoquímicas dentro de masas de aire en movimiento. En un principio este tipo de modelos surgieron como una alternativa para los modelos fotoquímicos Eulerianos que resultaban altamente costosos desde el punto de vista computacional, pues las reacciones químicas y fotoquímicas necesitaban ser computadas en cada celda tridimensional; en cambio los modelos Lagrangianos realizaban estos cálculos intenteamente en un pequeño número de celdas en movimiento.

Recientemente se han desarrollado dos avanzados modelos fotoquímicos de caja Lagrangianos: el modelo **TRACE** (Tran, 1981) y el modelo **PLMSTAR** (Lumann, 1985). El modelo **TRACE** supone dos paredes bidimensionales moviéndose a través de una trayectoria específica para simular el transporte de una parcela desde una fuente

hasta un receptor. El modelo considera las reacciones químicas, la incorporación de nuevos contaminantes a través de su trayectoria y la depositación.

PLMSTAR es un modelo Lagrangiano a gran escala diseñado para simular el comportamiento de contaminantes en reacciones químicas, este modelo considera cinco paredes en movimiento en la vertical y nueve en la dirección horizontal. En su movimiento cada parcela de aire incorpora nueva emisiones de otras superficies o fuentes elevadas. Los contaminantes dentro de cada celda sufren difusión turbulenta, reacciones químicas y depositación seca.

2.6.3.2 Modelo gaussiano.

En 1975 Seinfeld mostró que la fórmula de toda pluma Gaussiana puede derivarse de la ecuación 2.19 asumiendo las siguientes consideraciones:

- ☛ La turbulencia es homogénea y estacionaria; es decir que la probabilidad de transición Q de una partícula depende sólo de los desplazamientos en el tiempo y el espacio y no de dónde y cuando fueron introducidas las partículas a la corriente.

$$Q(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t') = Q(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t')$$

- ☛ Q obedece una función de distribución normal multidimensional.

$$Q(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} |P|^{1/2}} \exp\left(-\xi^T P^{-1} \xi / 2\right)$$

donde cada elemento P_{ij} de la matriz P es (para $i, j = 1, 2, 3$)

$$P_{ij} = \overline{\xi_i \xi_j}$$

y los desplazamientos ξ_i son:

$$\xi_i = |x - x'|_i - \overline{|x - x'|}_i$$

en el cual i indica el componente de espacio (x , y o z , para $i = 1, 2$ o 3 respectivamente).

- ☛ El término $\overline{|x - x'|}$ es el desplazamiento promedio, debido únicamente al viento promedio u .
- ☛ $P_{ij} = 0$, para $i \neq j$.

2.6.3.3 Modelos de partículas.

Los modelos de partículas han sido aplicados a una amplia gama de problemas que van desde la escala atómica (flujo de electrones en semiconductores, dinámica molecular) hasta la escala astronómica (dinámica de galaxias). Los modelos de partículas tratan el término de transporte, difícil de manejar en los modelos Eulerianos, de una manera directa. Las partículas de hecho tienen una naturaleza Lagrangiana, puesto que siguen el movimiento del fluido.

El movimiento de las partículas puede ser producido por velocidades deterministas y por pseudovelocidades semialeatorias generadas utilizando la técnica de Monte Carlo. En este último caso, la trayectoria de una partícula simplemente representa una realización de un conjunto infinito de posibles soluciones.

El método Lagrangiano supone que cada partícula se mueve en cada paso de tiempo por pseudovelocidades, las cuales tienen tres componentes básicos:

- ☛ El transporte debido a la velocidad media del fluido.
- ☛ Las fluctuaciones aleatorias de las componentes horizontal y vertical del viento.
- ☛ La difusión molecular, que en este caso no es despreciable.

Cabe señalar que muchos modelos empleados para simular la fluctuación de la velocidad de partículas son la solución de la ecuación diferencial estocástica de Langevin, presentada a continuación.

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\alpha\mathbf{u} + \beta\xi(t) \quad \text{-----} \quad 2.22$$

donde \mathbf{u} es la fluctuación con respecto a la velocidad media de la partícula, $-\alpha$ y β son coeficientes que se especificarán más adelante, $\xi(t)$ es el ruido blanco Gaussiano, el cual es un proceso estocástico estacionario con una función de densidad de probabilidad normal y una media igual a cero.

Para simular la trayectoria de partículas que se mueven en cada paso de tiempo con una velocidad \mathbf{u} , primero se considera el movimiento de una sola partícula localizada en $\mathbf{x}(t_1)$ en el tiempo t_1 , su posición en el tiempo t_2 sería:

$$\mathbf{x}(t_2) = \mathbf{x}(t_1) + \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{u}[\mathbf{x}(t), t] dt \quad \text{-----} \quad 2.23$$

donde \mathbf{u} es el vector instantáneo del viento en cada punto $\mathbf{x}(t)$ de la trayectoria de la partícula entre t_1 y t_2 .

Las propiedades turbulentas de la atmósfera hacen de u prácticamente imposible de conocer, especialmente debido a los componentes semialeatorios. Existen dos formas de calcular u una determinista y la otra por medio de un **proceso de Markov**.

Consiste en expresar el vector del viento u_0 de la siguiente manera:

$$u_0 = \int_{t_1}^{t_2} \frac{u[x(t), t] dt}{(t_2 - t_1)} \quad \text{-----} \quad 2.24$$

El problema reside ahora en calcular u_0 en base a mediciones Eulerianas de u , al igual que se hizo anteriormente si se define u_0 de acuerdo a un término medio y una perturbación se tiene:

$$u_0 = \bar{u} + u' \quad \text{-----} \quad 2.25$$

Cálculo determinista de u' .

El término de u' de 2.25 se puede estimar partiendo de una manipulación de la ecuación de difusión de acuerdo a teoría **K**, obteniéndose la siguiente relación:

$$u' = \left(\frac{-K}{c} \right) \nabla c$$

donde **K** es el coeficiente de difusión del remolino y **c** la concentración. Este método generalmente requiere particionar el dominio en celdas para calcular **c**. Usando éste método, el movimiento de una partícula afecta el comportamiento de las demás partículas.

Cálculo de u' utilizando una secuencia de Markov.

Un **proceso estocástico** es un modelo que combina la aleatoriedad con el tiempo para hacer una representación más acorde al comportamiento de ciertos fenómenos.

El sistema se puede describir mediante un conjunto de variables aleatorias X_t , donde los valores distintos que puede tomar X_t son llamados **estados del sistema** o **espacio de estados S**, y los cambios del sistema de un estado a otro se les conoce como **transiciones**. Además el conjunto de valores que puede tomar **t** se denota como **espacio parametral T**. **S** y **T** pueden tomar valores discretos o continuos.

Debido a que la naturaleza aleatoria de la turbulencia, se han desarrollado modelos en base a procesos estocásticos, para su representación.

La obtención de u' (de ahora en adelante **u**) mediante una **secuencia de Markov**, parte del hecho de considerar la ecuación de Langevin, que divide el

Descripción de modelos de dispersión atmosférica

comportamiento del viento en una parte determinista y otra aleatoria, esta ecuación se escribe de la siguiente forma:

$$\frac{du}{dt} = -\alpha u + \beta \xi(t) \quad \text{-----} \quad 2.26$$

en donde el primer término del segundo miembro de la ecuación representa el comportamiento determinista y el segundo el comportamiento aleatorio.

Esta ecuación surgió como una alternativa al movimiento browniano y apareció por primera vez en 1908, en un trabajo publicado por P. Langevin.

Para parametrizar, es decir para encontrar los valores de α y β en términos de variables que se puedan estimar de alguna forma (en este caso la varianza y la integral de la escala de tiempo Lagrangiana), primero se debe de observar que la ecuación 2.26 se puede escribir de la siguiente forma:

$$\frac{du}{dt} + P(t)u = Q(t) \quad \text{-----} \quad 2.27$$

entonces la ecuación 2.26 es una ecuación diferencial lineal de primer orden y resolverse mediante los métodos conocidos. Expresando la ecuación 2.26 en la forma de 2.27 se tiene:

$$\frac{du}{dt} + \alpha u = \beta \xi(t) \quad \text{-----} \quad 2.28$$

La ecuación 2.28 también se puede escribir de la siguiente forma:

$$M(t, u)dt + N(t, u)du = 0$$

$$[\alpha u - \beta \xi(t)]dt + du = 0 \quad \text{-----} \quad 2.29$$

donde $M(t, u) = \alpha u - \beta \xi(t)$ y $N(t, u) = 1$.

La ecuación anterior es exacta si:

$$\frac{\partial M(t, u)}{\partial u} = \frac{\partial N(t, u)}{\partial t}$$

$$\frac{\partial [\alpha u - \beta \xi(t)]}{\partial u} = \alpha \quad \frac{\partial 1}{\partial t} = 0$$

como $\alpha \neq 0$ entonces 2.29 no es exacta.

Si se encuentra un factor de integración, tal que convierta a 2.29 en una ecuación diferencial exacta, el factor de integración $\mu(t)$ se obtiene por el método convencional para resolver una ecuación diferencial lineal de primer orden.

$$\frac{\partial}{\partial u} [\mu(t)\alpha u - \mu(t)\beta(t)] = \frac{\partial}{\partial t} \mu(t)$$

La condición anterior se reduce a:

$$\mu(t)\alpha = \frac{d}{dt} \mu(t)$$

$$\frac{d\mu}{\mu} = \alpha dt$$

$$\ln(\mu) = \int \alpha dt$$

$$\mu = \exp[\alpha t]$$

Multiplicando 2.28 por el factor de integración obtenido:

$$e^{\alpha t} \frac{du}{dt} + e^{\alpha t} \alpha u = e^{\alpha t} \beta \xi(t)$$

entonces

$$\frac{du}{dt} [e^{\alpha t} u] = e^{\alpha t} \beta \xi(t)$$

Integrando:

$$e^{\alpha t} u = \int e^{\alpha t} \beta \xi(t) dt + c$$

Despejando:

$$u = e^{-\alpha t} c + \beta e^{-\alpha t} \int_0^t e^{\alpha s} \xi(s) ds$$

La integral se escribe en términos de s para que una vez evaluada en el intervalo indicado por la integral quede expresada en términos de t .

Suponiendo que $c = u(0)$

$$u(t) = e^{-\alpha t} u(0) + \beta e^{-\alpha t} \int_0^t e^{\alpha s} \xi(s) ds \quad \text{-----} \quad \mathbf{2.30}$$

Considerando las siguientes propiedades estadísticas para $u(t)$ y $\xi(t)$:

$$\overline{u(0)} = 0 \quad \text{-----} \quad \mathbf{2.31}$$

ya que $u(t)$ es una fluctuación.

Si la fluctuación $u(t)$ y la función $\xi(t)$ no están correlacionadas:

$$\overline{u(t)\xi(t)} = 0 \quad \text{-----} \quad \mathbf{2.32}$$

además considerando que $\xi(t)$ es una variable aleatoria que sigue una distribución normal:

$$\overline{\xi(t)} = 0 \quad \text{-----} \quad \mathbf{2.33}$$

y su covarianza para los tiempos s y t es:

$$\overline{\xi(s)\xi(t)} = \delta(t-s) \quad \text{-----} \quad \mathbf{2.34}$$

donde δ es la función delta Dirac con dimensión t^{-1} . Algunos autores considerarán que $\xi(s)$ y $\xi(t)$ están correlacionados únicamente si $|t-s|$ es muy pequeño, consistente con la física de un movimiento browniano.

Para obtener la ecuación 2.26 en términos de la varianza se eleva cada uno de los factores de la ecuación 2.30 al cuadrado y se obtiene el promedio:

$$\overline{u^2(t)} = e^{-2\alpha t} \overline{u^2(0)} + \beta^2 e^{-2\alpha t} \int_0^t \int_0^t e^{\alpha(r+s)} \overline{\xi(r)\xi(s)} dr ds \quad \text{-----} \quad \mathbf{2.35}$$

Simplificando la ecuación anterior por las propiedades 2.31 a 2.34 se tiene:

$$\overline{u^2(t)} = e^{-2\alpha t} \overline{u^2(0)} + \beta^2 \int_0^t e^{2\alpha(s-t)} ds \quad \text{-----} \quad \mathbf{2.36}$$

El siguiente paso es evaluar la integral incluida en 2.36:

$$\int_0^t e^{-2\alpha(s-t)} ds = e^{-2\alpha t} \int_0^t e^{2\alpha s} ds = (2\alpha)^{-1} (1 - e^{-2\alpha t}) \quad \text{2.37}$$

Sustituyendo 2.37 en 2.36

$$\overline{u^2(t)} = e^{-2\alpha t} \overline{u^2(0)} + \beta^2 (2\alpha)^{-1} (1 - e^{-2\alpha t}) \quad \text{2.38}$$

Asumiendo que la turbulencia es estacionaria y homogénea, la varianza de u^2 es:

$$\sigma_u^2 = \overline{u^2(0)} = \overline{u^2(t)} \quad \text{2.39}$$

Combinando 2.38 y 2.39 se obtiene:

$$\sigma_u^2 = e^{-2\alpha t} \sigma_u^2 + \beta^2 (2\alpha)^{-1} (1 - e^{-2\alpha t}) \quad \text{2.40}$$

Despejando β de 2.40

$$\beta = \sigma_u (2\alpha)^{1/2} \quad \text{2.41}$$

La expresión 2.41 representa el equilibrio entre correlación y no correlación de la velocidad de la partícula. El coeficiente de correlación de la velocidad Lagrangiana es:

$$R_L(t) = \frac{\overline{u(0)u(t)}}{\overline{u^2(0)}} \quad \text{2.42}$$

y la integral de la escala de tiempo perteneciente a una velocidad Lagrangiana es:

$$T_L = \int_0^{\infty} R_L(t) dt \quad \text{2.43}$$

Para completar la solución de la ecuación 2.26 se multiplica la ecuación 2.30 por $u(0)$ y se toma el promedio de ensemble:

$$\begin{aligned} \overline{u(t)u(0)} &= \overline{u^2(0)} e^{-\alpha t} + \beta e^{-\alpha t} \int_0^t e^{\alpha s} \overline{\xi(s)u(0)} ds \\ \overline{u(t)u(0)} &= \overline{u^2(0)} e^{-\alpha t} \quad \text{2.44} \end{aligned}$$

Combinando las ecuaciones 2.42 a 2.43 se obtienen los valores para $R_L(t)$ y T_L .

$$R_L(t) = \frac{\overline{u(t)u(0)}}{u^2(0)}$$

$$R_L(t) = e^{-\alpha t}$$

$$T_L = \int_0^{\infty} e^{-\alpha t} dt = \frac{e^0}{\alpha}$$

Por lo tanto $\alpha = T_L^{-1}$, reescribiendo la ecuación 2.26 queda como:

$$du = (-\alpha u + \beta \xi(t)) dt$$

Sustituyendo $\alpha = T_L^{-1}$ y $\beta = \sigma_u^2 (2\alpha)^{1/2}$ la ecuación queda:

$$du = -\frac{1}{T_L} u dt + \sigma_u \left(\frac{2}{T_L} \right)^{1/2} \xi(t) dt \quad \text{-----} \quad 2.45$$

La ecuación 2.45 se basa en asumir que la turbulencia es homogénea y estacionaria, es decir que las propiedades estadísticas de tiempo, espacio y conjunto (tiempo-espacio) se mantienen constantes, esto se llama condición **ergódica**, la cual se considerará en el presente trabajo para hacer la turbulencia un problema más tratable.

La ecuación de Langevin como una secuencia de Markov.

La importancia de la ecuación 2.45 para la dispersión en flujos turbulentos emerge únicamente cuando se considera la velocidad de las partículas en tiempos discretos, t_0, t_1, \dots, t_n donde $t_{n+1} - t_n = \Delta t$. Si se elige:

$$\Delta t > T_L$$

donde T_L es la escala de tiempo sobre el cual la aceleración de la partícula permanece correlacionada, entonces la secuencia $\{u_n\} = \{u(t_n)\}$ (donde u es la velocidad actual de la partícula) es una secuencia de Markov, porque u_{n+1} depende únicamente de u_n y no de u_{n-1} o valores próximos. (La diferencia entre una **secuencia de Markov** y un **proceso de Markov** es que la primera se define para tiempos discretos, puesto que posteriormente se define en un intervalo continuo) Los términos sucesivos en una secuencia de Markov $\{u_n\}$ son dados por:

$$u_{n+1} = a u_n + b \sigma_u \xi_n \quad \text{-----} \quad 2.46$$

donde ξ_n es un número aleatorio con distribución Gaussiana con media cero y varianza uno. Los coeficientes **a** y **b** son expresados, como en el caso continuo en términos de σ_u^2 y la escala de tiempo Lagrangiana T_L . Esto se hace fácilmente comparando la ecuación 2.46 con la solución del caso continuo. Esto da que:

$$a = e^{-\alpha \Delta t} = e^{-\Delta t/T_L} \quad \text{-----} \quad 2.47$$

Comparando la varianza de la ecuación 2.46 con la ecuación 2.40, y considerando que $\beta = \sigma_u (2\alpha)^{1/2}$, se tiene:

$$\sigma_u^2 b^2 = \frac{\beta^2}{2\alpha} (1 - e^{-2\alpha \Delta t}) = \sigma_u^2 (1 - a^2) \quad \text{-----} \quad 2.48$$

Las ecuaciones 2.46 a la 2.48 son las utilizadas para simular fluctuación de la velocidad del viento, en un modelo de partículas.

Formulación semi-empírica de σ_u y T_L (escala de tiempo Lagrangiana).

Hanna en 1982 propuso un conjunto de formulaciones semi-empíricas que, utilizando un número limitado de parámetros meteorológicos (h, L, w, z_0)^{2.2} proporcionan los valores para σ_u y T_L requeridos en la ecuación 2.46. Este esquema, en el cual los subíndices **x** y **y** indican los componentes horizontales del viento, son descritos a continuación

• **Condiciones inestables.**

En condiciones inestables, las componentes horizontales de σ_u son constantes, es decir:

$$\sigma_{u_x} = \sigma_{u_y} = u_* (12 + 0.5 h/L)^{1/3} \cong \sqrt{0.31} w_* \quad \text{-----} \quad 2.49$$

donde la componente vertical varía con **z** de la siguiente manera.

$$\sigma_{u_z} = 0.96 w_* \left(\frac{3z}{h} - L \right)^{1/3} \quad \text{-----} \quad 2.50$$

para $z \leq 0.03h$;

^{2.2} **h** es la altura de la capa de mezcla, **L** es la escala de Monin-Obukhov, **w**, es la escala de velocidad en la capa de mezcla y **z₀** es la longitud de la rugosidad.

$$\sigma_{u_z} = w \cdot \min \left[0.96 \left(\frac{3z}{h} - \frac{L}{h} \right)^{1/3}; 0.763 \left(\frac{z}{h} \right)^{0.175} \right] \quad \text{-----} \quad 2.51$$

para $0.03h < z < 0.4h$;

$$\sigma_{u_z} = 0.722w \cdot \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{0.207} \quad \text{-----} \quad 2.52$$

para $0.4h \leq z < 0.96h$; y

$$\sigma_{u_z} = 0.37w. \quad \text{-----} \quad 2.53$$

Las dos componentes horizontales de T_L son constantes, es decir:

$$T_{L_x} = T_{L_y} = 0.15 \frac{h}{\sigma_{u_x}} \quad \text{-----} \quad 2.54$$

y la componente vertical varía con z de la siguiente manera:

$$T_{L_z} = 0.1 \frac{z}{\sigma_{u_z} [0.55 + 0.38(z - z_0)/L]} \quad \text{-----} \quad 2.55$$

para $z < 0.1h$ y $z - z_0 > -L$;

$$T_{L_z} = 0.59 \frac{z}{\sigma_{u_z}} \quad \text{-----} \quad 2.56$$

para $z < 0.1h$ y $z - z_0 < -L$; y

$$T_{L_z} = 0.15 \frac{h}{\sigma_{u_z}} \left[1 - \exp \left(- \frac{5z}{h} \right) \right] \quad \text{-----} \quad 2.57$$

para $z > 0.1h$

• **Condiciones estables.**

En condiciones estables, h representa el tope de la capa turbulenta y puede evaluarse por la siguiente ecuación:

Descripción de modelos de dispersión atmosférica

$$h = 0.25u, L/f \quad \text{-----} \quad 2.58$$

Los componentes de σ_u varían con z como se muestra a continuación:

$$\sigma_{u_x} = 2.0u, \left(1 - \frac{z}{h}\right) \quad \text{-----} \quad 2.59$$

$$\sigma_{u_y} = \sigma_{u_z} = 1.3u, \left(1 - \frac{z}{h}\right) \quad \text{-----} \quad 2.60$$

mientras el valor de T_L esta dado por:

$$T_{L_x} = 0.15 \frac{h}{\sigma_{u_x}} \left(\frac{z}{h}\right)^{0.5} \quad \text{-----} \quad 2.61$$

$$T_{L_y} = 0.07 \frac{h}{\sigma_{u_y}} \left(\frac{z}{h}\right)^{0.5} \quad \text{-----} \quad 2.62$$

y

$$T_{L_z} = 0.10 \frac{h}{\sigma_{u_z}} \left(\frac{z}{h}\right)^{0.8} \quad \text{-----} \quad 2.63$$

• Condiciones neutras.

En condiciones neutras, las componentes de σ_u son:

$$\sigma_{u_x} = 2.0u, \exp(-3fz/u.) \quad \text{-----} \quad 2.64$$

y

$$\sigma_{u_y} = \sigma_{u_z} = 1.3u, \exp(-2fz/u.) \quad \text{-----} \quad 2.65$$

mientras T_L se calcula con:

$$T_{L_x} = T_{L_y} = T_{L_z} = \frac{0.5z/\sigma_{u_z}}{1 + 15fz/u.} \quad \text{-----} \quad 2.66$$

En las expresiones anteriores se asume, que las partículas son totalmente reflectadas por el suelo.

Determinación de la posición inicial de cada partícula en la vertical

La posición inicial de cada partícula en la vertical está dada por la altura de la chimenea más la elevación de la pluma emitida por ésta, es decir:

$$z_k = h_s + \Delta h \quad \text{-----} \quad 2.67$$

donde z_k es la posición inicial vertical de la k -ésima partícula, h_s es la altura de la chimenea y Δh es la elevación de la pluma.

El último término de la expresión 2.67 se agrega debido a pesar de que la pluma se emite a la altura de la chimenea, ésta se eleva ascendentemente durante una distancia Δh para posteriormente dispersarse.

Este ascenso de la pluma se debe a la diferencia entre la temperatura ambiente y la temperatura de salida de los gases emitidos, la cantidad de movimiento de estos y las características de la chimenea.

Se han ideado numerosos métodos para calcular Δh , los cuales toman en cuenta los factores arriba mencionados, de la aplicación de dichos métodos se han obtenido un amplio número de expresiones para determinar la elevación de la pluma Δh ; sin embargo no se ha demostrado la superioridad de alguna de ellas sobre las demás. Por otra parte, los resultados obtenidos al aplicar las diferentes formulaciones no se asemejan en la mayoría de los casos.

Las expresiones que se utilizan en el presente trabajo son las propuestas por Briggs y se basan en un estudio muy completo realizado en base a datos de elevación de plumas observados en diferentes chimeneas.

Para la mayoría de los casos de elevación de la pluma es necesario el valor del parámetro estimado por Briggs para la fuerza ascensional del flujo, F_b (m^4s^{-2}), que viene dado por la ecuación:

$$F_b = gv_s d_s^2 \left[\frac{\Delta T}{4T_s} \right]$$

donde g es la fuerza de gravedad, v_s es la velocidad de salida del gas, d_s es el diámetro de la chimenea, T_s es la temperatura de salida del gas, y T_a es temperatura ambiente del aire, que sirve para determinar $\Delta T = T_s - T_a$.

Por otro lado la ecuación:

$$F_a = v^2 d^2 \frac{T_a}{4T_i}$$

expresa la elevación de la pluma debido a la cantidad de movimiento.

Además de considerar las ecuaciones de fuerza ascensional y cantidad de movimiento, se debe tomar en cuenta las condiciones de estabilidad, para determinar la elevación de la pluma Δh .

• **Condición neutra o inestable.**

El incremento de temperatura límite $(\Delta T)_c$ para condiciones inestables o neutras, se determina como sigue:

para $F_b < 55$

$$(\Delta T)_c = 0.0297 T_i \frac{v^{3/2}}{d^{3/2}}$$

para $F_b \geq 55$

$$(\Delta T)_c = 0.00575 T_i \frac{v^{3/2}}{d^{3/2}}$$

Si la diferencia entre la temperatura del gas en la chimenea y la temperatura ambiente ΔT excede o iguala $(\Delta T)_c$, la elevación de la pluma se considera dominada por las fuerzas ascensionales; la ecuación para obtener dicha elevación es:

$$\Delta h = 21.425 \frac{F_b^{3/2}}{u_i}$$

para $F_b < 55$

$$\Delta h = 38.71 \frac{F_b^{3/2}}{u_i}$$

para $F_b \geq 55$

Si ΔT es menor que $(\Delta T)_c$, se asume que la elevación de la pluma se encuentra dominada por la cantidad de movimiento. La altura de la pluma se calcula con la siguiente ecuación:

$$\Delta h = 3d_1 \frac{v_1}{u_1}$$

• **Condición estable.**

Para situaciones estables se requiere del valor del parámetro de estabilidad estimado s , el cual se obtiene por:

$$s = g \frac{\partial \theta / \partial z}{T_1}$$

el valor de $\frac{\partial \theta}{\partial z}$ para la clase de estabilidad E se asume como $0.020 \text{ } ^\circ\text{Km}^{-1}$ y para las clases de estabilidad F y G $\frac{\partial \theta}{\partial z} = 0.035 \text{ } ^\circ\text{Km}^{-1}$

El incremento de temperatura límite $(\Delta T)_c$ se obtiene por la siguiente expresión:

$$(\Delta T)_c = 0.019582 T_1 v_1 \sqrt{s}$$

Si ΔT excede a $(\Delta T)_c$, la elevación de la pluma se considera dominado por las fuerzas ascensionales, por lo tanto la elevación de la pluma viene dada por la siguiente ecuación:

$$\Delta h = 2.6 \left[\frac{F_b}{u_1 s} \right]^{1/2}$$

En caso de que ΔT sea menor o igual a $(\Delta T)_c$, se considera que la altura de la pluma emitida por la chimenea se debe predominantemente a la cantidad de movimiento, en este caso la ecuación de elevación de la pluma es la siguiente:

$$\Delta h = 1.5 \left[\frac{F_m}{u_1 \sqrt{s}} \right]^{1/2}$$

Determinación de la velocidad media $(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})$ para cada partícula.

Según la ecuación 2.23 la posición de una partícula se determina en base a la posición anterior y a un incremento, el cual se determina por el producto de la velocidad instantánea y el paso de tiempo.

La velocidad instantánea se define mediante una parte promedio y una fluctuación, la obtención de esta última como se trató anteriormente se realiza a través de una secuencia de Markov.

El vector para la velocidad media $(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})$ se puede obtener de las siguientes maneras:

- **La obtención de las velocidades medias mediante un modelo meteorológico.** Uno de los usos de los modelos meteorológicos es la obtención del campo medio de vientos requerido por algunos modelos de dispersión, existen en el mercado diferentes implementaciones en computadora de modelos meteorológicos, estos dividen la región a simular en una malla y calculan las variables meteorológicas para cada celda de la malla, para realizar lo anterior algunos modelos se basan en interpolaciones y extrapolaciones de mediciones realizadas en diferentes puntos de la malla (modelos de diagnóstico) y otros resuelven diferentes ecuaciones físicas que involucran el tiempo (modelos de pronóstico).
- Cuando no existen suficientes mediciones meteorológicas, los parámetros requeridos por el modelo de dispersión son inferidos a través de formulaciones semiempíricas realizadas en diversos trabajos y utilizando distintos métodos. Mediante la teoría de similitud se ha encontrado que la expresión para la velocidad media del viento a diferentes alturas viene dada por:

$$\bar{U}(z) = \left(\frac{u_*}{k} \right) \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \psi_n \left(\frac{z}{L} \right) \right] \quad \text{-----} \quad 2.68$$

donde para condiciones de estabilidad neutra:

$$\psi_n = 0$$

en condiciones inestables:

$$\psi_n \approx \ln \left[\left(\frac{1-x^2}{2} \right) \left(\frac{1-x}{2} \right)^2 \right] - 2 \arctg x + \frac{\pi}{2}$$

con $x = \left(1 - 16 \frac{z}{L} \right)^{1/4}$ y en condiciones estables:

$$\psi_w = -5 \frac{z}{L}$$

Una vez conocida $\bar{U}(z)$ se obtienen los componentes zonales \bar{u} y meridionales \bar{v} del viento, dados por:

$$\bar{u} = -|\bar{U}| \cos(\theta) \quad \bar{v} = -|\bar{U}| \sin(\theta)$$

donde θ es la dirección del viento.

Por otro lado, en la vertical se considera que el transporte de contaminantes se debe primordialmente a la turbulencia, es decir $\bar{w} = 0$.

Cabe señalar que siempre es recomendable utilizar los datos del campo de vientos medio $(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})$ provenientes de modelos meteorológicos, debido a que esto hace posible la utilización del modelo a gran escala (cientos de kilómetros); en cambio cuando se utiliza la formulación semiempírica se considera que los datos sólo son válidos para un área no mayor de 10 kilómetros; en el presente trabajo se usa la formulación semiempírica como última opción debido a la imposibilidad de obtener los datos necesarios para aplicar un modelo meteorológico.

Determinación de la masa de cada partícula.

La masa de una partícula no se conserva constante durante su trayectoria, debido al fenómeno de deposición, éste se define como el camino mediante el cual la atmósfera se limpia a sí misma. Existen dos tipos de mecanismos de deposición: la deposición seca, es decir la precipitación de material contaminante a la superficie terrestre (suelo, agua o vegetación) y la deposición húmeda, en la cual el material contaminante es absorbido por pequeñas gotas de agua suspendidas en la atmósfera que posteriormente se precipitan por diversos mecanismos como la neblina o la lluvia. En el presente trabajo sólo se considera la deposición seca.

El modelo de partículas considera una reducción de masa exponencial para cada partícula, la cual es calculada cada paso de tiempo Δt , es decir:

$$M_t = M_{t-1} \exp\left(-\frac{\Delta t}{T_d}\right)$$

donde $T_d = \Delta z_0 / V_d$ es el tiempo de escala para un proceso de deposición seca y Δz_0 es la longitud vertical de la pluma, dada por $\Delta z_0 = 4\sigma_z$ y V_d es la velocidad de deposición. La ecuación anterior se aplica únicamente cuando $2\sigma_z \geq z$

Descripción de modelos de dispersión atmosférica

La depositación V_d , se define por la ecuación 2.69 como la razón entre el flujo de depositación F ($\text{g m}^{-2} \text{s}^{-1}$) y la concentración del contaminante c (g m^{-3}).

$$V_d = \frac{F}{c} \quad \text{-----} \quad 2.69$$

La teoría de la depositación seca es compleja y por tanto sólo se presentan los resultados finales, ésta teoría nos dice que la velocidad de depositación también se puede expresar mediante:

$$V_d = \frac{1}{r_a + r_s + r_c} \quad \text{-----} \quad 2.70$$

donde r_a es la resistencia aerodinámica, r_s es la resistencia de superficie y r_c es la resistencia debido al tipo de zona. La resistencia aerodinámica, es dada por Wesely y Hicks (1977) por:

$$r_a = (ku^*)^{-1} \left[\ln\left(\frac{zs}{z_0}\right) - \psi_H \right]$$

$$\psi_H = \begin{cases} -5 \frac{zs}{L} & 0 < \frac{zs}{L} < 1 \\ \exp \left[0.598 + 0.39 \ln\left(-\frac{zs}{L}\right) - 0.090 \left\{ \ln\left(-\frac{zs}{L}\right) \right\}^2 \right] & -1 < \frac{zs}{L} < 0 \end{cases}$$

siendo u^* , la velocidad de fricción; z_a , la altura de referencia; z_0 , la longitud de rugosidad; k la constante de Von Karman y ψ_H , una función que toma en cuenta los efectos producidos por el tipo de estabilidad. Por otro lado r_s es dado por:

$$r_s = \frac{2.6}{ku^*}$$

y r_c se determina mediante la tabla 2.1 de acuerdo al tipo de zona:

Descripción de modelos de dispersión atmosférica

Tipo de zona	A, B, C	D	E	F, G
1 Zonas con alto grado de vegetación (sembradios, pastizales, bosques, etc)	100	300	1000	0
2 Tierras semi-áridas	100	300	1000	0
3 Campo abierto	100	300	1000	0
4 Desierto	200	500	1000	1000
5 Pantanos	50	75	100	0
6 Ciénagas	75	300	1000	0
7 Ciudades	1000	1000	1000	0
8 Océanos y lagos	0	0	0	0

Tabla 2.1 Resistencia de acuerdo al tipo de suelo rc.

Estimación de la concentración en puntos receptores.

Los modelos de partículas son un conjunto de algoritmos para generar la trayectoria de las partículas, cuando dichos modelos se aplican a la dispersión de contaminantes, el punto de interés se centra en la estimación de la concentración en ciertos lugares llamados receptores, para lograr lo anterior se pueden seguir dos métodos:

El primero consiste en definir celdas alrededor de los puntos receptores y contar el número de partículas que se encuentran dentro de la celda. Sin embargo, el nivel de confiabilidad en el cálculo de la concentración utilizando este método depende de elegir un tamaño de celda adecuado, ya que si el tamaño de la celda es muy grande se suavizan mucho las estimaciones de la concentración y si el volumen de la celda es muy pequeño se ha observado que los resultados son poco confiables; técnicamente el problema quedaría resuelto al liberar un número infinito de partículas, lo cual debido a la capacidad de cómputo resulta imposible.

Otra forma de estimar las concentraciones, que es la que se emplea en este trabajo, es utilizando el **método del kernel**, en donde se asume que la pluma emitida por una chimenea es la suma de un conjunto de nubes o bocanadas. Cada nube se considera una pseudo-partícula, pues la masa de está puede variar y en si la trayectoria que se calcula es la de su centro de masa. Por otro lado, se han considerado diferentes funciones que expresan la distribución de concentración de cada nube; una de las funciones de distribución más utilizada es la Gaussiana, la justificación de su uso se debe a que si se considera la nube o bocanada formada por un número muy grande de partículas, las cuales tienen movimientos aleatorios a la derecha e izquierda del centro

Descripción de modelos de dispersión atmosférica

de masa, según el **teorema del límite central** la posición final de estas se acerca a una distribución gaussiana.

Por lo tanto, la concentración **C** en **(X, Y, Z)** es estimada usando la siguiente expresión:

$$C(X, Y, Z) = \frac{Q\Delta t}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{k=1}^N \frac{1}{\sigma_{x_k} \sigma_{y_k} \sigma_{z_k}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x_k - X)^2}{\sigma_{x_k}^2}\right) \times \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(y_k - Y)^2}{\sigma_{y_k}^2}\right) \times \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(z_k - Z)^2}{\sigma_{z_k}^2}\right)$$

donde **(x_k, y_k, z_k)** es la localización del centro de la **k-ésima** partícula y **σ_{x_k}, σ_{y_k}** y **σ_{z_k}** son las desviaciones estándar de cada nube o bocanada, cuyos valor estimado para **σ_y** se obtiene mediante:

$$\sigma_y = \sigma_y t \text{ para } t \leq 2T_L, \quad \text{-----} \quad \mathbf{2.71}$$

y

$$\sigma_y^2 = 2T_L \sigma_y^2 t \text{ para } t > 2T_L, \quad \text{-----} \quad \mathbf{2.72}$$

De modo similar se calculan **σ_x** y **σ_z**. Las desviaciones estándar de la velocidad **σ_u, σ_v** y **σ_w** se obtienen por interpolación de los valores calculados para cada una de las celdas que conforman la malla definida por un modelo meteorológico; en el caso de que no se cuente con suficientes datos se estiman mediante las formulaciones semiempíricas presentadas anteriormente.

Finalmente, la principal ventaja de la utilización del método del kernel, es el uso de un número menor de partículas que las utilizadas por el primer método descrito en esta sección.

Bibliografía

- ⊛ Barbara J. FinLayson-Pitts, James N. Pitts, Jr (1986): **Atmospheric Chemistry: Fundamentals and experimental techniques**. Editorial John Wiley & Sons, USA.
- ⊛ Herrera Revilla, Ismael (1988): **Modelación matemática en ciencias e ingeniería**. Universidad Nacional Autónoma de México.
- ⊛ Howard C. Rodean (1994): **Notes on the Langevin Model for Turbulent Diffusion of "Marked" Particles**. Lawrence Livermore National Laboratory.

Descripción de modelos de dispersión atmosférica

- ⊗ John H. Seinfeld (1978): ***Contaminación atmosférica. Fundamentos físicos y Químicos.*** Instituto de estudios de Administración Local. Madrid.
- ⊗ Legg B.J y Raupach M.R (1982): ***Markov-Chain simulation of particle dispersion in inhomogeneous flows: the mean drift velocity induced by a gradient in Eulerian velocity variance.*** D. Reidel Publishing. Co. USA.
- ⊗ Ley, A.J. (1982): ***A random walk simulation of two-dimensional turbulent diffusion in the neutral surface layer.*** Atmos. Environ., 16:2799-2808.
- ⊗ R. Byron Bird, Warren E. Stewart (1982): ***Fenómenos de transporte.*** Editorial Reverté, España.
- ⊗ R. Thompson (1971): ***Numeric calculation of turbulent diffusion.*** J. R. Met. Soc., 97:93-98.
- ⊗ Wellens Purnal, Ann (1993): ***Análisis Matemático de la Dispersión Atmosférica en la Ciudad de México.*** Tesis para obtener el grado de maestro en ciencias, UNAM. México.
- ⊗ Yamada, T., y S. S. Bunker (1988): ***Development of a nested grid, second moment turbulence closure model and application to the 1982 ASCOT Brush Creek data simulation.*** J. Appl. Meteor., 27:562-578.
- ⊗ Zannetti, Pablo (1990): ***Air Pollution Modeling.*** Editorial Computational Mechanics Publications, USA.
- ⊗ Zannetti, Pablo (1984): ***New Monte Carlo scheme for simulating Lagrangian particle diffusion with shear effects.*** Appl. Math. Modelling, 8:188-192.

CAPÍTULO III

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

SINOPSIS

Como quedo establecido en el **CAPÍTULO II** el modelo de partículas se basa en considerar el comportamiento de cada partícula contaminante de manera individual, determinando su posición de acuerdo a la velocidad y el tiempo. La velocidad es importante porque es la variable que introduce las fluctuaciones, es decir el término turbulento, por otro lado, la concentración en los puntos receptores se estima mediante el método del kernel.

En términos generales se puede decir que la simulación es el diseño y posterior desarrollo por computadora de un modelo que representa a un sistema real, todo ello con la finalidad de proponer distintos escenarios para evaluar diferentes estrategias sin necesidad de experimentar con el sistema real, lo cual en el caso de los modelos ambientales resulta peligroso o imposible de realizar.

Para el desarrollo del modelo de simulación se sigue el método general propuesto por Raúl Coss Bu, en su libro *Simulación: un enfoque práctico*, el método consiste en los siguientes pasos:

En la **definición del sistema** se delimitan los elementos que lo conforman y la interacción que estos tienen entre sí, además se ve que tanto influye el medio en el sistema de interés y se determina el objetivo del estudio; para el caso presente el sistema está compuesto por las emisiones, la meteorología, la dispersión y la concentración en *receptores* definidos. El objetivo es determinar la concentración de *especies* poco reactivas en puntos receptores, dada una fuente de emisión puntual y conociendo la meteorología del lugar.

El siguiente paso consiste en **formular el modelo**, en otras palabras la definición conceptual elaborada previamente se traduce a un lenguaje matemático; después se realiza la **colección de los datos** necesarios para ejecutar la simulación, los cuales consisten en la información de emisiones, la meteorología media y micrometeorológica; para la información de emisiones se considera la proveniente de las chimeneas de la refinería de Tula; en cuanto a la información meteorológica se utilizó la obtenida por el Instituto de Investigaciones Eléctricas mediante una campaña de monitoreo de variables que permitieron estimar los parámetros micrometeorológicos; además de los datos de radiosondeos, necesarios para estimar alturas de capa de mezcla.

68

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Una vez que se ha construido el modelo se debe decidir sobre que tipo de lenguaje es más conveniente **implementarlo** para su ejecución en computadora, esta implementación requiere de: un algoritmo general, de un algoritmo para determinar la posición de las partículas y de otro para estimar la concentración en los diferentes puntos receptores, se explican también los métodos auxiliares utilizados, estos son: el método de generación de números aleatorios para una variable con distribución normal y el método de interpolación de Davis, el cual permite obtener valores de las concentraciones en diferentes puntos de la región de estudio en base a la información obtenida mediante el modelo para ciertos puntos.

La siguiente fase en la construcción de un modelo de simulación que aunque importante en la mayoría de las ocasiones no se le presta la atención debida es la **evaluación del modelo**, la manera de realizar dicha evaluación en calidad del aire para los modelos de dispersión se trata en el **capítulo IV**.

Las siguientes etapas que son las de experimentación e interpretación de resultados para la toma de decisiones quedan fuera de los objetivos del trabajo, por lo que se omiten, por otro lado es relevante dejar en claro que los pasos listados anteriormente pueden ser iterativos, es decir en un cierto punto se puede regresar a pasos anteriores con la finalidad de corregir errores detectados.

Finalmente cabe hacer algunas aclaraciones, por lo general un modelo de calidad del aire requiere del desarrollo por separado de varios modelos, por ejemplo: en la mayoría de los casos los modelos meteorológicos son los encargados de realizar los pronósticos de los datos que alimentarán al modelo de dispersión, los cuales a su vez pueden incluir el desarrollo de modelos fotoquímicos y de depositación.

En el caso presente se trata el problema más sencillo la dispersión de contaminantes poco reactivos dadas determinadas fuentes puntuales y las condiciones meteorológicas del lugar, para la estimación de concentraciones en receptores definidos por el usuario.

3.1 Conceptos generales de simulación

El uso actual de la simulación surgió como una alternativa para resolver problemas cuya solución experimental resultaba muy cara o imposible de realizar; o bien su solución analítica era muy complicada.

La simulación consiste en diseñar un modelo que reproduzca los eventos reales, en el cual se puedan considerar diferentes escenarios. Por otro lado, la simulación permite ver el resultado de tomar ciertas decisiones sin necesidad de experimentar con el modelo real.

En el caso del área de calidad del aire, la simulación ha tenido gran éxito debido a que, como se señaló en el **CAPÍTULO II**, se pueden modelar situaciones sin tener que recurrir, ni poner en riesgo, al sistema real (el medio ambiente) y analizar las consecuencias de tomar ciertas decisiones; por ejemplo se puede planear la ubicación de fuentes de emisión fijas (chimeneas), de tal manera que afecten lo menos posible a las poblaciones cercanas.

Una definición de **simulación** considerada formal dice:

"x simula a y" es verdadero si y sólo si:

- (a) *x* \wedge *y* son sistemas formales
 - (b) *y* es el sistema real
 - (c) *x* es una aproximación al sistema real
 - (d) las reglas de validez no están libres de error
- C. WEST CHURCHMAN.**^{3.1}

Otra definición menos formal, pero que es de las más aceptadas y difundidas es la dada por Robert E. Shannon:

"Simulación es el proceso de diseñar y desarrollar un modelo computarizado de un sistema o proceso y conducir experimentos con este modelo con el propósito de entender el comportamiento del sistema o evaluar varias estrategias con las cuales se puede operar el sistema".^{3.2}

Algunos conceptos necesarios en la terminología de simulación son:

⇒ Ecuaciones.

Describen las relaciones entre las **variables**, las cuales son las **entidades** o los **atributos** de estas.

^{3.1} Tomado del libro **Modelos y simulación**. González Videgaray, María del Carmen.

^{3.2} Citado en el libro **Simulación un enfoque práctico**. Coss Bu, Raúl. Editorial Limusa, México 1994.

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

☛ **Variables.**

Las variables pueden ser clasificadas de distintas maneras, si su valor se puede predecir con certeza se dice que la variable es **determinística**, en caso contrario se dice que la variable es **estocástica** o **aleatoria**, este tipo de variable tiene la característica de englobar de alguna manera factores que no se incorporan explícitamente al modelo.

Por otro lado las variables pueden ser **endógenas** o **dependientes**, esto si su valor se determina por la solución del sistema, cuando el valor de la variable es independiente de la solución del sistema a la variable se le da el nombre de **exógena** o **independiente**. Cuando se busca el valor óptimo o un comportamiento determinado de una variable **endógena**, esta se le convierte en una variable **objetivo**.

☛ **Estado del sistema.**

Es el valor que en un momento determinado tienen los **atributos** del sistema.

☛ **Variables de estado.**

Si cada uno de los atributos que conforman el sistema pueden ser cuantificados, entonces estos pueden ser representados por una única variable, llamada **variable de estado**.

☛ **Variables de decisión.**

Existen variables cuyo valor puede especificarse al inicio del problema, pero que son independientes del sistema y que sin embargo influyen en el estado del sistema, este tipo de variables son las **variables de decisión** de un sistema.

☛ **Relaciones de causa-efecto.**

En un sistema las relaciones entre sus variables describen la interacción entre estas, las relaciones expresarán leyes físicas, químicas, etc; que gobiernan al sistema y se representarán mediante ecuaciones.

☛ **Criterio de ejecución del sistema.**

El criterio para la ejecución del sistema por lo regular estará determinado por las variables de estado o de decisión.

3.2 Método general de la simulación

Se han propuesto una serie de pasos para llevar a cabo una simulación, los cuales se citan a continuación:

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

- **Definición del sistema.** En este paso es necesario delimitar cuales son las entidades o elementos que conforman el sistema y la interacción que existe entre estas; además determinar que otros sistemas influyen en el sistema de estudio y lo más importante definir cual es el objetivo del desarrollo del modelo; es decir que resultados se espera obtener de él.
- **Formulación del modelo.** Una vez que se definieron las entidades, relaciones y el tipo de resultado que se espera obtener del modelo; el siguiente paso es construirlo, esto significa que se deberán traducir todas nuestras definiciones del sistema a un lenguaje matemático, las entidades y sus atributos pasarán a ser variables, y las relaciones ecuaciones. Además se diseñan los diagramas de flujo, que ayudan a la posterior programación del modelo.
- **Colección de datos.** En este paso es importante definir en detalle que datos se van a necesitar para producir los resultados deseados; en ocasiones estos serán difíciles de conseguir.
- **Implementación del modelo en la computadora.** Una vez que se ha construido el modelo es necesario decidir sobre que tipo de lenguaje se va a implementar. Un modelo de simulación puede implementarse en un **lenguaje de propósito general** como: **PASCAL, FORTRAN, C,** etc; estos tienen la ventaja de ser flexibles en cuanto a los formatos de salida de reportes, el tipo de experimentos que pueden realizarse y son conocidos más ampliamente por los analistas. También se puede utilizar un **lenguaje de propósito específico**, como **GPSS, SLAM, GEMS, SIMSCRIPT, IFPS;** estos facilitan la programación del sistema, se tiene un esquema conceptual que permite formular el modelo, los movimientos en el tiempo se hacen de forma automática, algunos incluyen la opción de animación, se generan variables aleatorias que siguen el comportamiento de distintas funciones de distribución, permiten obtener ciertas estadísticas de interés y el compilador (o traductor) permite detectar errores de sintaxis y lógica.
- **Validación.** Esta etapa es primordial en el desarrollo de la simulación, pues permite detectar deficiencias en el modelo, o en los datos que lo alimentan. Las formas más comunes de validar el modelo son las siguientes:
 - **Comparación de resultados con el sistema real.** Consiste en comparar las salidas del modelo de simulación con datos obtenidos mediante la ejecución del sistema real. La comparación se realiza con medidas tales como la media o la varianza; o bien se hacen pruebas de hipótesis no paramétricas, estas últimas presentan la dificultad de requerir muestras grandes lo cual en ocasiones es difícil de obtener a partir del sistema real, por otro lado puede que el modelo tome en cuenta ciertas condiciones que no se han dado en el sistema real.

En el caso de los modelos de calidad del aire la evaluación del modelo puede hacerse en base a la comparación de los valores obtenidos mediante el modelo y mediciones realizadas en la zona de estudio. Una de las evaluaciones más simple consiste en comparar los coeficientes de correlación entre las salidas del modelo y los datos medidos, correlaciones altas (un resultado raro) indican que el modelo es bueno, correlaciones bajas (el caso más común) indican que el modelo es pobre. No hay que olvidar que existen errores inherentes a las mediciones, además las salidas de los modelos son valores promedio, mientras que las mediciones son "realizaciones justas".

- **El método Delphi.** Este método se desarrollo como una alternativa para validar modelos en los cuales la información cuantitativa no existe o es muy pobre. Consiste en seleccionar un grupo de expertos los cuales deberán de llegar a un consenso sobre la desición analizada. Es importante hacer notar que el grupo de expertos nunca se reúne para discutir el problema, por lo regular se envía un cuestionario a cada miembro del grupo con un conjunto de preguntas adecuadas para la validación, luego que se recaba la información concerniente a la primera ronda se formula un nuevo cuestionario con preguntas más específicas, teniendo en cuenta la información obtenida en la primer fase de preguntas, pero sin aclarar el origen de las opiniones. Lo anterior evita enfrentamientos entre el grupo lo cual provoca que los resultados se sesguen o se demoren.
- **La prueba de Turing.** Esta prueba fue propuesta por Alan Turing, al igual que el método Delphi consiste en reunir un grupo de expertos, a los cuales se les remiten los resultados obtenidos por la simulación y datos obtenidos mediante la ejecución del sistema real sin indicar cual corresponde a cada uno. Si los expertos no saben distinguir entre los resultados obtenidos mediante el sistema real y el modelo de simulación, entonces se puede considerar al modelo válido.
- **La conducta de los casos extremos.** Es una prueba bastante sencilla que consiste en llevar al modelo a casos extremos, o bien a situaciones donde se conoce el comportamiento del sistema. Si el modelo sigue el comportamiento esperado, entonces será válido.
- **Experimentación.** Una vez validado el modelo se pueden obtener los resultados para los cuales se creo la simulación.
- **Interpretación.** En base a los resultados obtenidos en la simulación estos son interpretados y de acuerdo a esta interpretación se toma una decisión; cabe señalar que como se mencionó en el **CAPÍTULO II**, los modelos únicamente son una herramienta que permite tomar decisiones con un fundamento más objetivo.

- **Documentación.** Se deben de elaborar dos tipos de documentaciones, una de tipo técnico que contenga información detallada de la elaboración del modelo y un manual del usuario, que proporcione al usuario final la forma de utilización del software.

En los siguientes apartados se desarrollan los puntos mencionados de acuerdo al modelo de dispersión de partículas.

3.2.1 Definición del sistema y formulación del modelo.

El objetivo del presente trabajo es desarrollar un modelo capaz de dar la concentración de un contaminante poco reactivo en un punto de interés (receptor), dada una fuente de emisión puntual (chimenea) y conociendo la información meteorología del lugar.

Los conceptos en los cuales se basa el modelo son los expuestos en el capítulo previo para el modelo de partículas, por lo tanto se utilizan las ecuaciones correspondientes.

A manera de reseña se puede decir que el sistema consta de las siguientes etapas: la emisión del contaminante desde una fuente, su transporte y dispersión en la atmósfera y finalmente la captación de estos por sitios llamados receptores. En la primer etapa es necesario conocer las características de las emisiones, como son: la razón de emisión, la altura de la chimenea, su diámetro, la temperatura y velocidad a la cual salen los gases contaminantes; en la segunda etapa es indispensable conocer la meteorología del lugar debido a su importancia en el proceso de dispersión. El diagrama que describe al sistema se presenta en el capítulo uno **figura 1.2**, titulado esquema del ciclo de vida de los contaminantes.

El modelo consiste, a grandes rasgos, en simular la trayectoria de n partículas emitidas por una fuente y luego estimar la concentración en los puntos receptores en un tiempo dado de acuerdo a la posición de las partículas emitidas.

A continuación en las **Tablas 3.1 a 3.5** se muestra un desglose de las variables, parámetros, constantes y ecuaciones que describen el sistema.

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

Q	Razón de emisión (g/sec)
hs	Altura de la chimenea (metros)
ds	Diámetro de la chimenea (metros)
Ts	Temperatura de salida de los gases (grados Kelvin)
Vs	Velocidad de salida de los gases (m/sec)
teta	Dirección del viento (grados)
(u, v, w)	Vector de velocidad media del viento (m/sec)
Δt	Incremento de tiempo (sec)
Epsilon	Variable aleatoria proveniente de una distribución normal con media cero y varianza uno.

Tabla 3.1 Variables exógenas o independientes pertenecientes a el sistema de dispersión de contaminantes.

pos(x, y, z) _t	Posición de una partícula en el t-ésimo tiempo (metros)
velocidad(x, y, z)	Velocidad instantánea del viento (m/sec)
vel_med(x, y, z)	Velocidad media del viento a la altura z (m/sec)
fluc_vel(x, y, z) _t	Fluctuación de la velocidad en el t-ésimo tiempo
DELTAH	Elevación de la pluma (metros)
ΔT	Diferencia entre la temperatura ambiente y la temperatura de salida de los gases (grados Kelvin)
Fm	Elevación de la pluma debido a la cantidad de movimiento
Fb	Elevación de la pluma debido a la fuerza ascensional
Vd	velocidad de depositación del contaminante (m/sec)
c(x, y, z) _t	Concentración en el punto (x, y, z) en el t-ésimo tiempo (μ/m ³)
Estabilidad	Clase de estabilidad (1-7)
h	Altura de capa de mezcla (metros)

Tabla 3.2. Variables endógenas o dependientes del sistema de dispersión de contaminantes.

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

$b(x, y, z)$	Parámetro utilizado en la secuencia de Markov para la obtención de la fluctuación del viento
$a(x, y, z)$	Parámetro utilizado en la secuencia de Markov para la obtención de la fluctuación del viento
$TL(x, y, z)$	Autocorrelación lagrangiana (sec)
σ_u	Desviación estándar de la velocidad del viento en el eje x (m/sec)
σ_v	Desviación estándar de la velocidad del viento en el eje y (m/sec)
σ_w	Desviación estándar de la velocidad del viento en el eje z (m/sec)
$\sigma(x, y, z)$	Desviación estándar de cada nube o bocanada emitida por la chimenea, con respecto a su centro de masa (metros)
f	Parámetro de Coriolis
L	Longitud de Monin Obukhov
z_0	Longitud de rugosidad (metros)
u_*	Velocidad de fricción (m/sec)

Tabla 3.3. Parámetros utilizados en el modelo de dispersión atmosférica.

Identificador	Descripción
$g=9.8 \text{ m/sec}^2$	gravedad
$K= 0.4$	constante de Von Karman
$\omega= 0.0000729$	razón de rotación de la tierra
$\pi= 3.1416$	número pi

Tabla 3.4. Constantes utilizadas en el modelo de dispersión atmosférica.

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

POS _{zt}	hs+DELTAH
Fb	$gv_s d_s^2 \left[\frac{\Delta T}{4T_s} \right]$
Fm	$v_s^2 d_s^2 \frac{T_s}{4T_s}$
pos(x, y, z) _t	pos(x, y, z) _{t-1} + velocidad(x, y, z) * Δt
velocidad(x, y, z)	vel_med(x, y, z) + fluc_vel(x, y, z)
fluc_vel(x, y, z) _t	a(x, y, z) * fluc_vel(x, y, z) _{t-1} + b(x, y, z) * σ _u (x, y, z) * Epsilon(x, y, z)
vel_med(x, y, z)	Ver formulación de la ecuación 2.68
c(x, y, z)	$\frac{Q\Delta t}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x-x)^2}{var_x}\right) \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(y-y)^2}{var_y}\right) \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(z-z)^2}{var_z}\right)$

Tabla 3.5. Ecuaciones utilizadas en el modelo de dispersión.

Antes de presentar el diagrama de flujo general se debe hacer notar las siguientes convenciones que se adoptan en la interpretación de los diagramas.

- ☛ Los cuadros sombreados indican una subrutina, cuyo diagrama de flujo se presenta también.
- ☛ Cuando se presenta una expresión del tipo 3.1 significa que a cada uno de los componentes que conforman el vector C se le aplica la operación indicada en el segundo miembro con el valor correspondiente del vector, como se ilustra en la ecuación 3.2.

$$C(x, y, z) = \sqrt{a(x, y, z)} \text{ ----- } 3.1$$

$$C(x, y, z) = (\sqrt{a * x}, \sqrt{a * y}, \sqrt{a * z}) \text{ ----- } 3.2$$

Esto con la finalidad de resumir en un único paso, expresiones que se deben aplicar a cada uno de los ejes.

El algoritmo general de la simulación se presenta en el diagrama de flujo 3.1, el primer paso indica que se trata de una subrutina llamada LEER ENTRADAS E INICIALIZAR VARIABLES, la cual como su nombre lo indica sirve para dar información acerca de las condiciones en las cuales se desea realizar la simulación; además se inicializan algunas variables utilizadas en el sistema. El siguiente paso es determinar la

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

posición de cada una de las partículas emitidas por la(s) chimenea(s) mediante la rutina DETERMINAR LA POSICIÓN DE LA K-ÉSIMA PARTÍCULA; se debe de indicar que cuando se genera una nueva partícula, lo cual se realiza cada paso de tiempo, se inicializa la información acerca de su posición, después se incrementa el tiempo y se checa si el tiempo total transcurrido(TT) es igual al tiempo final(TF), en cuyo caso se calcula la concentración para cada receptor definido con la rutina DETERMINAR CONCENTRACIÓN EN RECEPTOR.

Finalmente al concluirse el ciclo para el cual se desea conocer la concentración se procede a generar la isopleta, mediante la subrutina GENERO ISOPLETA, a continuación se explica cada subrutina de manera individual.

DESCRIPCIÓN DE LA RUTINA LEER ENTRADAS E INICIALIZAR VARIABLES.

En esta rutina se abre la base de datos donde se encuentra la información meteorológica, además se pide al usuario la información necesaria para realizar la simulación, la cual incluye:

- ☛ El nombre del archivo en formato **Dbase III** que contiene la información necesaria para definir las coordenadas de los puntos receptores.
- ☛ El nombre del archivo en formato **Dbase III** que contiene la información de las fuentes: razón de emisión del contaminante, velocidad y temperatura de salida de los gases, diámetro y altura de la chimenea, lo cual sirve para determinar la masa inicial de la partícula emitida, así como la posición inicial en la vertical mediante la altura de la chimenea y la elevación de la pluma.
- ☛ La latitud (grados, minutos y segundos), indispensable para calcular el parámetro de Coriolis f .
- ☛ Además se transforma el tiempo total(TF) a segundos, se inicializa la semilla para que en cada ejecución del programa se genere una serie de números aleatorios diferente. A las variables que se utilizan para estimar la concentración en cada punto receptor se les asigna el valor inicial cero.

El diagrama de flujo 3.2 muestra el algoritmo para dicha subrutina.

SUBROUTINA PARA DETERMINAR LA POSICIÓN DE CADA PARTÍCULA.

Esta subrutina cuyo diagrama de flujo se presenta en el esquema 3.3 se utiliza para determinar la posición de cada partícula, cuando ésta es emitida la posición en los ejes x , y corresponde a la ubicación de la fuente, la posición en la vertical está determinada por la altura de la chimenea más la elevación de la pluma, éste último término se obtiene mediante las ecuaciones señaladas en el **Capítulo II**.

Cuando la partícula tiene un tiempo de vida mayor que cero su posición se obtiene en función de su posición anterior y de un incremento en la distancia recorrida, el cual está determinado por la velocidad del viento y el paso de tiempo. Como se ha mencionado en repetidas ocasiones la velocidad del viento es la variable que introduce el término turbulento. En el diagrama 3.3 se puede observar que dicho término se obtiene mediante el módulo FLUCTUACIÓN DE LA VELOCIDAD, consistente en:

- Leer la fluctuación anterior de la velocidad de la partícula.
- Estimar los parámetros $T_L(x, y, z)$ y $\sigma_u(x, y, z)$, mediante la formulación semiempírica propuesta por Hanna en 1982.
- Obtener $a(x,y,z)$, $b(x,y,z)$ y $\text{EPSILON}(x, y, z)$, este último vector se obtiene mediante el módulo GENERA NÚMEROS ALEATORIOS CON DISTRIBUCIÓN NORMAL, que se explica en el apartado **métodos auxiliares empleados en la simulación**.
- Obtener el valor de la fluctuación de la partícula, mediante la expresión 2.46
- Almacenar el valor actual de la fluctuación.
- Regresar el valor de la fluctuación.

El viento medio se lee de la base de datos meteorológica y se utiliza la ecuación 2.68 para estimar el viento medio a la altura z de la partícula, esta rutina también llama al módulo encargado de estimar los desviaciones estándar σ_x , σ_y , y σ_z del centro de masa de la partícula, los valores iniciales de tales parámetros son iguales a 0.369 multiplicado por el diámetro de la fuente para la horizontal y $\Delta h(3.16)^{-1}$ en la vertical, para tiempos mayores los parámetros se determinan mediante las expresiones 2.71 o 2.72 del capítulo anterior (ver diagrama de flujo 3.4).

SUBROUTINA DETERMINAR CONCENTRACIÓN EN RECEPTORES.

El diagrama de flujo que presenta el algoritmo utilizado en la estimación de concentración en los receptores definidos por el usuario (diagrama 3.5), se divide en tres partes separadas por una línea punteada; en primer lugar esta rutina determina la masa de la partícula, pues durante su trayectoria puede haberse precipitado parte del material que la conforma; en la segunda parte del algoritmo, en caso de presentarse condiciones inestables, chequea que la partícula se encuentre dentro o fuera de la capa de mezcla, ya que en caso de encontrarse fuera de la capa de mezcla la partícula estará sometida a condiciones estables, de otra forma se considera que la nube tiene buen mezclado convectivo.

La última parte del algoritmo estima el aporte de la partícula a cada receptor, si el receptor se encuentra a una distancia menor de seis desviaciones estándar del centro de la nube se asume que la partícula contribuye en la concentración del receptor, para determinar la cantidad de materia que aporta la nube al receptor se utiliza el método del kernel considerando que la concentración sigue una distribución gaussiana.

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

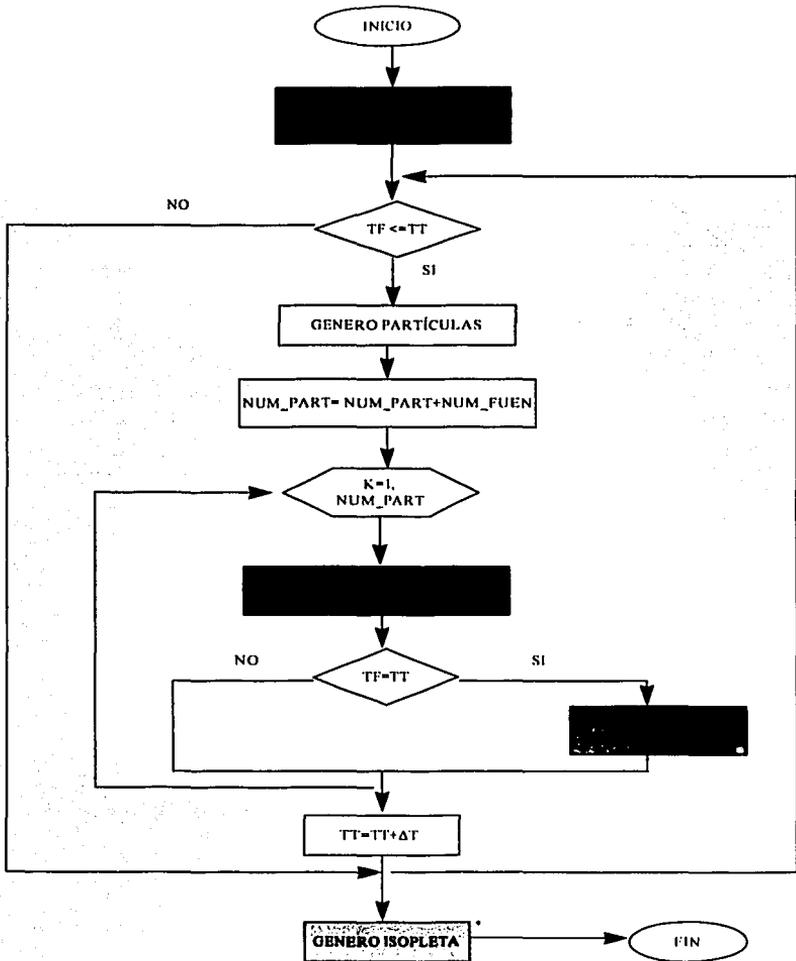


DIAGRAMA 3.1 Diagrama de flujo general.

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

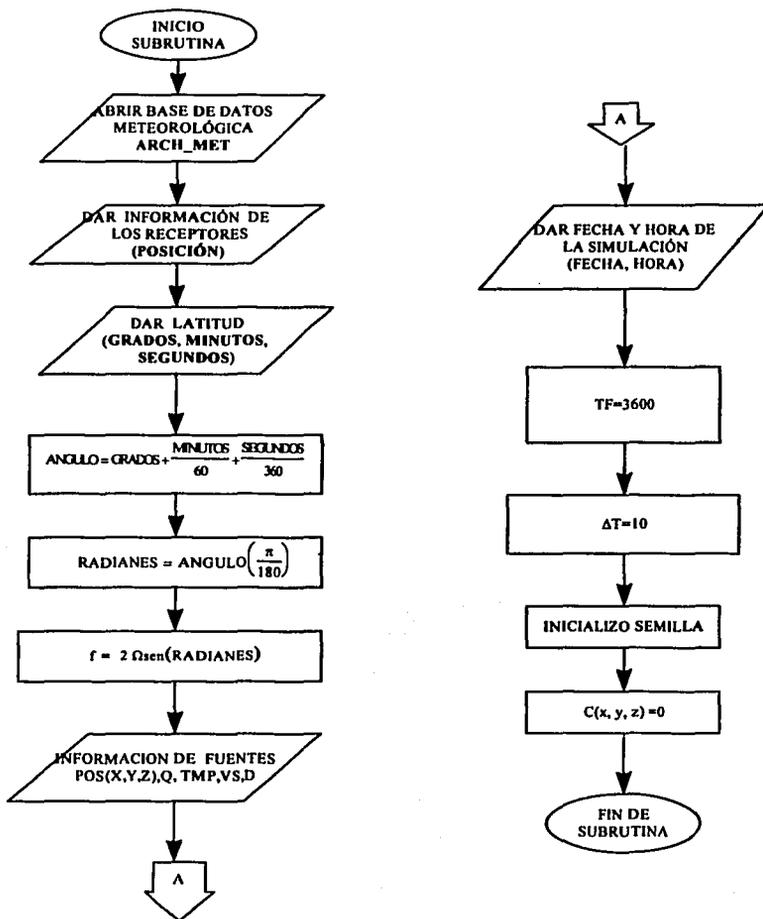


DIAGRAMA 3.2 Diagrama de flujo de la subrutina LEER ENTRADAS E INICIALIZAR VARIABLES.

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

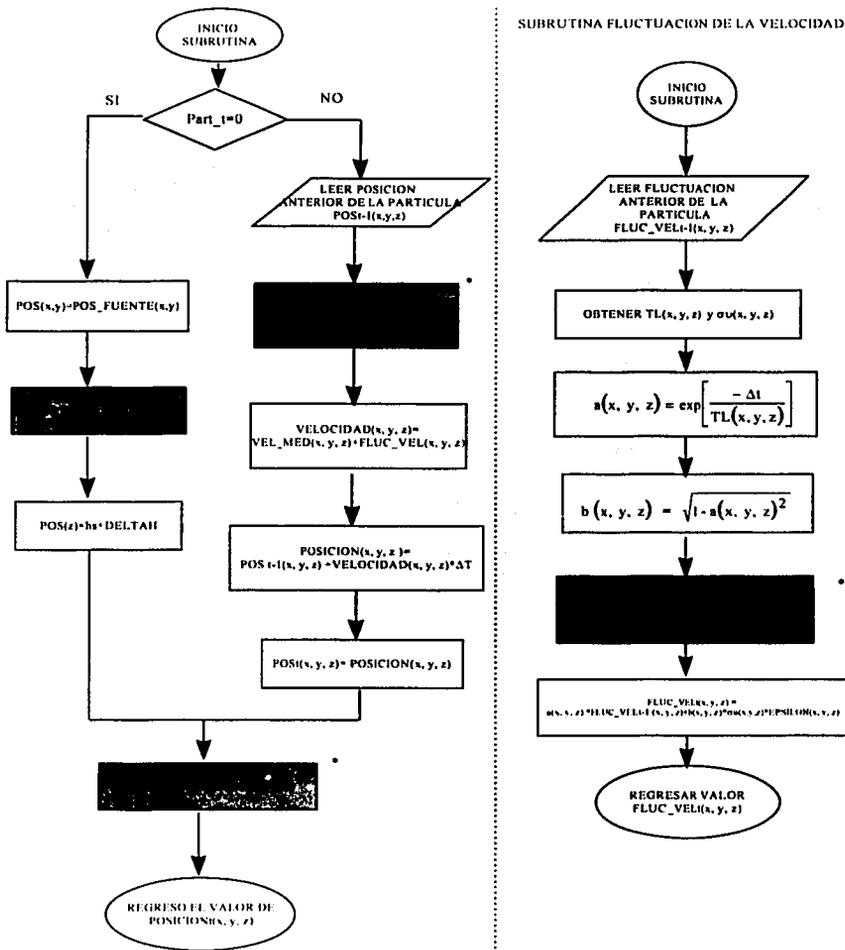
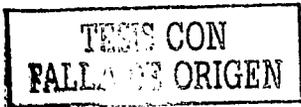


DIAGRAMA 3.3 Diagramas de flujo que representan los algoritmos para la determinación de la posición de la partícula y la fluctuación de la velocidad.



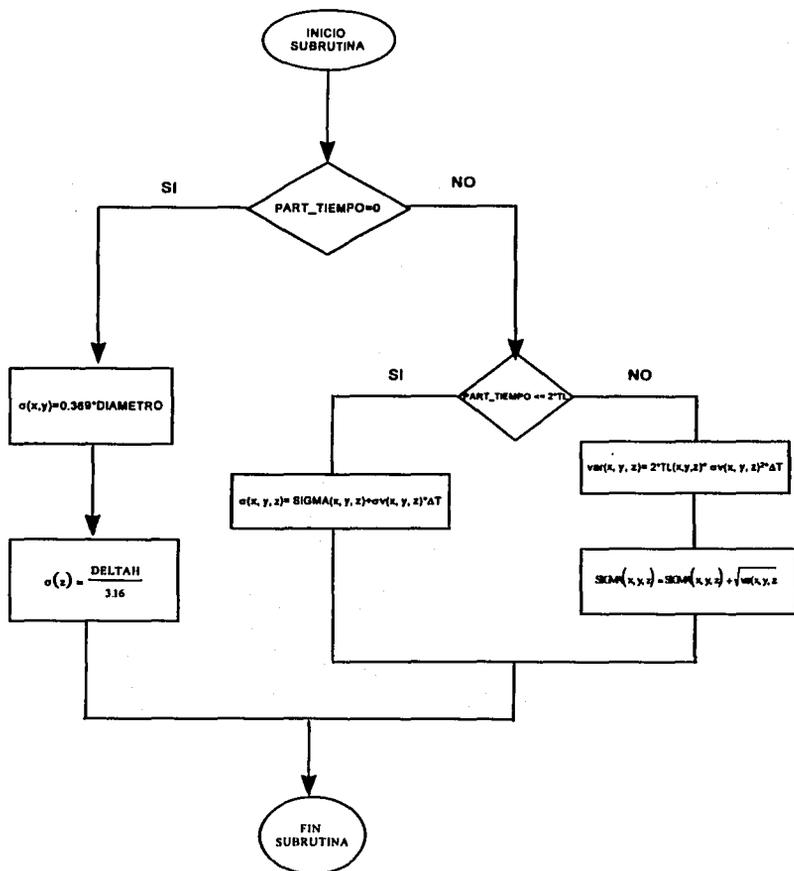


DIAGRAMA 3.4 Diagrama de flujo que muestra el algoritmo para estimar la desviación estándar con respecto al centro de masa de cada partícula emitida.

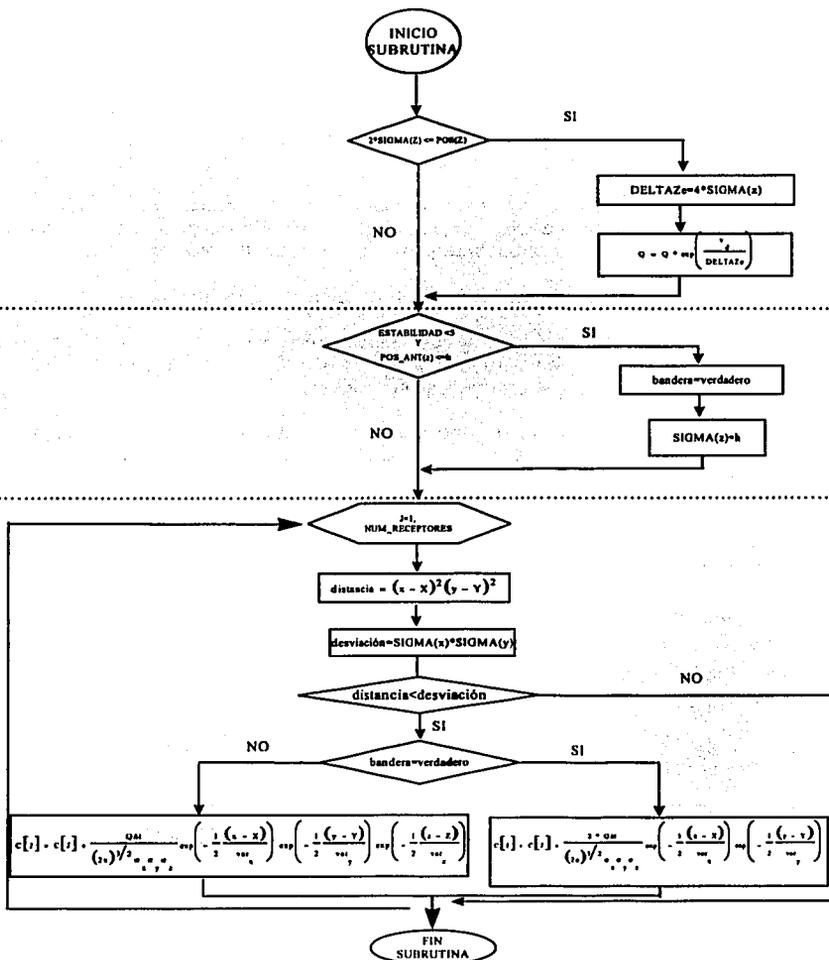
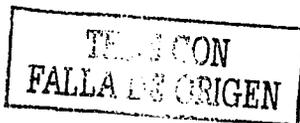


DIAGRAMA 3.5 Diagrama de flujo que muestra el algoritmo para obtener la concentración en un punto receptor.



3.2.2 Métodos auxiliares empleados en la simulación

Para la implementación del modelo se requieren de algunos métodos auxiliares como: un método de interpolación para la obtención de concentraciones en los diferentes puntos de la región, en base a los valores obtenidos mediante el modelo de las concentraciones en los puntos receptores.

Otros métodos auxiliares son los utilizados para generar valores para variables aleatorias con distribución uniforme y normal.

A continuación se explica primero el método de interpolación de Davis utilizado para generar las isoplefas; además de los métodos y algoritmos para la generación de números aleatorios para las correspondientes funciones de distribución.

3.2.2.1 Método De Interpolación De Davis Para Generar Las Isoplefas.

Las isoplefas son gráficas que representan regiones con concentraciones iguales, este tipo de herramientas son útiles para visualizar de manera gráfica el comportamiento de la dispersión de contaminantes en una región definida.

La forma de realizar este tipo de gráficas consiste simplemente en que dados algunos valores de concentraciones para ciertos puntos de la región de estudio, se pueden obtener mediante métodos de interpolación los valores correspondientes a los diferentes puntos que conforman la región.

El método de interpolación utilizado en este trabajo se basa en la fórmula modificada de Davis, la cual se explica a grandes rasgos a continuación:

Suponiendo que se tienen dos puntos x_1 y x_2 , donde $x_1, x_2 \in R^n$, y además se conocen las mediciones y_1 y y_2 para dichos puntos, donde $y_1, y_2 \in R^t$. Se desea conocer el valor y para cada $x \in (x_1, x_2)$. Davis supuso la existencia de un número adimensional D_x , que depende de x de forma tal que:

$$D_x = \frac{\|x_1 - x\|}{\|x_2 - x\|} = \frac{|y_1 - y|}{|y_2 - y|}$$

Es decir, si se considera x en el origen, la variación de y con respecto a y_1 y y_2 es lineal, y la pendiente es la razón de las normas $\|x_1 - x\|$ y $\|x_2 - x\|$. Por otro lado, suponiendo que $y_1 \leq y \leq y_2$, se tiene:

$$\frac{\|x_1 - x\|}{\|x_2 - x\|} = \frac{y - y_1}{y_2 - y}$$

de lo cual resulta:

$$y \left(\frac{1}{\|x_1 - x\|} + \frac{1}{\|x_2 - x\|} \right) = \frac{y_1}{\|x_1 - x\|} + \frac{y_2}{\|x_2 - x\|}$$

Generalizando para un sistema n-dimensional:

$$y = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{y_i}{\|x_i - x\|}}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{\|x_i - x\|}}$$

la cual es conocida como la fórmula generalizada de Davis. En la figura 3.6 se puede observar el diagrama de flujo del algoritmo seguido en la generación de isopietas.

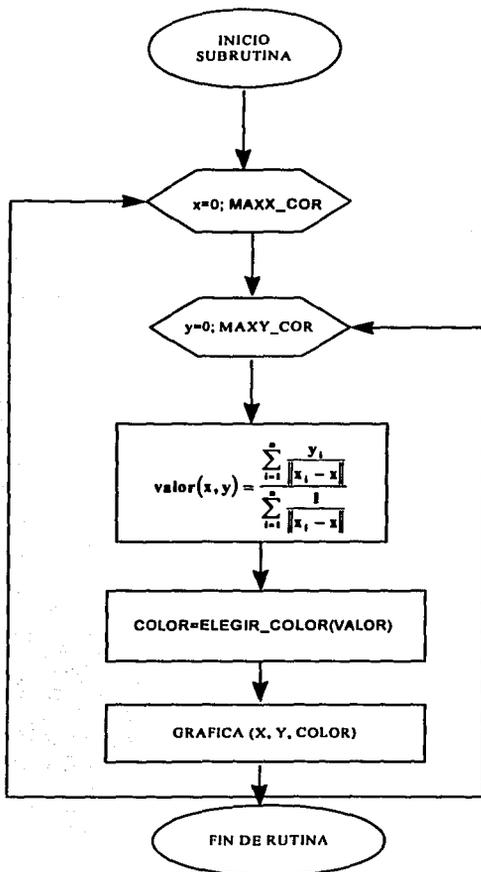


DIAGRAMA 3.6 Diagrama de flujo que muestra el algoritmo para generar la isopleta.

3.2.2.2 Generación de Números Aleatorios.

Los modelos de simulación requieren de la generación de números aleatorios que representen una cierta función de probabilidad. En el caso de la simulación de las fluctuaciones del viento para el modelo de partículas (ver ecuación 2.46) es necesaria la generación de números aleatorios que sigan el comportamiento de una distribución normal con media cero y varianza uno.

En general un generador de números aleatorios debe de cumplir con las siguientes características:

1. Los números obtenidos deben ser reproducibles.
2. El método para su generación debe ser rápido.
3. No debe requerir mucho almacenamiento de computó.
4. Tener un periodo de repetición suficientemente largo.
5. No degenerar, es decir no reproducir el mismo número aleatorio.

Existen diferentes métodos para obtener números aleatorios rectangulares, los cuales se listan a continuación:

1. **Métodos manuales.** Consiste en la obtención de números aleatorios mediante la ejecución de experimentos de azar; como el lanzamiento de un dado. Los resultados obtenidos mediante este procedimiento no son reproducibles y por lo regular son lentos.
2. **Tablas de números aleatorios.** Existen varias tablas que contienen números aleatorios como las tablas de la Rand, cuyos resultados fueron obtenidos mediante un método para computadora analógica y que pueden ser utilizados para alimentar los datos requeridos por el modelo. No son recomendables para su uso en computadora debido a la gran cantidad de almacenamiento que necesitan.
3. **Métodos para computadora digital.** Estos varían desde el método de los cuadrados medios, el cual en el presente sólo se nombra como referencia histórica, hasta los métodos congruenciales. Estos últimos en realidad son considerados por diversos autores como números pseudoaleatorios, debido a que se obtienen por métodos determinísticos, no obstante que cumplen con todas las pruebas estadísticas de aleatoriedad, el método empleado en el presente trabajo es el método congruencial multiplicativo, implementado para una máquina de 32 bits por palabra.

Método congruencial multiplicativo.

Se basa en una relación de congruencia, como información adicional se da la siguiente definición de congruencia.

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

"Dos números enteros A, B son congruentes si (A-B) es divisible entre m, donde $m \in \mathbb{Z}$ y A, B dan el mismo residuo al dividirse entre m; es decir A es congruente con B módulo m si y sólo si existe una $k \in \mathbb{Z}$ tal que: "

$$(A - B) = km$$

La función de recurrencia de este método es:

$$r_{n+1} = ar_n \pmod{m}$$

El método necesita elegir valores adecuados para r_0 , a y m , de tal manera que maximicen el periodo del generador. Los criterios de selección de los parámetros mencionados anteriormente son los siguientes:

1. Selección de r_0 .

El valor de la semilla puede ser cualquier entero impar relativamente primo a m .

2. Selección de a .

El valor seleccionado para a se obtiene a partir de la siguiente expresión:

$$a = 8t \pm 3$$

siendo t cualquier entero.

3. Selección de m .

El valor seleccionado para m debe ser 2^d , si m se elige de esta manera el periodo del generador sera 2^{d-2} ó $m/4$.

GENERACIÓN DE NÚMEROS RECTANGULARES PARA UNA PALABRA DE 32 BITS.

Para la generación de los números rectangulares utilizados para la obtención de números aleatorios provenientes de una distribución normal, se implemento un programa basado en el método congruencial multiplicativo para una palabra de 32 bits

Como se vio anteriormente el método se basa en la siguiente relación de recurrencia:

$$r_{n+1} = ar_n \pmod{m}$$

Diseño e Implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

Si se considera una palabra de **32 bits**, los valores de **a** y **m** que maximizan el periodo son los siguientes:

- **Selección de a.**

De acuerdo a lo establecido en diversos trabajos el valor de **a** que maximiza el periodo es:

$$a = 5^{13} = 1220703125$$

El cual cumple que:

$$a = 8t \pm 3$$

$$1220703125 = 1220703128 - 3$$

pues:

$$1220703128 \bmod 8 = -3$$

- **Selección de m.**

El valor de **m** es 2^{b-1} , donde **b** es el número de bits por palabra, si la palabra es de 32 bits **m** será igual a:

$$2^{32-1} = 2^{31} = 2147483648$$

y el periodo sería:

$$\frac{m}{4} = 536870912$$

El algoritmo para implementar la generación números rectangulares basado en un método congruencial multiplicativo con tamaño de palabra de 32 bits es:

Entradas: iy, ix, fy

Salidas: fy

DESCRIPCIÓN DE VARIABLES	
iy	número aleatorio generado
ix	número aleatorio generado en el paso anterior
fy	número rectangular obtenido

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

1. Generar un número impar ix .
2. Hacer

$$iy = (1220703125 * ix) \bmod 2147483648$$

3. Obtener el número con distribución uniforme lo cual se logra haciendo:

$$fy = iy * \frac{1}{2147483648}$$

4. Asignar

$$ix = iy$$

5. Regresar al paso 2 tantas veces como números se quieran generar.

En el momento de implementar el algoritmo en computadora se tendrá cuidado en tomar en cuenta el sobreflujo provocado por la multiplicación de a y ix , pues podrá dar como resultado un número mayor o igual que m cuyo valor se manejará negativo en la computadora.

Una vez implementado el algoritmo para la generación de números rectangulares es necesario comprobar si en realidad son aleatorios, esto se logra aplicando ciertas pruebas estadísticas a los datos generados.

Una de las pruebas más importante de aleatoriedad es la conocida como prueba de frecuencias, la prueba de hipótesis para el presente caso queda planteada de la siguiente manera:

Hipótesis nula H_0 : Los números generados siguen una distribución uniforme.

Hipótesis alternativa H_1 : Los números siguen otra distribución.

Los pasos para realizar esta prueba consisten en:

- ♦ Obtener n subintervalos, donde el valor de n estará dada por la siguiente expresión:

$$1 + 3.322 * \log(N)$$

donde N es el tamaño de la muestra.

- ♦ Contabilizar las frecuencias observadas en cada intervalo, es decir FO_i para el i -ésimo subintervalo.
- ♦ Obtener las frecuencias esperadas mediante la siguiente expresión:

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

$$FE_i = \frac{N}{n}$$

- ◆ Obtener el estadístico X_0^2 , mediante la siguiente expresión:

$$X_0^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(FO_i - FE_i)^2}{FE_i}$$

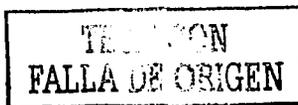
- ◆ El estadístico anterior se compara con el valor obtenido mediante tablas de $X_{\alpha, (n-1)}^2$ donde α es el nivel de significancia con $(n-1)$ grados de libertad. Si $X_0^2 < X_{\alpha, (n-1)}^2$, entonces no se puede rechazar la hipótesis de que la muestra proviene de una distribución uniforme.

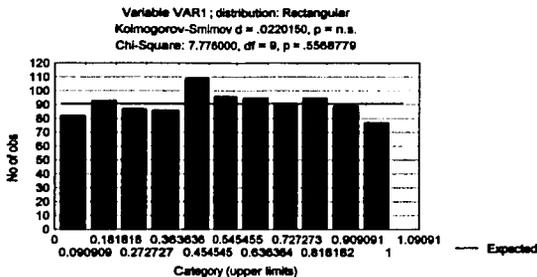
Si dados 1000 números aleatorios fueron generados en computadora mediante la implementación del método congruencial multiplicativo para una palabra de 32 bits y usando el paquete **STATISTICA** para la elaboración de la prueba de frecuencias los resultados se presentan en la siguiente tabla:

		Kolmogorov-Smirnov d = .0220150, p = n.s. Chi-Square: 7.776000, df = 9, p = .5568779								
Upper Boundary		observ	cuacul	percen	cuacul	expect	cuacul	percen	cuacul	
Lower Boundary		freq	c	observ	observ	freq	c	expect	expect	
<= .09091		82	82	8.2	8	90.9	91.	9.09	9.	-9.
.181818		93	175	9.3	18.	90.9	182.	9.09	18.	2.
.272727		87	262	8.7	26.	90.9	273.	9.09	27.	-4.
.363636		86	348	8.6	35.	90.9	364.	9.09	36.	-5.
.454545	109	457	10.9	46.	90.9	455.	9.09	45.	18.	
.545455	96	553	9.6	55.	90.9	545.	9.09	55.	5.	
.636364	95	648	9.5	65.	90.9	636.	9.09	64.	4.	
.727273	91	739	9.1	74.	90.9	727.	9.09	73.		
.818182	95	834	9.5	83.	90.9	818.	9.09	82.	4.	
.909091	89	923	8.9	92.	90.9	909.	9.09	91.	-2.	
1.000000	77	1000	7.7	100.	90.9	1E3	9.09	100.	1.	

Se obtiene un valor de $X_0^2 = 7.776$ y el valor en tablas es de $X_{0.05, 10}^2 = 18.31$ para $\alpha=0.05$, por lo que se puede concluir que dado que $X_0^2 < X_{0.05, 10}^2$, no se puede rechazar la hipótesis de que los números provienen de una distribución uniforme.

Finalmente se puede observar la gráfica de frecuencias de los datos para visualizar que siguen el comportamiento de una distribución uniforme.





Procedimiento para generar números aleatorios con distribución normal estándar.

La generación de números aleatorios para variables de ciertas distribuciones de probabilidad, como la **distribución normal** son demasiado complicados de obtener mediante los métodos del rechazo y composición,^{3.3} pues exigen la obtención de la función de distribución acumulativa; por lo que se han ideado procedimientos para simular estos valores en base a las propiedades de las funciones.

Existen varias formas de simular números aleatorios que sigan un comportamiento normal, uno de los métodos de simulación se apoya en el **Teorema del límite central**, el cual establece que la suma de n variables aleatorias independientes se aproxima a una distribución normal cuando n tiende al infinito. De otra forma, si x_1, x_2, \dots, x_n son una secuencia de n variables aleatorias independientes con $E(x_i) = \mu_i$, $Var(x_i) = \sigma^2$, $Y = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n$, entonces bajo ciertas condiciones se cumple que:

$$Z = \frac{Y - \sum_{i=1}^n a_i \mu_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n a_i^2 \mu_i^2}}$$

tiene una distribución normal estándar a medida que n tiende a infinito.

Para la implementación de este método resulta conveniente suponer que las variables que se están sumando siguen una distribución uniforme, esto debido a la facilidad para generar números rectangulares, entonces:

^{3.3} Los métodos de generación números aleatorios para variables aleatorias con distribución no uniforme se explican de manera detallada en el libro "Simulación, un enfoque práctico" de *Coss Bu, Raúl*. Editorial Limusa, México 1994.

$$Z = \frac{\sum_{i=1}^n r_i - \frac{n}{2}}{\sqrt{\frac{n}{12}}} \quad \text{-----} \quad 3.3$$

tiene una distribución normal estándar, la cual se obtiene como:

$$Z = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

despejando x y sustituyendo el valor Z de la ecuación 3.1.

$$x = \mu + \sigma \left(\frac{\sum_{i=1}^n r_i - \frac{n}{2}}{\sqrt{\frac{n}{12}}} \right)$$

Se ha encontrado que cuando $n=12$ la confiabilidad de los valores simulados es aceptable, haciendo esta consideración se tiene finalmente que:

$$x = \mu + \sigma \left(\sum_{i=1}^{12} r_i - 6 \right)$$

en el diagrama 3.7 se muestra el algoritmo para la generación de números aleatorios para una variable con distribución normal.

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

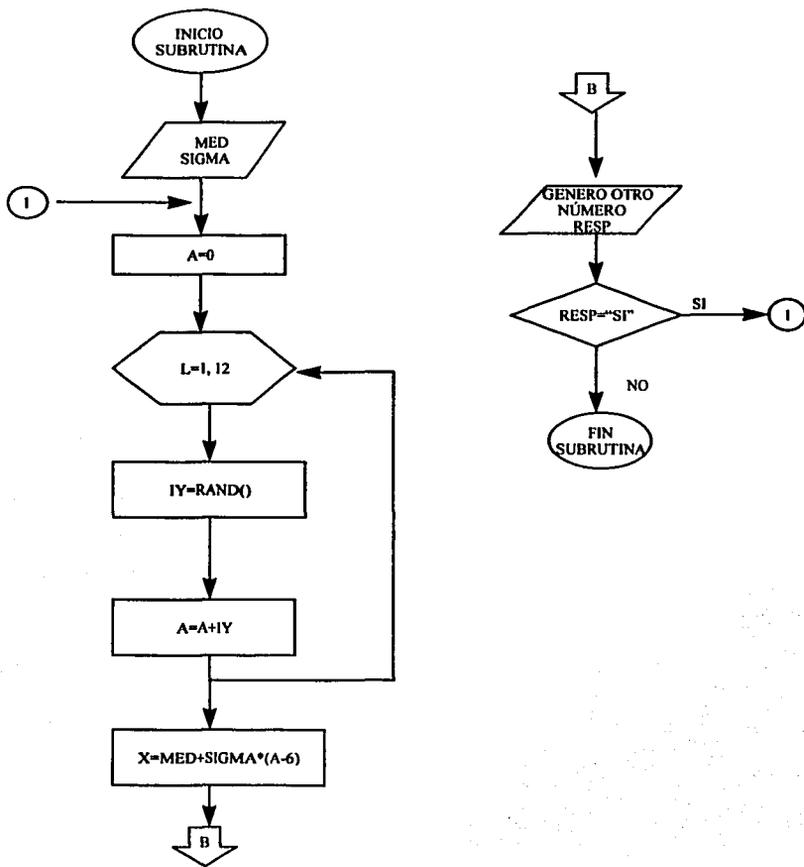


DIAGRAMA 3.7. Diagrama de flujo que muestra el algoritmo para generar números aleatorios para una variable con distribución normal.

3.2.3 Colección de datos.

El modelo de partículas requiere de dos tipos de datos: los correspondientes a las emisiones de contaminantes de las fuentes puntuales y la información meteorológica de la región de estudio; para el primer tipo de datos se requiere para cada una de las chimeneas:

- Localización de la fuente de emisión.
- Razón de emisión del contaminante.
- Altura de la chimenea.
- Diámetro de la chimenea.
- Velocidad de salida de los gases.
- Temperatura de salida de los gases.

La información considerada en el presente trabajo para el primer conjunto de datos proviene de la refinería de Tula, las emisiones pertenecen al **dioxido de azufre**, dicha información se presenta en la **tabla 3.6**, se debe mencionar que la refinería se encuentra en los 20°02'34" latitud norte y los 99°16'30" longitud oeste.

Orden	Nombre	Coeficiente	Latitud (N)	Longitud (O)	Altura (m)	Diámetro (m)	Velocidad (m/s)	Temperatura (°C)
1	BA-301	0.001	20° 02' 24" (471.955)	99° 16' 06" (2215.830)	36	4.39	1.8	563
2	BA-302	0.024	20° 02' 26" (471.955)	99° 16' 06" (2215.891)	36	4.39	1.8	578
3	BA-303	0.398	20° 02' 23" (471.955)	99° 16' 06" (2215.799)	36	4.1	1.8	608
4	BA-304	0.001	20° 02' 21" (471.934)	99° 16' 06" (2215.738)	36	6.89	1.8	648
5	BA-305	0.010	20° 02' 18" (471.934)	99° 16' 06" (2215.645)	36	7.62	1.8	583
6	BA-306	0.019	20° 02' 22" (471.934)	99° 16' 06" (2215.768)	36	4.17	1.8	583
7	BA-307	0.016	20° 02' 19" (471.876)	99° 16' 08" (2215.676)	36	12.34	1.8	573
8	BA-308	0.101	20° 02' 21" (471.876)	99° 16' 08" (2215.738)	23.1	10.7	2.6	523
9	BA-309	0.041	20° 02' 21" (471.876)	99° 16' 08" (2215.738)	23.1	10.7	2.6	523
10	BA-310	175.071	20° 02' 59" (470.948)	99° 16' 40" (2216.909)	18	11.37	3.45	426.5
11	BA-311	184.670	20° 02' 57" (470.948)	99° 16' 40" (2216.845)	18	10.44	3.45	419.36
12	BA-312	159.431	20° 02' 56" (470.948)	99° 16' 40" (2216.815)	18	10.52	3.45	426.43
13	BA-313	135.690	20° 02' 55" (470.948)	99° 16' 40" (2216.784)	25	8.92	3.45	427.19
14	BA-314	88.966	20° 02' 59" (470.948)	99° 16' 40" (2216.907)	30	11.13	4	508.87
15	BA-315	0.000	20° 02' 50" (471.151)	99° 16' 33" (2216.630)	22.1	38.92	1.37	584.8
16	BA-316	0.035	20° 02' 50" (471.151)	99° 16' 33" (2216.630)	21.2	25.5	1.7	607.8
17	BA-317	0.001	20° 02' 49" (471.151)	99° 16' 33" (2216.599)	25.7	40.4	1.83	673.9
18	BA-318	0.011	20° 02' 48" (471.151)	99° 16' 33" (2216.568)	8.7	25.65	1.37	529.5
19	BA-301 DTE	0.066	20° 02' 49" (471.151)	99° 16' 37" (2216.599)	31.9	44.8	3.3	692.7
20	BA-301 PTE	0.079	20° 02' 49" (471.035)	99° 16' 37" (2216.599)	31.9	44.8	3.3	692.7
21	BA-302	1.062	20° 02' 56" (470.774)	99° 16' 46" (2216.815)	43	35.8	1.98	546
22	BA-303	2.381	20° 02' 54" (470.774)	99° 16' 46" (2216.754)	43	35.8	1.98	546
23	BA-101B	32.708	20° 02' 50" (471.151)	99° 16' 33" (2216.630)	34.2	4.82	2.75	570.33
24	ABA-1	117.758	20° 02' 51" (470.745)	99° 16' 47" (2216.661)	36.5	10.1	3.2	443
25	ABA-2	143.833	20° 02' 51" (470.745)	99° 16' 47" (2216.661)	36.5	10.1	3.2	443
26	VBA-1	108.789	20° 02' 49" (470.744)	99° 16' 47" (2216.661)	36.5	12.12	3.13	443.62
27	VBA-2	103.589	20° 02' 49" (470.744)	99° 16' 47" (2216.660)	36.5	12.12	3.13	443.62
28	BA-101A	39.881	20° 02' 49" (471.151)	99° 16' 33" (2216.599)	34.2	4.8	2.75	729
29	BA-301	33.074	20° 02' 57" (470.513)	99° 16' 55" (2216.846)	43	35.8	1.98	546
30	3D	4.017	20° 02' 56" (471.210)	99° 16' 31" (2216.814)	43	35.8	1.98	546
31	ABA-01	0.016	20° 02' 48" (471.500)	99° 16' 21" (2216.568)	36	12.34	1.8	573
32	BA-4001	0.020	20° 02' 12" (471.890)	99° 16' 11" (2215.461)	36	4.39	1.8	578
33	BA-4101	3.254	20° 02' 10" (471.789)	99° 16' 11" (2215.400)	36	12.34	1.8	573

Tabla 3.6 Información de emisiones de dioxido de azufre provenientes de las chimeneas de la refinería de Tula.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

En cuanto a las variables meteorológicas requeridas por el modelo se utilizaron datos obtenidos de una campaña realizada por el Instituto de Investigaciones Eléctricas, el sitio se ubica en los 19°27'38" latitud norte y los 99°00'15" longitud oeste.

En cuanto a la información meteorológica se necesitan los valores de las siguientes variables:

- **Velocidad del viento.**
- **Radiación solar y fluctuación del viento en la vertical.**
- **Tipo de estabilidad.**

Estas tres características se explican de manera conjunta debido a que las dos primeras definen a la tercera, la metodología aplicada para definir el tipo de estabilidad se explica más adelante.

- **Dirección del viento.**

Esta variable sirve para determinar cual es la dirección que siguen las nubes de contaminantes.

- **Temperatura ambiente.**

Junto con la temperatura de salida de los gases, sirve para estimar la elevación de la pluma antes de que ésta se disperse en una cierta dirección.

- **Altura de la capa de mezcla.**

Esta variable representa la altura o el grosor de la capa donde se presentan movimientos convectivos, su altura se obtiene mediante modelos meteorológicos que utilizan formulaciones semiempíricas; o bien con la elaboración de termodiagramas, los cuales consisten en graficar la temperatura potencial con la altura, cuando las gráficas muestran un aumento de la temperatura conforme se incrementa la altura, es decir cuando se presenta una inversión térmica, entonces se observa el valor correspondiente a la altura, el cual es el valor de la altura de la capa de mezcla.

- **Velocidad de fricción (u_*).**

Esta variable refleja la influencia de los esfuerzos cortantes que producen turbulencia mecánica.

- **Longitud de Monin-Obukhov(L).**

Es proporcional a la altura en la cual la turbulencia térmica predomina sobre la mecánica, es importante para la estimación de parámetros de desviación del viento y autocorrelación Lagrangiana en el caso de condiciones inestables. Esta variable tiene un valor negativo para condiciones inestables y un valor positivo en caso contrario.

- **Longitud de rugosidad (z_0).**

Esta medida expresa la rugosidad de la superficie, la cual influye en la velocidad y dirección del viento, a mayor índice de rugosidad más se retarda la velocidad del viento en la vertical.

- **La escala de velocidad (w_*).**

Esta variable es importante en el caso de condiciones inestables para la estimación de parámetros, pues para la obtención de su valor mediante modelos meteorológicos toma en cuenta el flujo de calor de la superficie, lo cual determina la flotación de parcelas de aire que provocan turbulencia térmica.

- **Parámetro de Coriolis.**

Este parámetro es importante en el caso de la atmósfera neutra, pues al ser una atmósfera en equilibrio, la rotación de la tierra tendrá una influencia muy importante en el movimiento de las masas de aire.

La información meteorológica más cercana que se pudo obtener pertenece al sitio geográfico ubicado en los 19°27'38" latitud norte y los 99°00'15" longitud oeste.

Información meteorológica y micrometeorológica obtenida en la campaña de monitoreo realizada por el Instituto de Investigaciones Eléctricas.

Desafortunadamente en México las estaciones de monitoreo únicamente proporcionan información meteorológica media, debido al alto costo que implica medir las variables micrometeorológicas que caracterizan la turbulencia atmosférica.

El Instituto de Investigaciones Eléctricas (IIE), con el objeto de construir una base de datos con información micrometeorológica, realizó una campaña de monitoreo durante los meses de junio a agosto de 1994 de variables meteorológicas que permiten hacer una estimación de parámetros micrometeorológicos, por otro lado también se realizó una campaña de *radiosondeos* que permitió estimar alturas de capa de mezcla promedio para el verano de 1994.

La información proporcionada por el IIE pertenece a la estación instalada en el lugar ubicado en los 19°27'38" latitud norte y los 99°00'15" longitud oeste, cabe señalar que debido a fallas de suministro de energía y del equipo de monitoreo se perdieron los datos del mes de agosto, además en algunos días de los otros meses no se cuenta con todas las variables que requiere el modelo, los archivos finales proporcionados por el IIE tienen la estructura listada en la **tabla 3.7**.

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

Campo	Descripción	Unidades
1	Sigla de la Estación	-----
2	Año	-----
3	Día Juliano	-----
4	Hora	-----
5	Minutos	-----
6	Reservado	-----
7	Humedad Relativa	%
8	Temperatura del Aire	°C
9	Radiación Global	W/m ²
10	Radiación Neta	W/m ²
11	Presión	hPa
12	Velocidad del viento (Gill)	m/s
13	Dirección del viento (Gill)	°N
14	σ_U (Gill)	m/s
15	σ_V (Gill)	m/s
16	σ_W (Gill)	m/s
17	Velocidad de fricción (Gill)	m/s
18	Velocidad del viento (sónico)	m/s
19	Dirección del viento (sónico)	°N
20	σ_U (sónico)	m/s
21	σ_V (sónico)	m/s
22	σ_W (sónico)	m/s
23	Velocidad de fricción (sónico)	m/s
24	z/L	-----
25	Temperatura de escala (sónico)	°K
26	σ_T (sónico)	°K
27	Flujo Turbulento de Calor (sónico)	W/m ²

Tabla 3.7 Campos de los archivos obtenidos durante la campaña junio-agosto de 1994

Los sensores con los cuales se midieron las variables anteriores se pueden dividir en dos categorías:

- El sistema convencional constituido por un barómetro, un termohigrómetro, un radiómetro global, un radiómetro neto y un anemómetro Gill. Las señales obtenidas por dichos sensores fueron enviados a un sistema de adquisición de datos (CR10), el cual promediaba sobre un periodo de diez minutos las variables meteorológicas (a excepción de la velocidad del viento), este a su vez estaba conectado a una computadora personal en la cual estuvo

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

corriendo permanentemente un programa llamado DATAC, encargado de compactar y transferir los archivos de los datos adquiridos por el CR10 al disco duro.

- ☛ El sistema ultrasónico, que permitió la medición de las componentes del viento y la temperatura (USAT3 de METEK), el sistema está dotado de un sistema integrado de adquisición y elaboración de datos.

Durante el proceso de adquisición de datos, estos fueron sometidos a un control de calidad, los resultados obtenidos fueron:

- No se encontraron anomalías en los valores de la velocidad del viento, la temperatura, la presión y la humedad.
- En cuanto a la radiación solar neta no se encontraron anomalías, para el caso de la radiación global se registró un valor muy pequeño (del orden de 1 W/m^2) durante las horas nocturnas, lo cual se presenta normalmente y no constituye un problema desde el punto de vista práctico; sin embargo cabe mencionarlo ya que teóricamente la radiación global debería de ser nula durante la noche.
- Como en todas las campañas de monitoreo de flujos turbulentos se presentó que en algunos casos el cuadrado de la velocidad de fricción mostró valores negativos, en cuyo caso se registraron como datos no disponibles.

Se debe señalar que los datos se modificaron de la siguiente manera para adaptarlos a los requerimientos del modelo de partículas.

- Se transformo el día juliano para proporcionar la fecha del calendario gregoriano.
- Se realizaron promedios horarios para cada variable meteorológica.
- Se expreso la temperatura en grados Kelvin, debido a que los datos se reportan en grados centígrados.
- La longitud de Monin-Obukhov se obtiene de multiplicar $10^*(z/L)^{-1}$, considerando que z es la altura a la cual se miden los datos, en este caso 10 metros.
- Se hizo uso del método **SRDT (Radiación solar/ delta-T)** para obtener el tipo de estabilidad durante las **horas diurnas**, los datos utilizados para tal fin fueron los correspondientes a la radiación global y la velocidad del viento, el método consiste en determinar el tipo de estabilidad de acuerdo a la clasificación presentada en la **tabla 3.8**, los tipos de estabilidad son: **A**, extremadamente inestable; **B**, moderadamente inestable; **C**, levemente inestable; **D**, neutra; **E**, levemente estable y **F**, moderadamente estable.

Velocidad del viento (m/s)	Día Radiación solar (W/m ²)			
	0-25	25-675	675-175	>175
2	A	A	B	D
3	A	B	C	D
4	B	B	C	D
5	C	C	D	D
6	C	D	D	D

Velocidad del viento (m/s)	Noche Gradiente vertical de temperatura	
	>0	>0
2	E	F
3	D	E
4	D	D

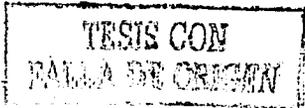
Tabla 3.8 Clave de las categorías de estabilidad según el método SDRT.

Como no se contaba con información de los perfiles verticales de temperatura para todos los días, se utilizó un método alternativo conocido como **Sigma-E**, para determinar el tipo de estabilidad de las horas nocturnas.

Este método consiste en hacer una primera estimación de la estabilidad de acuerdo a la siguiente tabla de clasificación:

Categoría de estabilidad estimada	Desviación estándar de la dispersión angular del viento
A	$11.5 \leq \sigma_{\phi}$
B	$10.0 \leq \sigma_{\phi} < 11.5$
C	$7.8 \leq \sigma_{\phi} < 10.0$
D	$5.0 \leq \sigma_{\phi} < 7.8$
E	$2.4 \leq \sigma_{\phi} < 5.0$
F	$\sigma_{\phi} < 2.4$

donde:



$$\sigma_s = \frac{\sigma_w}{\bar{u}}$$

Una vez que se obtiene una primera estimación del tipo de estabilidad, se hace un ajuste de ésta de acuerdo a la velocidad del viento, la tabla utilizada es:

Categoría de estabilidad según el método de primera etapa	Categoría de estabilidad según el método de segunda etapa	Categoría de estabilidad según el método de tercera etapa
A	----	D
B	----	D
C	----	D
D	----	D
E	<5	E
E	5 ≤ u	E
F	u < 3	F
F	3 ≤ u < 5	E
F	5 ≤ u	D

Por otro lado, es importante señalar que los datos que se consideraron fueron los obtenidos mediante un sistema ultrasónico, pues estos tiene la capacidad de medir fluctuaciones rápidas de ciertas variables.

Para estimar las alturas de mezcla se requiere el conocimiento del comportamiento vertical de ciertas variables meteorológicas, lo anterior se obtiene a partir del lanzamiento de globos sonda estos emiten la información necesaria a diferentes alturas y durante intervalos de tiempo determinados, los cuales son captados por equipos especiales llamados receptores, el proceso anterior se conoce como **radiosondeos** y resultan demasiado caros de realizar en comparación con las mediciones realizadas en superficie.

El IIE efectuó también una campaña de radiosondeos, los cuales se realizaron tres veces al día, la información recabada permitió la estimación de alturas de mezcla promedio características del verano de 1994, en el lugar de estudio.

Los archivos originales contienen los siguientes campos:

Código	VARIABLE	Unidades
1	Tiempo	s
2	Altura	m
3	Temperatura de bulbo seco	°K
4	Temperatura de bulbo húmedo	°K
5	Temperatura virtual	°K
6	Temperatura potencial virtual	°K
7	Presión atmosférica	hPa
8	Humedad relativa	%
9	Velocidad del viento	m/s
10	Dirección del viento	°N

Tabla 3.9. Estructura de los archivos obtenidos durante los radiosondeos.

La siguiente tabla muestra la información final con la que se cuenta y que es utilizada por el modelo.

Latitud: 19°27'38" N Longitud Oeste: 99°00'15"	
	Unidades
Año	
Mo	
Día	
Hora	
Dirección del viento	grados
Velocidad del viento	metros/segundo
Temperatura de bulbo seco	grados Kelvin
Temperatura de bulbo húmedo	
Temperatura potencial virtual	metros
Velocidad del viento	metros/segundo
Longitud del punto observado	metros
Longitud del punto del modelo	metros
σ_u	metros/segundo
σ_v	metros/segundo
σ_w	metros/segundo

Tabla 3.10 Descripción del archivo de datos meteorológicos.

Finalmente la principal ventaja de la información proporcionada por el IIE, es que no es necesario utilizar formulaciones semiempíricas para las desviaciones de la fluctuación del viento en cada uno de los ejes.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

3.2.4 Implementación del modelo en la computadora.

La mayoría de los modelos ambientales de calidad del aire se encuentran desarrollados en FORTRAN, probablemente porque este fue el primer lenguaje con un enfoque científico y que por lo tanto era el que más a la mano tenían los pioneros en el desarrollo de modelos ambientales.

En la actualidad el uso del FORTRAN sigue siendo extendido entre las personas encargadas de implementar los modelos de calidad del aire; sin embargo, algunos de estos se han emigrado a sistemas de ventanas como Xwindow, para proporcionar a los usuarios salidas visuales atractivas y amigables.

Por otro lado el avance en la tecnología computacional ha permitido que modelos que antes únicamente podían ser ejecutados en sistemas con amplios recursos, ahora sea posible utilizarlos en microcomputadoras.

En el caso del modelo lagrangiano de partículas su ejecución depende mucho de la capacidad de computo del sistema bajo el cual se ejecute, pues la cantidad de memoria requerida está en función del número de fuentes que se encuentran emitiendo partículas.

Para implementar el modelo en computadora, al cual llamaremos **LAGDIS** (Modelo LAGrangiano de DISPersión atmosférica), se utiliza el lenguaje de propósito general C++, debido a la rapidez con que ejecuta las operaciones requeridas, pues se hubiera podido implantar el programa en un lenguaje más amigable como Visual Basic, sin embargo este último presenta problemas de velocidad en cuanto a la ejecución de las rutinas utilizadas en el modelo, no obstante es más robusto que C++ en el manejo de bases de datos, sin embargo esta última deficiencia se puede subsanar en C++ utilizando las herramientas OLE que permite vincular e incrustar objetos de otras aplicaciones tales como excel, además se puede hacer uso de las librerías OWL (Objets Windows) con las que cuenta para desarrollarlo en un ambiente Windows 95.

Se codifican los algoritmos presentados en los diagramas de flujo 3.1 a 3.7 haciendo uso de las librerías OWL para el manejo de las ventanas, el sistema se puede ejecutar en Windows 95.

A continuación se hace una descripción de la utilización del programa.

3.2.4.1 Manual del usuario para el modelo LAGDIS (Modelo LAGrangiano de DISPersión atmosférica)

El programa **LAGDIS** (Modelo LAGrangiano de DISPersión atmosférica), fue desarrollado para ejecutarse en un ambiente Windows 95, por lo que se debe contar con dicho sistema operativo para su utilización.

Instalación del programa LAGDIS.

Use el disco membretado con la leyenda **Instalación de LAGDIS** y seleccione la unidad de disco correspondiente, entonces haga doble clic sobre el icono **Instalación (figura 3.8-a)**, primero aparece un mensaje de derechos de autor haga clic sobre el botón aceptar y verá como aparece la ventana de instalación (**figura 3.9-a**), en principio se instala el programa en el subdirectorío C:\LAGDIS, pero se puede cambiar este si se desea, para finalizar la instalación elija el botón , si el programa se instaló correctamente aparece el mensaje de la **figura 3.9-b**

Ejecución del programa LAGDIS.

Como primer paso para ejecutar el modelo LAGDIS haga doble clic sobre el icono con nombre LAGDIS, en el subdirectorío seleccionado durante la instalación.

Como se puede observar en la **figura 3.10** el programa consta de las siguientes opciones: captura de datos meteorológicos, consulta de datos meteorológicos, un módulo para introducir los datos generales para realizar la simulación y despliegado de los archivos LAG creados durante la ejecución de la simulación.

Captura de datos meteorológicos.

La opción de captura de datos meteorológicos permite al usuario introducir información meteorológica para ser utilizada durante la ejecución de la simulación, en el momento de elegir esta acción se presenta la ventana de la **figura 3.11**, en la cual se solicita al usuario información sobre la fecha y hora a la cual pertenece la información, además de la clave WBAN de la estación en donde se realizaron las mediciones.

Para la ejecución del modelo se deben proporcionar los siguientes datos de superficie: velocidad del viento, tomando en cuenta unidades de metros por segundo; la dirección del viento, cuyo valor oscila dentro de un rango de cero a 360 grados y la temperatura, que nunca tendrá un valor negativo pues sus unidades se solicitan en grados Kelvin.

Por otro lado el usuario debe ingresar la información correspondiente a alturas de mezclado (en metros), además de datos micrometeorológicos correspondientes a: la velocidad de fricción, la longitud de Monin-Obukhov (metros) y la longitud de rugosidad; también se debe proporcionar el tipo de estabilidad en un rango de 1-7, el valor de las desviaciones estándar del viento para cada uno de los ejes es optativa; pues el programa cuenta con una rutina que estima dichos parámetros en base a los anteriores valores micrometeorológicos.

Para dar de alta el registro hacer clic en el botón

Consulta y modificación de datos meteorológicos.

Al elegir esta opción el programa despliega la ventana de la **figura 3.12**, los datos necesarios para consultar un conjunto de información meteorológica son la fecha, hora y clave WBAN de la estación de la cual se quiere conocer los parámetros meteorológicos.

Si la información se encuentra dentro de la base de datos se despliega el valor de los datos meteorológicos consultados, en caso contrario aparece un mensaje informándole al usuario que no se encuentran los datos correspondientes a la clave capturada.

En la **figura 3.13** se muestra el resultado de la consulta del día 23 de junio de 1994 a las 12 horas, con clave WBAN cero; los datos desplegados se pueden modificar de la misma manera explicada para dar de alta un conjunto de información.

Entrada de datos para realizar la simulación.

En esta opción el usuario debe dar los datos con los cuales desea que se ejecute la simulación, en la **figura 3.14** se muestra la ventana correspondiente a ésta acción.

En primer lugar se introduce la latitud en grados, minutos y segundos de la región de estudio, después se proporciona la clave correspondiente a la información meteorológica que se quiere tomar en cuenta para la simulación.

Se fija la altura de los receptores (en metros) y la altura a la cual se realizaron las mediciones de los parámetros meteorológicos; además se elige el tipo de suelo de la región de estudio, para ello se hace clic en el botón  y se escoge la opción que más se ajuste al tipo de suelo del lugar.

También se debe seleccionar el nombre del archivo de salida, el cual contendrá la información considerada para la ejecución de la simulación, así como los resultados de las concentraciones estimadas para los receptores definidos.

Otro de los nombres de los archivos que es necesario introducir es el de receptores, estos archivos deben tener formato Dbase III, con la siguiente estructura:

Nombre del campo	Tipo	Descripción
DIST	Flotante	Distancia del centro del eje cartesiano en metros
TOTAL	Entero	Total de receptores
GRADOI	Flotante	Grado inicial
DGRADO	Flotante	Número de grados a incrementar

Por ejemplo si se tiene la siguiente información para el archivo de receptores.

Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

DIST	TOTAL	GRADOI	DGRADO
1000	36	0	10

Significa que se definen 36 receptores ubicados uno cada 10 grados en forma de círculo, empezando por el grado cero y con un radio de 1000 metros del centro del plano cartesiano. El programa en realidad convierte la ubicación de los receptores transformando las posiciones de coordenadas polares a rectangulares.

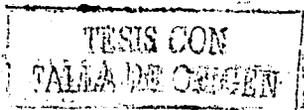
Como se puede ver en la **figura 3.15** el programa permite elegir el archivo de receptores en formato Dbase III, en caso de que el archivo proporcionado no tenga la estructura señalada arriba, se despliega un mensaje de error, de otra forma aparece una ventana (**figura 3.16**) en la cual el usuario puede ver la información del archivo de receptores elegido.

Otro nombre de archivo en formato Dbase III a proporcionar, es el de las fuentes de emisión, al igual que en el caso anterior el programa permite hacer la elección de este mediante una ventana como la presentada en la **figura 3.17**, la estructura del archivo es la siguiente:

Nombre del campo	Tipo	Descripción
X	Flotante	Ubicación de la chimenea en el eje x (metros)
Y	Flotante	Ubicación de la chimenea en el eje y (metros)
Z	Flotante	Altura de la chimenea (metros)
Q	Flotante	Razón de emisión (g/sec)
VS	Flotante	Velocidad de salida de los gases (m/sec)
D	Flotante	Diámetro de la chimenea (metros)
TMP	Flotante	Temperatura de salida de los gases (grados Kelvin)

Una vez que se eligió un archivo con el formato correcto, se despliega la información correspondiente para cada chimenea (**figura 3.18**).

Para iniciar la simulación haga clic en el botón **Ejecutar simulación** de esta manera se minimiza la ventana principal y aparece otra en la cual se pide ejecutar o cancelar la acción (**figura 3.19**), si elige la ejecución de la simulación el proceso podrá tardar algunos minutos en la realización de la simulación dependiendo del número de fuentes definidas, en la ventana se irá indicando que parte del proceso se está ejecutando, finalmente aparecerá una gráfica que muestra la isopleta generada a partir de las concentraciones estimadas por el modelo (ver ejemplo de la **figura 3.20**), por otro lado los niveles de concentraciones se guardan en el archivo de salida con extensión **LAG** elegido por el usuario.



Consulta de archivos LAG.

Cuando se ejecuta una simulación la información concerniente a las opciones elegidas en la figura 3.20 se almacenan en el archivo de salida proporcionado por el usuario, el cual tiene una extensión LAG; también se guardan los valores de las concentraciones estimadas durante la simulación para su posterior consulta.

Para visualizar dicha información elija la opción **Abrir Archivos** del menú principal, entonces aparece una ventana de elección (figura 3.21-a), seleccione el nombre del archivo que desea consultar y haga clic en **Abrir** desplegándose así la información que se desea consultar (figura 3.21-b), el usuario puede hacer modificaciones al texto del archivo y guardarlo o salvarlo con otro nombre.

Para concluir el presente capítulo se aclara que la metodología aplicada en calidad del aire para evaluar los modelos de dispersión, se explica en el siguiente apartado y por otro lado las etapas de experimentación e interpretación de resultados para la toma de decisiones se excluyen del trabajo por estar fuera del objetivo propuesto.

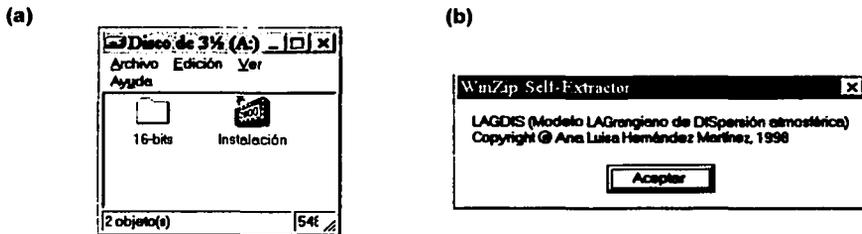


FIGURA 3.8 Ventanas donde se muestra (a) el contenido del disco de instalación y (b) el mensaje acerca del nombre del programa y derechos de autor.

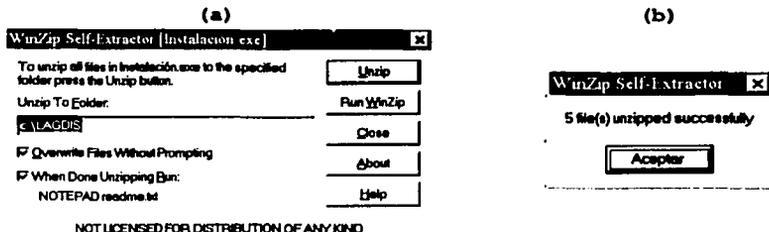
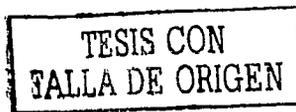


FIGURA 3.9 Figura que muestra (a) la ventana de instalación y (b) mensaje de término de la instalación.



Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

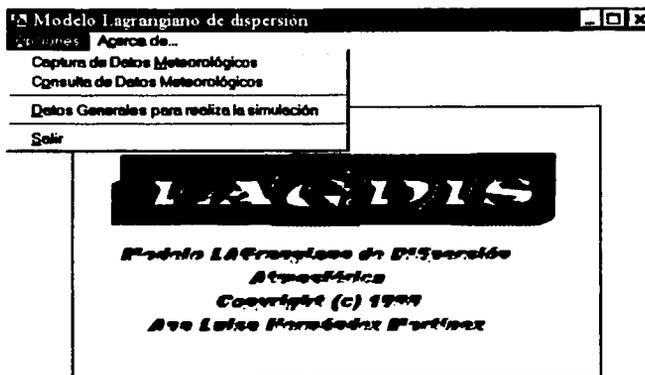


FIGURA 3.10 Ventana que muestra las opciones con las que cuenta el modelo LAGDIS.

The screenshot shows the "Captura de datos meteorológicos" window. It contains several input fields and buttons for data entry:

Captura de datos meteorológicos

Clave del registro:

Día	Mes	Año	Hora	Clave WBAN de la estación
<input type="text"/>				

Datos de Superficie

Velocidad del viento (m/s)

Dirección del viento (grados)

Temperatura (grados Kelvin)

Datos de capa de mezcla y micrometeorológicos

Altura de la capa de mezcla (metros)	Desviación estándar del viento
<input type="text"/>	<input type="text"/>
Zona Rural <input type="text"/>	Zona Urbana <input type="text"/>
Velocidad de fricción (m/s) <input type="text"/>	Sigma u <input type="text"/> Sigma v <input type="text"/> Sigma w <input type="text"/>
	Estabilidad (1-7) <input type="text"/>
Parámetro de Monin-Obukhov (metros) <input type="text"/>	
Longitud de rugosidad (metros) <input type="text"/>	

FIGURA 3.11 Ventana correspondiente a la captura de datos meteorológicos necesarios para ejecutar el modelo de dispersión.

Consulta de información meteorológica 7 x

Clave del Registro			
Año	Mes	Día	Hora
1994	6	23	12
Clave WBAN de la estación		0	

FIGURA 3.12 Ventana que solicita la información para consultar un conjunto de información meteorológica.

Captura de datos meteorológicos x

Clave del registro				
Día	Mes	Año	Hora	Clave WBAN de la estación
23	6	1994	12	0

Datos de Superficie		Modificar o Agregar
Velocidad del viento (m/s)	2.466	<input type="button" value="Cancelar"/>
Dirección del viento (grados)	93.533	
Temperatura (grados Kelvin)	295.850	

Datos de capa de mezcla y micrometeorológicos					
Altura de la capa de mezcla (metros)		Desviación estándar del viento			
1523.800	1523.800	0.880	0.827	0.349	
Zona Rural	Zona Urbana	Sigma u	Sigma v	Sigma w	
Velocidad de fricción (m/s)		0.275	Estabilidad (1-7)		2
Parámetro de Monin-Obukhov (metros)		-9.779			
Longitud de rugosidad (metros)		0.100			

FIGURA 3.13 Ventana que despliega y permite modificar la información de parámetros meteorológicos correspondientes a una clave determinada.



Diseño e implementación del algoritmo del modelo markoviano de dispersión

Entrada de Datos Para Realizar la Simulación

Latitud Grados Minutos Segundos <input type="text" value="37"/> <input type="text" value="39"/> <input type="text" value="0"/>			Día de Simulación Año Mes Día Hora Clave WBAN <input type="text" value="1988"/> <input type="text" value="1"/> <input type="text" value="1"/> <input type="text" value="1"/> <input type="text" value="3928"/>				
Otros Altura de Receptores (metros): <input type="text" value="0"/> Altura a la cual se realizan las mediciones (metros): <input type="text" value="10"/> Tipo de suelo: <input type="text" value="Zonas con vegetación"/>				Tipo de zona <input type="radio"/> Rural <input type="radio"/> Urbana <input type="button" value="Ejecutar simulación"/>			
Nombre del archivo de salida <input type="text" value="salida"/>				<input type="button" value="Cancelar"/>			
Archivo de Datos de Receptores <input type="text" value="F:\pc\analuisa\programa\wich\receptor.dbf"/> <input type="button" value="Buscar"/>							
Archivo de Datos de Fuentes de Emisión <input type="text" value="F:\pc\analuisa\programa\wich\fuente.dbf"/> <input type="button" value="Buscar"/>							

FIGURA 3.14 Ventana que permite elegir las características de la simulación.

Abrir Archivo de Datos de Receptores

Buscar en:

<ul style="list-style-type: none"> <input type="checkbox"/> datos <input type="checkbox"/> dbf <input type="checkbox"/> otros <input type="checkbox"/> texcoco <input type="checkbox"/> tula <input checked="" type="checkbox"/> tula.dbf <input checked="" type="checkbox"/> fuentes.dbf <input type="checkbox"/> rec.dbf 	<ul style="list-style-type: none"> <input type="checkbox"/> rec_wich.dbf <input type="checkbox"/> rec2.dbf <input type="checkbox"/> rec3.dbf <input checked="" type="checkbox"/> receptor.dbf <input type="checkbox"/> stack.dbf <input type="checkbox"/> stack1.dbf <input type="checkbox"/> wichone.dbf
--	--

Nombre de archivo:

Archivos de tipo:

FIGURA 3.15 Ventana de elección del archivo de receptores

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

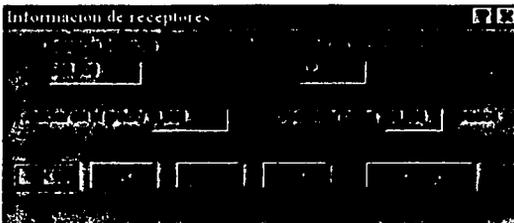


FIGURA 3.16 Ventana de visualización de la información contenida en el archivo de receptores.

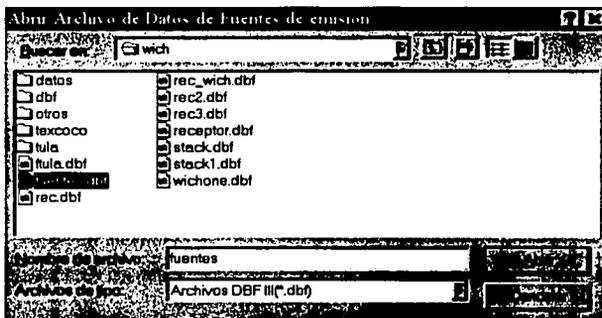


FIGURA 3.17 Ventana de elección del archivo que contiene la información de las fuentes de emisión.

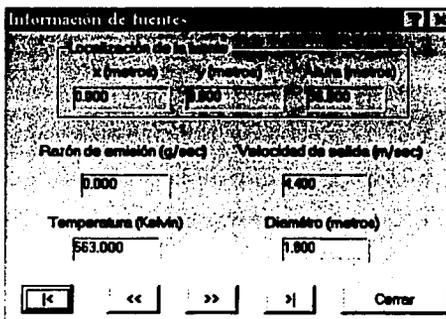


FIGURA 3.18 Ventana de visualización de la información contenida en el archivo de emisiones.

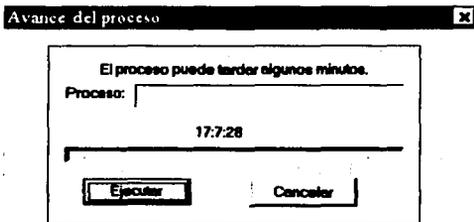


FIGURA 3.19. Ventana de confirmación de ejecución de la simulación.

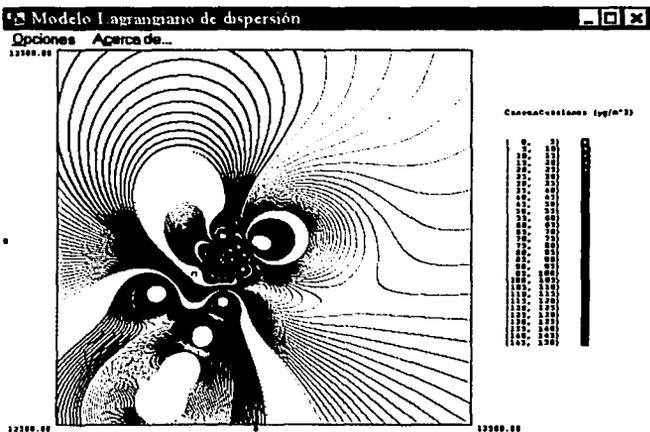
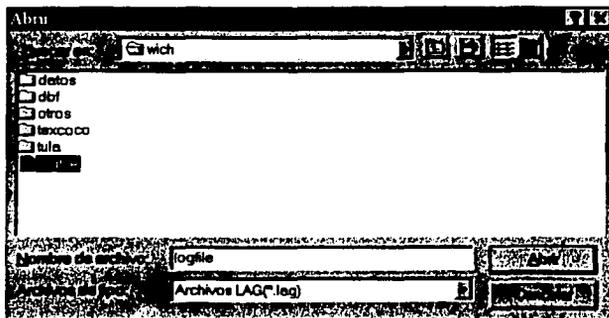


FIGURA 3.20. Ventana que muestra una isopleta generada mediante las concentraciones estimadas por LAGDIS.

TESIS CON
TALLA DE ORIGEN

(a)



(b)

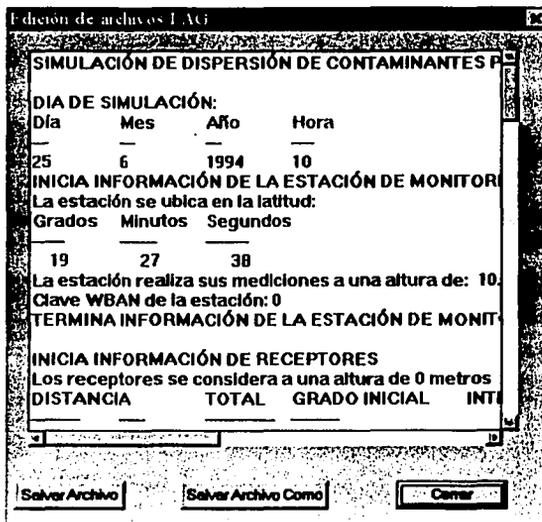


FIGURA 3.21 Ventanas que muestran: (a) elección de un archivo LAG y (b) desplegado de un archivo LAG donde se puede consultar la información de la concerniente a la ejecución de una simulación.

Bibliografía

- ⊗ Coss Bu, Raúl (1994): *Simulación un enfoque práctico*. Editorial LIMUSA, México.
- ⊗ González Videgaray, María del Carmen. *Modelos y Simulación*, México.
- ⊗ Gordon, Geoffrey (1991): *Simulación de sistemas*. Editorial DIANA, México.
- ⊗ Instituto de Investigaciones Eléctricas (1994): *Estudio Micrometeorológico del Valle de México del Departamento de Sistemas de Combustión (IIE/10/14/10039/102/F)*, Cuernavaca, México.
- ⊗ Office of Air and Radiation (1987): *On-Site Meteorological Program Guidance For Regulatory Modeling Applications*. EPA, U.S.A.
- ⊗ Yamada, T., y S. S. Bunker (1988): *Development of a nested grid, second moment turbulence closure model and application to the 1982 ASCOT Brush Creek data simulation*. J. Appl. Meteor., 27:562-578.

CAPÍTULO IV

Comparación de resultados obtenidos mediante el modelo gaussiano y el modelo markoviano

SINOPSIS

La etapa de **evaluación del modelo** perteneciente a la construcción de un modelo de simulación, aunque importante, en la mayoría de las ocasiones no se le presta la atención debida. En calidad del aire este proceso consta de dos etapas: en la primera se hace una **evaluación cualitativa espacial y temporal**, para la verificación espacial se elaboran las isopletras a partir de datos obtenidos del modelo real y aquellos provenientes de la ejecución de la simulación observando que los puntos de máxima concentración coincidan; la evaluación cualitativa temporal se realiza graficando las series de tiempo de las concentraciones en un punto para las diferentes horas tanto para los valores simulados como para los observados, se verifica que los máximos se presenten en tiempos aproximados. En la segunda etapa de evaluación se hace un **análisis cuantitativo** entre los datos observados y pronosticados para determinar el grado de exactitud de los pronósticos del modelo, con este fin se utilizan técnicas estadísticas.

Los datos requeridos para efectuar la evaluación del modelo son en primer lugar los datos relativos a las emisiones de chimeneas, para los cuales se utilizó la de un complejo industrial en Tula, Hidalgo, ubicado en los 20°02'34" latitud norte y 99°16'30" longitud oeste; la información meteorológica media utilizada es la obtenida en una campaña de monitoreo realizada por el Instituto Mexicano del Petróleo durante los últimos días de mayo y los primeros días de junio de 1994 en puntos cercanos al complejo industrial, por otro lado, la información micrometeorológica utilizada es la recabada por el Instituto de Investigaciones Eléctricas en una campaña efectuada durante los meses de junio a agosto de 1994.

En el caso de la verificación de un modelo de calidad del aire, además de los datos requeridos para la ejecución de la simulación, es indispensable contar con datos de concentraciones reales para evaluar la exactitud de los pronósticos que realiza el modelo y determinar que tan confiable es, en el caso presente se utilizaron los datos registrados de las *inmisiones*^{4.1} de dióxido de azufre obtenidos en la campaña realizada

^{4.1} El término inmisiones se utiliza en calidad del aire para señalar la presencia de contaminantes en la atmósfera a nivel del piso.

por el Instituto Mexicano de Petróleo en diferentes puntos distribuidos en la periferia del complejo industrial, se eligieron los datos de dióxido de azufre en la verificación del modelo debido a que era el único contaminante con las características adecuadas para las cuales se diseñó el modelo (contaminante poco reactivo).

No se realizó la evaluación cualitativa espacial del modelo puesto que únicamente se tenían datos para un punto de monitoreo y el algoritmo utilizado para la elaboración de isopletas requiere de tres puntos mínimo, esta carencia se debió a que no se midió en forma simultánea la variable de interés en cada uno de los lugares de monitoreo, pues el equipo de medición de los niveles de concentración de dióxido de azufre se estuvo rotando por día para obtener muestras en los diferentes sitios del complejo industrial.

En la evaluación cualitativa temporal se obtuvieron los máximos de concentración de los datos reales a las 10 horas, en tanto los valores simulados presentaron el máximo a las 9 horas, por lo que se puede decir que el modelo predice en forma bastante aproximada los máximos, en cuanto a los mínimos registrados la diferencia es de únicamente dos horas, ya que el mínimo real se presenta a las 18 horas, en tanto el modelo lo predice a las 16 horas.

Para la evaluación cuantitativa se consideraron los siguientes estadísticos: raíz de la media del cuadrado del error (RMCE), raíz de la media del cuadrado del error corregido (RMCEC), coeficiente de correlación, desviación estándar de los valores observados y simulados, además de la pendiente y la intersección al eje y en un ajuste a la línea de regresión.

Si bien el coeficiente de correlación obtuvo un valor bastante alto (0.723) como para afirmar que el modelo realiza buenos pronósticos y se cumplió la condición de igualdad entre el RMCE y el RMCEC para pronósticos perfectos, algunos de los criterios establecidos no fueron lo suficientemente satisfactorios para apoyar la confiabilidad de los valores simulados obtenidos por el modelo, sin embargo probablemente esto no se deba al diseño conceptual del modelo, sino a la falta de información en el inventario de emisiones.

Una vez que se ha evaluado el modelo para un lapso de tiempo corto, es necesario validarlo para un periodo de tiempo más largo.

Por otro lado, se compararon los resultados arrojados por el modelo diseñado en el presente trabajo, con un modelo gaussiano aprobado por la Environmental Protection Agency de los Estados Unidos (EPA), llamado INPUFF (Gaussian Integrated PUFF model), es importante señalar que lo anterior se hace con la finalidad de ilustrar la manera en que se realizaría la validación en caso de contar con un mayor número de datos concernientes a la información de concentraciones en zonas cercanas a la refinería de Tula de algún contaminante poco reactivo, no obstante se debe recalcar que el modelo INPUFF ha sido validado y aprobado por la EPA para su uso.

4.1 Evaluación del modelo

Los modelos de calidad del aire, como se ha mencionado anteriormente son útiles para pronosticar situaciones sin necesidad de experimentar con el sistema real, el uso de un modelo cuyos pronósticos sean pobres puede llevar a pérdidas económicas; o bien, en el caso de que se utilice para tomar decisiones en base a los resultados arrojados por este, puede traer como consecuencia daños al medio ambiente y la aplicación de políticas ambientales incorrectas.

Es por ello indispensable que los modelos utilizados como una herramienta en la toma de decisiones se validen, en calidad del aire este proceso consta de dos etapas: en la primera etapa se hace una evaluación **cuantitativa** del modelo; en la segunda etapa se hace un análisis **cuantitativo** entre los datos observados y pronosticados para determinar el grado de exactitud de los pronósticos del modelo, para ello se utilizan ciertos estadísticos.

La primera etapa consiste básicamente en determinar si existe correlación espacial y temporal entre los datos observados y los pronosticados, para probar la correlación espacial se elaboran las isopletas correspondientes a cada conjunto de datos y se checa que los centros de máxima concentración coincidan; la correlación temporal se determina graficando las series de tiempo respectivas y comparando los picos máximos de concentración, si estos coinciden para ambas series de tiempo se dice que existe una correlación temporal correcta.

En la mesa redonda sobre modelos de dispersión realizada por la American Meteorological Society en 1980-1981, se discutió el uso de ciertos estadísticos para la segunda etapa de validación, entre los estadísticos propuestos están: el error cuadrático medio, coeficiente de correlación, diferencia entre la concentración máxima observada y pronosticada, entre otros.

A continuación se definen una serie de estadísticos utilizados en la evaluación de modelos de dispersión, cabe hacer notar que estos son válidos cuando los valores observados y los pronosticados forman pareja, es decir, tienen una correspondencia espacial y temporal, cuando ello no ocurre se recomienda utilizar las prueba Chi-cuadrada o Kolmogorov-Smirnov; sin embargo estas tienen la desventaja de requerir cierta cantidad de datos para aplicarse.

Así pues, considerando la diferencia de concentración:

$$\Delta C = C_o - C_p$$

donde C_o es la concentración observada y C_p es la concentración pronosticada, se definen los siguientes estadísticos.

☛ **Error cuadrático medio.**

Se utiliza para medir la separación que existe entre el valor pronosticado y el observado.

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum (C_{ip} - C_{io})^2}{N}} \quad \text{-----} \quad 4.1$$

donde C_{ip} es el valor de la concentración pronosticada para el i -ésimo punto y C_{io} , es el i -ésimo valor observado respectivamente.

☛ **Error cuadrático medio corregido.**

Mide el sesgo entre el campo real y el pronosticado.

$$RMSEC = \sqrt{\frac{\sum [(C_{ip} - \bar{C}_p) - (C_{io} - \bar{C}_o)]^2}{N}} \quad \text{-----} \quad 4.2$$

Las variables con una barra indican valores medios de los datos observados y pronosticados, en pronósticos perfectos $RMSEC = RMSE$

☛ **Desviación estándar de las observaciones y las predicciones.**

Mide la dispersión de los datos reales o pronosticados.

$$\sigma_\lambda = \sqrt{\frac{\sum (C_{i\lambda} - \bar{C}_\lambda)^2}{N}} \quad \text{-----} \quad 4.3$$

cuando $\lambda=0$ entonces se tiene la desviación estándar de los valores observados y en caso de que $\lambda=p$ se tiene la desviación estándar de los valores pronosticados, para pronósticos perfectos $\sigma_0 = \sigma_p$; además si $\frac{RMSE}{\sigma_o} < 1$ y $\frac{RMSEC}{\sigma_o} < 1$, entonces el modelo realiza un buen pronóstico.

☛ **El coeficiente de correlación r.**

Mide el grado de asociación entre dos conjuntos de datos, se define como

$$r = \frac{\sum (C_{im} - C_{ir1})(C_{ip} - C_{ip1})}{\sqrt{\sum (C_{im} - C_{ir1})^2 \cdot \sum (C_{ip} - C_{ip1})^2}} \quad \text{-----} \quad 4.4$$

donde $(C_{iro} - C_{ir})$, es el valor del cambio real del elemento durante el periodo de validez y $(C_{iro} - C_{ip})$, es el cambio pronosticado, para pronósticos perfectos $r=1$.

☛ **La línea de regresión.**

$$C_a = b_0 + b_1 C_p \quad \text{-----} \quad 4.5$$

donde b_0 es el punto donde la recta se intersecta al eje y, b_1 es la pendiente de la recta, definida como:

$$b_1 = r \frac{\sigma_c}{\sigma_p}$$

para una correlación perfecta $b_0=0$ y $b_1=1$.

4.2 Características del modelo LAGDIS (modelo LAGrangiano de DISpersión atmosférica) y descripción de la ejecución de la simulación.

El modelo LAGDIS fue diseñado con las siguientes características:

- ☛ Únicamente considera fuentes fijas de emisión.
- ☛ Se predicen niveles de concentración para contaminantes poco reactivos.
- ☛ Se considera un campo de vientos homogéneo, aunque a futuro se pueda adaptar para la utilización de un campo de vientos no homogéneo y por tanto el uso del modelo a gran escala espacial.
- ☛ Estima únicamente depositación seca.

Por otro lado, para la ejecución del modelo con información que permita su evaluación con datos reales se debe contar, como se menciono en el capítulo anterior, con el siguiente conjunto de datos:

- ☛ **Datos provenientes de chimeneas dentro de la región de estudio:** dicha información comprende la razón de emisión del contaminante de interés a la atmósfera, la ubicación y altura de la chimenea, así como su diámetro y finalmente la temperatura y velocidad de salida de los gases. Los datos con los que se ejecuto el modelo provienen de un complejo industrial ubicado en Tula, estado de Hidalgo, la información se presenta en la **tabla 3.6**.
- ☛ **Datos meteorológicos y micrometeorológicos:** los variables meteorológicas que caracterizan el comportamiento promedio de la atmósfera son, entre otras la velocidad y dirección del viento, así como temperatura, para este conjunto de variables se utilizó la información recopilada por el Instituto Mexicano del Petróleo; en cuanto a la información micrometeorológica requerida por el modelo se hizo uso de la recabada por el Instituto de Investigaciones Eléctricas en los meses de junio a agosto de 1994.

En el caso de la evaluación de un modelo de dispersión también se requieren datos de **inmisiones del contaminante de interés**, en este caso el **dióxido de azufre**, cabe señalar que se eligió este contaminante, ya que al ser poco reactivo se ajusta a las características para las cuales se diseñó el modelo, una vez ejecutada la simulación y teniendo los datos de inmisiones se puede proceder a verificar el modelo.

Elección del día de simulación y punto receptor.

Para la elección del día de simulación se considero la información con la que se contaba y el posible comportamiento de la dispersión de los contaminantes.

En primer lugar se tomaron en cuenta los cinco puntos de monitoreo para los cuales se tenía información y que fue obtenida por el Instituto Mexicano del Petróleo en una campaña realizada del 24 de mayo al 4 de junio de 1994, en la **figura 4.1** se muestra la ubicación de dichos puntos en la periferia del complejo industrial.

Cabe señalar que las concentraciones de los contaminantes no se midieron en forma simultánea para los puntos seleccionados, debido a que solamente se contaba con un equipo, además el tiempo empleado en la instalación, estabilización y calibración de la estación de monitoreo para cada lugar absorbió parte del tiempo de la campaña, por lo que únicamente se cuenta con datos de 36 horas continuas para cada sitio.

Por otro lado, se eligieron los datos de inmisiones para la verificación del modelo de acuerdo a las características de la ubicación de cada punto de muestreo y las condiciones meteorológicas prevalecientes durante este.

Así pues, el **punto 1** se descarto para la verificación del modelo, debido a que se encuentra al norte(N) del complejo industrial y al sur(S) de una termoeléctrica de la Comisión Federal de Electricidad (C.F.E), los vientos predominantes para los días en los cuales se midió la concentración de dióxido de azufre van en dirección noreste(NNE) y del noreste(NE), por lo tanto se supone que es muy probable que las inmisiones se hayan elevado a causa de las emisiones provenientes de la C.F.E y al no contar con la información de dichas fuentes no se toma en cuenta para la verificación.

Por otra parte, el **punto 2** se ubicó al sur (S) del complejo industrial, los vientos predominantes durante el monitoreo de inmisiones fue en dirección norte(N), noreste(NE) y noreste(NNE), por lo que los valores de concentración se suponen debidos a la adición de las emisiones del complejo industrial y la C.F.E, por lo tanto se considera este punto de monitoreo para la evaluación del modelo.

El **punto 3** se ubica al suroeste(SW) del complejo industrial y los vientos predominantes durante el tiempo de muestreo fueron norte(N) y noreste(NNE), por lo que se infiere que las inmisiones en este punto se deban a la suma de las emisiones

provenientes de la C.F.E y del complejo industrial, este punto sería adecuado para validar el modelo; sin embargo no se cuenta con la información de temperatura para los días en los cuales se realizó el muestreo en el sitio.

No se toma en cuenta el **punto 4** para la verificación del modelo debido a que se encuentra al noroeste(NW) del complejo industrial y al suroeste(SW) de la C.F.E los vientos de mayor frecuencia son del noreste (NNE) y el este (E), por lo que se infiere que las emisiones que afectan la concentración en dicho punto provienen de la C.F.E, por lo tanto se descarta el sitio.

Finalmente, el **punto 5**, se encuentra también al noroeste(NW) del complejo industrial con vientos predominantes del norte (N) y noreste(NNE), al igual que el punto anterior se supone que las niveles de concentración de contaminantes se ven afectadas por las emisiones de la C.F.E, además se perdió una parte considerable de los valores de concentraciones y por lo tanto se descarta el punto.

*En conclusión únicamente se considera la información del **punto 2** para la evaluación del modelo, pues es el único que por su ubicación y los vientos predominantes que se presentaron durante el periodo de muestreo se encuentran afectados por las emisiones del complejo industrial de manera significativa.*

Las mediciones de inmisiones en el **punto 2** se realizaron el *27 de mayo de 1994* a partir de las 5 horas, en la **tabla 4.1** se da la ubicación exacta en el *sistema UTM*, en cuanto a la información meteorológica media utilizada para la ejecución del modelo se utilizó la monitoreada durante el mismo día por el Instituto Mexicano del Petróleo y para la información micrometeorológica se usaron los valores promedios del mes de junio de 1994, la **tabla 4.2** muestra dichos datos.

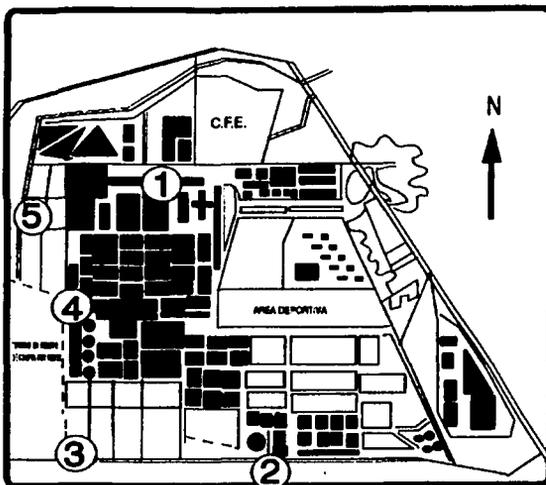


FIGURA 4.1 Ubicación de los puntos de medición de inmisiones de dióxido de azufre

Latitud	Longitud	UTM x (Kms)	UTM y (Kms)	θ (radianes)	θ (grados)	radio (kms)	Punto
20°01'49"	99°16'23"	471.439	2214.755	1.361	77.983	2284.375	2

Tabla 4.1 Ubicación del punto 2 de muestreo de inmisiones en el sistema civil de proyección (latitud y longitud), el sistema militar o UTM y en coordenadas polares

HORA	SO2 OBSERVADO PPM	SO2 pronostico Llamas PPM	SO2 pronostico Llamas PPM	Dirección del viento	Velocidad del viento (m/s)	Temperatura (° Celsius)	Humedad (Humedad %)	Velocidad del viento pronostico (m/s)	O ₃ (ppm)	O ₃ (ppm)	O ₃ (ppm)	PM10 (microg/m ³)	PM10 (microg/m ³)	Adorno de la Gráfica
6	0.009	0.00073	1.901	E	0.500	289.000	0.022	0.134	0.357	0.312	0.136	16.984	6	85.222
6	0.008	0.00007	0.177	NE	0.500	289.500	25.138	0.156	0.340	0.338	0.143	14.626	4	467.104
7	0.009	0.00048	1.250	NE	1.000	291.500	122.787	0.196	0.445	0.411	0.217	-53.810	4	586.365
8	0.100	0.00937	24.486	NE	1.500	294.000	301.195	0.198	0.502	0.488	0.251	-33.823	2	540.217
9	0.170	0.05992	156.514	N	1.500	294.500	520.365	0.205	0.575	0.583	0.284	-17.250	2	494.069
10	0.190	0.03190	83.338	N	2.000	296.000	726.804	0.226	0.710	0.671	0.331	-10.389	1	837.313
11	0.090	0.01388	36.258	N	1.500	298.000	851.258	0.260	0.788	0.805	0.359	-19.018	1	1180.556
12	0.040	0.00364	9.513	N	2.500	300.000	843.349	0.321	0.896	0.909	0.381	-19.159	2	1523.800
13	0.008	0.00462	12.074	N	1.500	301.000	676.669	0.335	0.972	0.981	0.375	-21.857	1	1333.126
14	0.015	0.00598	15.610	N	2.500	302.000	505.172	0.382	0.950	1.002	0.374	-47.849	3	1142.451
15	0.008	0.00367	9.584	N	3.000	302.000	421.829	0.411	1.042	0.950	0.399	-83.977	3	1229.207
16	0.008	0.00000	0.000	N	3.000	302.000	287.791	0.407	1.005	0.940	0.408	-134.926	3	1230.186
17	0.012	0.01505	39.326	N	3.500	300.500	135.800	0.412	0.852	0.847	0.345	-170.847	4	1231.166
18	0.006	0.00010	0.257	NE	4.500	294.000	55.383	0.374	0.815	0.743	0.321	-131.956	4	1119.099
19	0.011	0.00243	6.341	NNE	1.500	292.000	4.555	0.256	0.612	0.585	0.253	10.557	4	764.232
20	0.040	0.02019	52.736	N	1.000	293.000	0.026	0.249	0.558	0.534	0.223	60.908	6	220.055
21	0.050	0.00007	0.175	SSE	0.500	294.000	0.000	0.205	0.473	0.407	0.189	47.714	6	176.813
22	0.025	0.00884	23.087	NNE	0.500	293.000	0.000	0.189	0.451	0.384	0.187	96.764	6	241.771
23	0.020	0.03500	91.431	N	1.500	293.000	0.000	0.189	0.451	0.385	0.179	70.622	6	206.422

Tabla 4.2 Datos meteorológicos y micrometeorológicos correspondientes al día 27 de mayo de 1994 utilizados en la simulación, además se muestran los valores de inmisiones reales y los pronósticos obtenidos mediante la ejecución de LAGDIS.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

4.3 Evaluación cualitativa temporal del modelo LAGDIS con datos reales.

En este punto se comparan las series de tiempo de las concentraciones de dióxido de azufre reales y las simuladas mediante LAGDIS, ambos conjuntos de datos pertenecen a los valores horarios del día 27 de mayo de 1994, las series de tiempo resultantes se muestran en la figura 4.2.

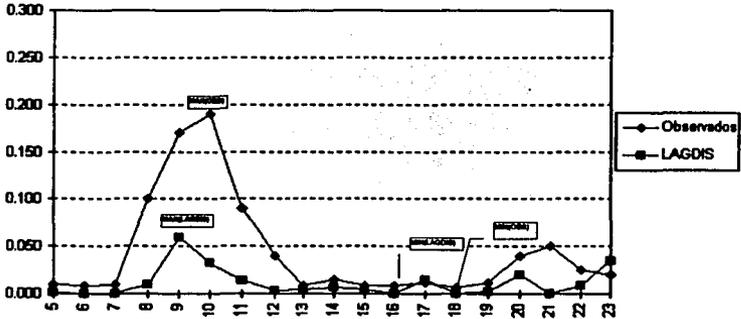


FIGURA 4.2 Gráfica de la serie de tiempo de concentraciones simuladas por el modelo LAGDIS y datos observados reales para el día 27 de mayo de 1994, en el receptor con coordenadas UTM (471.439, 2214.755)

En la gráfica se puede apreciar que ambas series de tiempo son bastante parecidas en la forma, aunque los valores de concentración para la serie de datos simulados son menores que los reales, posiblemente esto se debe a que los vientos para el día de la evaluación tuvieron direcciones predominantes norte(N), noreste(NNE) y noreste(NE), por lo que si bien las inmisiones en el punto 2, ubicado al sur de la región de estudio, se ven afectadas por las emisiones del complejo industrial, también existe un aporte importante de las emisiones producidas en la C.F.E y como no se considero la información perteneciente a las fuentes dentro de la termoeléctrica, entonces es obvio que los valores simulados sean menores que los reales, la falta de información en el inventario de emisiones y su efecto en los resultados obtenidos por el modelo se hace aún más patente al observar las concentraciones registradas y simuladas a las 21 horas, en la cual se presentó una dirección del viento sursureste(SSE), es decir el nivel de concentración en el punto 2 se supone, en este caso, producto de las emisiones provenientes de las industrias ubicadas al sursureste(SSE) de dicho punto y al no contar con ninguna información de dichas fuentes es razonable que el nivel de concentración simulado a las 21 horas tienda a cero, alejándose del valor real en forma significativa.

Por otro lado los máximos de concentración para los valores reales y simulados se presentan en horas bastante cercanas, el máximo real se presentó a las 10 horas, mientras que para la serie de datos pronosticados se presentó a las 9 horas, por lo anterior se puede concluir que el modelo realiza un pronóstico adecuado de los máximos en el tiempo, además la literatura reporta la presencia de máximos diarios de dióxido de azufre para fuentes elevadas entre las 9 y 11 horas.

En cuanto al pronóstico de los mínimos también se predice en forma aproximada en el conjunto de datos seleccionados para la validación, el modelo obtiene el mínimo de concentración a las 16 horas y los datos reales lo presentan a las 18 horas.

Finalmente, se puede concluir que el modelo realiza un pronóstico adecuado tanto de valores máximos como mínimos para el día de verificación elegido; por otro lado las gráfica de la serie de tiempo para los conjuntos de datos reales y simulados muestran una forma parecida y aunque los valores simulados son menores se puede encontrar la razón de ello no en la forma de predicción del modelo, sino en la falta de información de emisiones, además existe una concordancia con los valores esperados considerando las condiciones meteorológicas presentadas durante el día de evaluación.

4.4 Evaluación cuantitativa del modelo LAGDIS con datos reales.

Los estadísticos estimados para comparar los resultados entre el modelo markoviano (LAGDIS) y los datos reales se muestran en la **tabla 4.3**.

Horas	Media OBS	Media LAGDIS	σ_{OBS}	σ_{LAGDIS}	R	b0	b1	N	σ_e
5-23 horas	0.043	0.011	0.054	0.015	0.723	0.014	2.550	19	0.039

Tabla 4.3 Estadísticos estimados a partir de los datos de concentraciones reales y pronosticadas de dióxido de azufre.

Como se menciona en las secciones anteriores los datos utilizados en la estimación de los estadísticos, provienen de la ejecución del modelo para el día 27 de mayo de 1994 a partir de las 5 horas, en el **punto 2** para el cual se tienen datos de inmisiones reales.

Los estadísticos considerados para la evaluación cuantitativa del modelo son: el error estándar de la estimación, coeficiente de correlación (r), desviación estándar de

los valores observados y simulados (σ_0 y σ_p), además de los estimados para la intersección al eje y (b_0) y la pendiente (b_1) en un ajuste a la línea de regresión.

Por otro lado, el coeficiente de correlación r muestra un valor de **0.723**, lo cual nos permite decir que los datos reales y pronosticados se encuentran muy correlacionados, y a medida de que aumentan los niveles de concentración reales para dióxido de azufre, crecen también los valores pronosticados por el modelo markoviano, en resumen si se considera el valor estimado para el coeficiente de correlación r se puede concluir que el modelo realiza un buen pronóstico en el día elegido para la verificación.

En cuanto al ajuste a la línea de regresión, el criterio para establecer si el modelo realiza estimaciones adecuadas a las concentraciones reales, es que el punto de intersección al eje y b_0 tienda a **cero** y la pendiente b_1 tienda a **uno**, es decir $C_0=0+1C_p$, de esta manera, si bien b_0 tiene un valor muy cercano a **cero (0.014)**, b_1 tiene un valor **2.5 veces más grande** que el valor deseado, sin embargo como anteriormente se menciono las deficiencias en el inventario de emisiones podrían haber repercutido en este resultado y no el modelo.

La media para los valores reales es casi **4 veces más grande** que los valores pronosticados, sin embargo ninguno de los promedios, tanto el real como el obtenido mediante valores simulados sobrepasa la norma de **0.13** y es más los valores obtenidos indican que la calidad del aire en el día de la simulación fue buena.

*En conclusión, aunque algunos criterios establecidos para determinar la confiabilidad de los pronósticos realizados por el modelo no se cumplen de manera satisfactoria, posiblemente esto no se deba al diseño conceptual del modelo sino a la carencia de información en el inventario de emisiones (recuérdese el **concepto basura que entra basura que sale**), además el criterio de igualdad entre el RMCE y el RMCEC permiten afirmar que el modelo realiza buenos pronósticos y el valor del coeficiente de correlación r obtenido es lo suficientemente alto, valor deseado en pronósticos perfectos.*

Finalmente se podría decir que un día no es significativo en la evaluación de un modelo, sin embargo la literatura en calidad del aire recomienda validar los modelos primero para periodos cortos y después para periodos más largos.

4.5 Descripción del modelo INPUFF (Gaussian Integrated PUFF model).

INPUFF (Gaussian Integrated PUFF model) es un modelo gaussiano de dispersión para contaminantes poco reactivos basado en un esquema lagrangiano, fue desarrollado por William B. Petersen y Lee Lavdas en 1986, en sus inicios el modelo consideraba eventos sencillos, pero con el tiempo se fueron introduciendo mejoras, en la actualidad es un modelo soportado por la Environmental Protection Agency (EPA) de los Estados Unidos.

INPUFF utiliza la ecuación de difusión gaussiana para estimar las concentraciones en cada receptor, en base a la contribución de las nubes emitidas por las chimeneas definidas dentro del modelo.

En principio el modelo considera un campo de vientos homogéneo, sin embargo el usuario tiene la opción de especificar el campo de vientos para cada periodo meteorológico; por otro lado **INPUFF** permite elegir entre tres algoritmos para la dispersión viento abajo a partir de la fuente, estos incluyen al esquema de Pasquill discutido por Turner (1970); el algoritmo de dispersión expuesto por Irwin (1983), el cual se basa en una síntesis de las ideas de Draxler(1976) y Cramer(1976). El tercer esquema de dispersión es el utilizado para tiempos de trayectorias grandes en el cual el crecimiento de la nube o bocanada es proporcional a la raíz cuadrada del tiempo de viaje de la pseudopartícula.

El modelo también incluye el algoritmo de depositación dado por Rao(1982), además es capaz de simular la trayectoria de las emisiones provenientes de fuentes móviles.

Los algoritmos que constituyen el modelo están incluidos en un programa codificado en FORTRAN, el sistema se encuentra desarrollado en un ambiente MSDOS, los datos requeridos por el modelo son introducidos mediante un archivo donde se especifican las características de la simulación, el conjunto de datos comprende los provenientes de las emisiones de las fuentes, la malla de simulación (en caso de que se considere campo de vientos no homogéneo), meteorología, posición de receptores y control de salida.

El usuario puede indicar cualquiera de las siguientes opciones:

- Tipo de fuente (móvil o estacionaria).
- Tiempo de actualización de la información de la fuente.
- Si se considera campo de vientos homogéneo, o se define este.
- Tipo de algoritmo de dispersión utilizado.
- Si se incluye elevación de la pluma.

Se debe especificar la dimensión del modelo mediante la definición de una malla, si se define campo de vientos no homogéneo, para cada celda de la malla se indica el tamaño y posteriormente se da la información meteorológica correspondiente.

La información requerida para cada fuente de emisión es:

- Localización (km)
- Razón de emisión (gs⁻¹)
- Altura física de la chimenea (metros)
- Temperatura de salida del gas (°K)
- Diámetro de la chimenea (metros)
- Velocidad del gas de salida (ms⁻¹)

- Volumen del flujo del gas (m^3s^{-1})
- Valores iniciales para σ_y y σ_z (metros)
- Velocidad de deposición (cms^{-1})

En caso de que se trate de fuentes móviles se debe proporcionar su dirección y velocidad.

Los datos meteorológicos necesarios son los siguientes:

- Dirección del viento (grados)
- Velocidad del viento (ms^{-1})
- Altura de la capa de mezcla (metros)
- Clase de estabilidad (1-7)
- Desviación estándar de la elevación del ángulo (radianes)
- Desviación estándar del ángulo del azimuth (radianes)
- Temperatura ambiente ($^{\circ}K$)
- Altura del anemómetro (metros)

Se puede actualizar la información meteorológica cada lapso de tiempo, en cuanto a la información para los receptores se requiere su localización (en kilómetros en la horizontal y metros en la vertical)

4.6 Comparación cualitativa espacial del modelo LAGDIS con resultados obtenidos mediante el modelo INPUFF.

En el presente trabajo no se realiza una validación cualitativa del modelo con datos de concentraciones de dióxido de azufre reales monitoreadas cerca de la región de estudio (en este caso Tula) debido a la imposibilidad de obtener tal información, se consideran como observaciones reales las arrojadas por el modelo de simulación INPUFF.

Los datos de emisiones de dióxido de azufre de la refinería de Tula presentados en la **tabla 3.6** son los utilizados en la simulación, por otro lado la información meteorológica con la que se ejecutan los modelos INPUFF y el desarrollado en el presente trabajo LAGDIS, se muestra en la **tabla 4.4**, se eligió tal día para efectuar la comparación debido a que se presentan casi todos los tipos de estabilidad (excepto la clase altamente estable), hay que indicar que las fechas para las cuales se realizó el estudio micrometeorológico comprende la época del año (verano) con actividad convectiva más intensa, por otro lado los valores máximos, así como su ubicación obtenidos de la ejecución de ambos modelos se lista en la **tabla 4.5**.

Como se puede observar en la **tabla 4.5** los máximos coinciden en cuanto al lugar en las horas 8, 11, 14 y 15, las condiciones atmosféricas prevaecientes van de extremadamente inestables a neutras. A las 12 horas existe una aproximación relativamente pequeña entre la ubicación de los valores máximos obtenidos por el

modelo aprobado por la EPA y LAGDIS, los máximos estimados se encuentran a una distancia de 258.819 metros, el tipo de estabilidad que se presentó fue moderadamente inestable.

No existe un buen acuerdo entre la ubicación de los máximos comparados a las 10 horas; sin embargo la distancia es menor a 1 kilómetro y tienen lugar condiciones moderadamente inestables; en orden de incremento de distancias (menores de 5 kilómetros y mayores de un kilómetro) entre máximos se encuentra las horas 13 y 20, con clase de estabilidad ligeramente inestable y levemente estable respectivamente.

Con distancias mayores de 5 kilómetros entre la ubicación de los máximos se encuentran los resultados obtenidos a las 9 horas, en la cual se presentaron condiciones moderadamente inestables y a las 19 horas con clase de estabilidad ligeramente estable.

Como conclusión se puede decir que al parecer entre más inestables sean las condiciones atmosféricas, habrá una mejor exactitud en la coincidencia de los valores máximos en cuanto a ubicación, la diferencia entre la magnitud de los valores comparados no se válida en esta etapa, lo cual se deja para la fase de validación cuantitativa del modelo.

En la isopleta de las figuras 4.3 se puede corroborar que el modelo refleja de manera adecuada la física en cuanto a la dirección esperada en la cual se dispersan los contaminantes, es decir si a las 20 horas se presenta una dirección dominante del viento con dirección de 237.5 grados, las concentraciones máximas se esperan en el cuadrante que va de los 0 a los 90 grados (valores en los ejes x, y positivos).

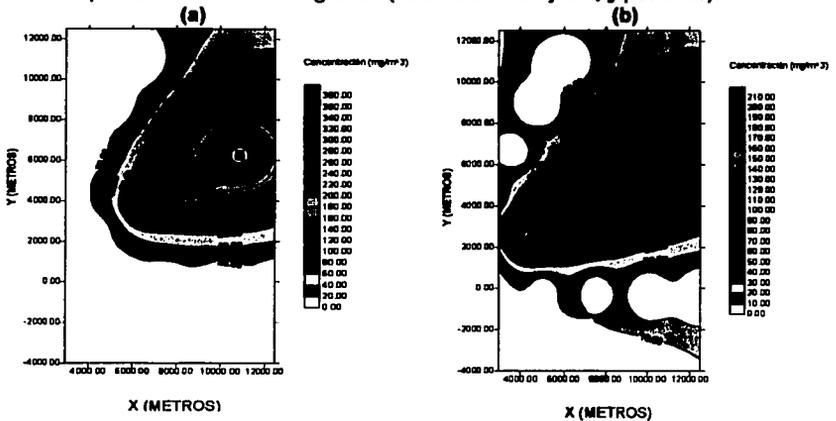
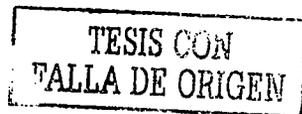


FIGURA 4.3 Isopletas para datos de concentraciones estimados por (a) INPUFF y b (LAGDIS), correspondientes al 23 de Junio de 1994 a las 20 horas



4.7 Comparación cualitativa temporal del modelo LAGDIS con resultados obtenidos mediante el modelo INPUFF.

En este punto se comparan las series de tiempo de las concentraciones de dióxido de azufre para los receptores ubicados en las coordenadas mostradas en la **tabla 4.6**.

Se grafican las concentraciones estimadas por los modelo INPUFF y LAGDIS para cada hora de los días 23 y 24 de junio de 1994, las series de tiempo resultantes se muestran a partir de la **figura 4.4** hasta **4.7**.

Como se puede observar en la **figura 4.4**, para el día 23 de junio de 1994 en las coordenadas (0, 500) metros el máximo se presenta en la mañana para los dos modelos (INPUFF a las 13 horas y para LAGDIS a las 10 horas), los máximos para el día 24 se presentan en ambos casos a la una de la tarde aunque la magnitud es muy discordante, pero hay que recordar que en esta etapa únicamente se prueba que coincidan en cuanto al tiempo en que se presentan los máximos, dejando para la etapa posterior la semejanza cuantitativa de las salidas de los modelos.

Para el sitio ubicado en las coordenadas (0, 2500) metros el máximo para los modelos comparados se presentan a la misma hora el día 23 de junio (una de la tarde); sin embargo al día siguiente los máximos se presentan con una diferencia de 2 horas (INPUFF a las 13 horas y LAGDIS a las 15 horas).

A una distancia de 5000 metros los máximos coinciden, pues ambos se presentan a las 15 horas del día 23 de junio, y a las 8 el 24 de junio.

Finalmente a una distancia de 7500 metros, los máximos concuerdan en el tiempo, dándose a las 8 de la mañana del día 24 de junio.

Se puede concluir que los máximos de concentración se presentan en tiempos aproximados o iguales para ambos modelos, inclusive considerando diferentes días, aunque la magnitud de los máximos pronosticados por INPUFF sean mayores con respecto a los pronosticados por LAGDIS, en otras palabras se observa que en general LAGDIS estima valores de picos máximos inferiores a los pronosticados por INPUFF, el coeficiente de correlación entre los picos máximos es muy bajo (0.23).

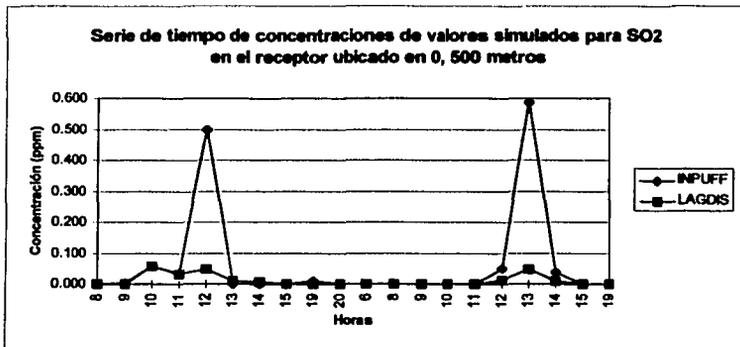


FIGURA 4.4 Gráfica de la serie de tiempo de concentraciones simuladas por los modelos INPUFF y LAGDIS para los días 23 y 24 de junio de 1994, en el receptor ubicado en las coordenadas (0,500) metros.

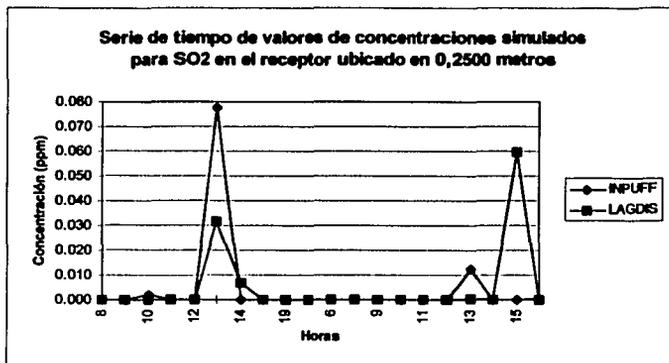


FIGURA 4.5 Gráfica de la serie de tiempo de concentraciones simuladas por los modelos INPUFF y LAGDIS para los días 23 y 24 de junio de 1994, en el receptor ubicado en las coordenadas (0,2500) metros.

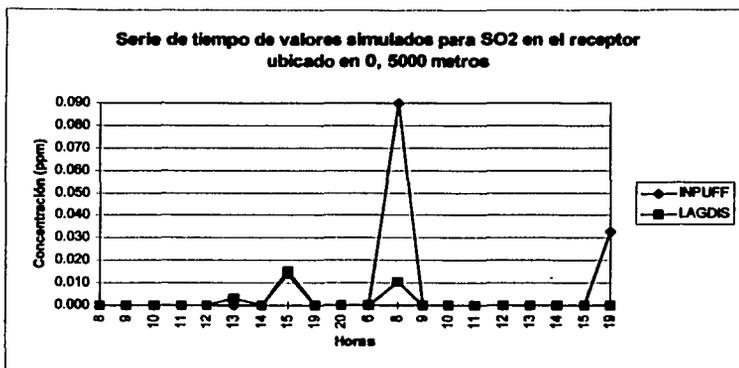


FIGURA 4.6 Gráfica de la serie de tiempo de concentraciones simuladas por los modelos INPUFF y LAGDIS para los días 23 y 24 de junio de 1994, en el receptor ubicado en las coordenadas (0,5000) metros.

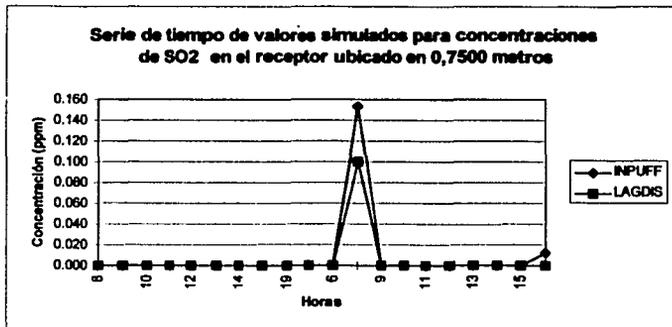


FIGURA 4.7 Gráfica de la serie de tiempo de concentraciones simuladas por los modelos INPUFF y LAGDIS para los días 23 y 24 de junio de 1994, en el receptor ubicado en las coordenadas (0,7500) metros.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

4.8 Comparación cuantitativa del modelo LAGDIS con resultados obtenidos mediante el modelo INPUFF.

Los estadísticos estimados para comparar los resultados de los modelos INPUFF y LAGDIS se muestran en la tabla 4.7.

Los datos utilizados en la estimación de los estadísticos, provienen de la ejecución de los modelos para cada una de las horas del día 23 de junio de 1994, se consideran las concentraciones obtenidas para 72 receptores ubicados sobre un radio de 500, 2500, 5000 y 7500 metros del origen, cada uno situado con 30 grados de separación (en coordenadas polares).

Para el error cuadrático medio (RMSE) y el error cuadrático medio corregido (RMSEC) estimados a partir de las expresiones 4.1 y 4.2, muestran que en general se presentan valores muy parecidos, únicamente para las 11 horas la diferencia entre el RMSE y el RMSEC es de $11.53 \mu\text{gm}^{-3}$, lo cual no es una diferencia muy drástica si se considera que las unidades de medición son muy pequeñas; sin embargo las desviaciones estándar de las concentraciones arrojadas por INPUFF son mayores que las estimadas por LAGDIS desde 1 a 6 veces, en otras palabras INPUFF obtiene valores de concentraciones más dispersas del valor medio que LAGDIS.

Un criterio para establecer el nivel de similitud entre los resultados obtenidos entre dos conjuntos de datos (INPUFF y LAGDIS), es que:

$$\frac{RMSE}{\sigma_e} < 1 \text{ y } \frac{RMSEC}{\sigma_o} < 1$$

Si el lector observa la tabla 4.7, puede constatar que únicamente a las 19 horas se rebasa la condición en 0.2 unidades, si se toma en cuenta dicho estadístico se puede concluir que ambos modelos pronostican los valores de concentración de forma muy similar.

Los coeficientes de correlación r entre los resultados obtenidos a través de INPUFF y LAGDIS, son mayores que cero y tendientes a uno, a excepción de las 19 horas que presenta un coeficiente de correlación muy bajo (0.191), se puede decir que en general los índices de concentración del contaminante pronosticados por ambos modelos están muy correlacionados, además a medida de que el índice de concentración para las concentraciones obtenidas mediante LAGDIS aumentan, crecen también los valores pronosticados por INPUFF.

Por otro lado, si se ajustan los datos de las concentraciones obtenidas por INPUFF y LAGDIS para cada hora de simulación a una línea recta y se obtiene los valores estimados para el punto de intersección b_0 en el eje x y la pendiente b_1 , el criterio para establecer si las concentraciones estimadas para ambos modelos se asemejan son que b_0 se aproxime a cero y b_1 tienda a 1, es decir $C_o=0+1C_p$, los

valores estimados se listan en la **tabla 4.7**, a partir de ello se puede decir que para las 8 y 15 horas se obtienen b_0 cercanos a cero, pero para las otras horas los puntos de intersección se disparan desde -20 hasta 3, por otro lado las pendientes estimadas tienen valores muy diferentes de 1, excepto para las 10, 13 y 15 horas, los estimados para b_1 van de 0.215 hasta 5.204, el único par de valores b_0 y b_1 que cumplen aproximadamente con las condiciones para llegar a la conclusión de que las concentraciones obtenidas mediante INPUFF y LAGDIS son parecidas se presentan a las 15 horas, cabe señalar el hecho de que a tal hora se presenta un tipo de estabilidad neutra, siendo esta la utilizada en primera instancia por diversos autores para realizar una validación del modelo pues considera las condiciones ideales de la atmósfera.

Resumiendo, si se consideran los siguientes criterios: $RMSE=RMSEC$, $\frac{RMSE}{\sigma_e} < 1$, $\frac{RMSEC}{\sigma_o} < 1$ y $r \rightarrow 1$, se puede concluir que INPUFF y LAGDIS realizan los pronósticos de manera similar, en cambio los datos no cumplen en su mayoría la prueba de semejanza si se toma en cuenta el criterio de ajuste de datos a la línea recta y estimación de valores para b_0 y b_1 , pues son muy diferentes en su mayoría a los valores óptimos establecidos ($b_0 \rightarrow 0$ y $b_1 \rightarrow 1$); además se debe señalar que el grado de dispersión de los valores pronosticados mediante INPUFF es mayor que la de LAGDIS.

	Temperatura (°K)	Velocidad del viento (m.s ⁻¹)	dirección del viento (grados)	Altura (m)	velocidad (m.s ⁻¹)	longitud (m)	ρ ₀	Est.			
8	291.183	0.879	219.879	494.068	0.126	-0.074	0.100	2	0.375	0.422	0.228
9	292.600	0.675	61.824	494.068	0.198	-4.181	0.100	2	0.482	0.557	0.281
10	294.366	0.919	69.379	837.312	0.156	-0.107	0.100	2	0.454	0.497	0.297
11	295.500	1.899	74.460	1180.556	0.235	-5.673	0.100	1	0.554	0.691	0.325
12	295.850	2.466	93.533	1523.800	0.275	-9.779	0.100	2	0.860	0.827	0.349
13	296.383	2.883	124.216	1703.105	0.242	-0.476	0.100	3	0.971	0.973	0.392
14	296.600	3.949	114.183	1882.411	0.403	-41.695	0.100	2	1.237	1.338	0.411
15	296.350	5.416	149.400	2061.716	0.396	-37.359	0.100	4	1.173	0.974	0.446
19	287.616	3.649	9.433	998.611	0.359	845.070	0.100	5	0.801	0.634	0.394
20	287.316	3.383	237.500	817.486	0.278	731.707	0.100	5	0.671	0.455	0.283

Tabla 4.4 Datos meteorológicos y micrometeorológicos correspondientes al día 23 de junio de 1994.

Hora	Ubicación en la horizontal eje X (metros)	Ubicación en la vertical eje Z (metros)							
08	4330.130	2500.000	85.998	0.033	4330.130	2500.000	36.729	0.014	0.000
09	433.013	-250.000	139.151	0.053	-8660.250	-5000.00	20.922	0.008	10259.139
10	-250.000	-433.013	786.502	0.301	433.013	-250.000	583.106	0.223	707.107
11	500.000	0.000	1246.315	0.477	500.000	0.000	255.957	0.098	0.000
12	0.000	500.000	1304.511	0.499	250.000	433.013	131.941	0.051	258.819
13	-2500.000	4330.130	212.889	0.081	0.000	2500.000	82.860	0.032	3098.286
14	-1250.000	2165.060	347.988	0.133	-1250.000	2165.060	39.435	0.015	0.000
15	1250.000	2165.060	322.332	0.123	1250.000	2165.060	242.284	0.093	0.000
19	-0.001	-12500.000	447.792	0.171	2165.060	-1250.000	402.392	0.154	11456.439
20	10825.300	6250.000	394.858	0.151	6495.190	3750.000	211.065	0.081	4999.985

Tabla 4.5 Ubicación de los máximos de concentración de SO₂ correspondientes al día 23 de junio de 1994.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

23-Jun-94	12	0.499	10	0.056	(0, 500)
23-Jun-94	13	0.078	13	0.032	(0, 2500)
23-Jun-94	15	0.014	15	0.015	(0, 5000)
24-Jun-94	13	0.587	13	0.048	(0, 500)
24-Jun-94	13	0.012	15	0.060	(0, 2500)
24-Jun-94	8	0.090	8	0.011	(0, 5000)
24-Jun-94	8	0.153	8	0.100	(0, 7500)

Tabla 4.6 Ubicación de los receptores para los cuales se gráfica la serie de tiempo de concentraciones.

Hora	RMSE	RMSEC	Media INPUFF	Media LAGDIS	σ_{INPUFF}	σ_{LAGDIS}	$\frac{RMSE}{\sigma_{INPUFF}}$	$\frac{RMSEC}{\sigma_{INPUFF}}$	r	b ₀	b ₁
8	5.85	5.80	1.29	0.51	10.15	4.33	0.58	0.57	0.998	0.097	2.339
9	27.79	26.61	10.03	2.03	29.52	5.28	0.94	0.90	0.581	3.429	3.248
10	93.21	89.78	89.07	64.05	214.75	140.67	0.43	0.42	0.956	-4.355	1.459
11	190.24	178.71	95.06	29.84	237.14	61.06	0.80	0.75	0.952	-15.300	3.699
12	175.70	171.25	53.45	14.17	197.15	31.15	0.89	0.87	0.822	-20.307	5.204
13	26.00	26.00	7.44	7.39	36.90	16.48	0.70	0.70	0.779	-5.441	1.744
14	39.82	39.36	9.16	3.09	44.84	7.17	0.89	0.88	0.764	-5.612	4.783
15	16.90	16.79	4.98	3.06	38.16	21.54	0.44	0.44	0.994	-0.414	1.762
19	78.16	77.90	18.67	12.37	65.11	57.91	1.20	1.20	0.191	16.015	0.215
20	47.60	47.52	11.89	9.02	60.58	39.14	0.79	0.78	0.614	3.317	0.950

Tabla 4.7 Estadísticos estimados para comparar los resultados de los modelos INPUFF y LAGDIS, considerando valores de las concentraciones estimadas en μgm^3 .

Bibliografía

- ⊗ Cantarero Leal, Julio; Castro Fresnillo, José Manuel: **Validación de Modelos de Simulación**. Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Telecomunicación. Universidad Politécnica de Madrid. URL: <http://www.ieeesb.etsit.upm.es/~julio/c/>
- ⊗ Instituto Mexicano del Petróleo (1994): **Evaluación de Inmisiones en centros de refinación de petróleos mexicanos (Informe E0E-9310)**, México, D.F.
- ⊗ Mora Perdomo, Virginia Rebeca (1994): **Verificación del modelo de pronóstico de dispersión de contaminantes atmosféricos HOTMAC-RAPTAD, para el Valle de México**. Tesis para obtener el grado de maestro en ciencias, IPN. México, D.F.
- ⊗ Petersen B., William y Lavdas, Lee (1986): **INPUFF 2.0 - A Multiple Source Gaussian Puff Dispersion Algorithm. User's Guide**. EPA-600/8-86/024, U.S.A.
- ⊗ Yamada, T., y S. S. Bunker (1988): **Development of a nested grid, second moment turbulence closure model and application to the 1982 ASCOT Brush Creek data simulation**. J. Appl. Meteor., 27:562-578.

CONCLUSIONES

- ☛ En el proceso de la dispersión atmosférica de contaminantes tienen gran influencia los factores meteorológicos, por ello para aplicar los modelos de dispersión diseñados es necesario la obtención de parámetros meteorológicos a partir de mediciones en el lugar de interés, o bien a la aplicación de un modelo meteorológico ya sea de diagnóstico o pronóstico, en el último caso se tendrá la posibilidad de estimar parámetros meteorológicos en el tiempo que permitan obtener pronósticos de concentraciones de contaminantes a futuro. Sin embargo, la aplicación de modelos meteorológicos muchas veces no es posible debido a la carencia de información para ejecutarlos.
- ☛ El enfoque lagrangiano para estudiar el fenómeno de dispersión atmosférica permite diseñar modelos de dispersión a gran escala, pues mediante un modelo meteorológico se puede definir un campo de vientos no homogéneo para distancias considerables (hasta 300 kilómetros), no obstante hay que señalar en las primeras etapas del diseño de un modelo de dispersión se deben considerar las condiciones más simples como son: pequeña escala, campo de vientos homogéneo y pronósticos para contaminantes poco reactivos.
- ☛ El modelo LAGDIS (Modelo LAGrangiano de DISpersión atmosférica) desarrollado en el presente trabajo sigue un esquema lagrangiano y considera que los valores de concentración pertenecen a una distribución normal, lo importante del modelo es que obtiene las fluctuaciones del campo medio de vientos mediante una sucesión de Markov; sin embargo ello mismo dificulta la obtención de información para su ejecución, ya que resulta muy costoso medir las variables necesarias para estimar los parámetros micrometeorológicos.
- ☛ Para la validación del modelo LAGDIS con datos reales se consideraron dos etapas: en la primera se hace una **evaluación cualitativa espacial y temporal**, en la segunda etapa de evaluación se hace un **análisis cuantitativo**. En cuanto a la primera parte de la validación se puede concluir que el modelo realiza un pronóstico adecuado pues tanto los valores máximos como mínimos para el día de verificación elegido coinciden en el tiempo aunque no en magnitud; por otro lado las gráficas de la serie de tiempo para los conjuntos de datos reales y simulados muestran una forma parecida y aunque los valores simulados son menores se puede encontrar la razón de ello no en la forma de predicción del modelo, sino en la falta de información de emisiones, además existe una concordancia con los valores esperados considerando las condiciones meteorológicas presentadas durante el día de evaluación. En cuanto al análisis cuantitativo de la simulación con respecto al modelo real se puede decir que aunque algunos criterios establecidos para determinar la confiabilidad de los pronósticos no se cumplen de manera satisfactoria, posiblemente esto no se deba al diseño conceptual del modelo sino a la carencia de información en el inventario de emisiones, además el criterio de igualdad entre el RMCE y el RMCEC permiten afirmar que el modelo realiza buenos pronósticos y el valor del coeficiente de correlación r obtenido es lo suficientemente alto, valor deseado en pronósticos perfectos.

- ☛ Para comparar la similitud entre el modelo Gaussiano INPUFF desarrollado por la EPA (Environmental Protection Agency) y el modelo desarrollado en el presente trabajo se siguen criterios de validación cualitativa y cuantitativa de modelos de dispersión atmosférica, para la comparación cualitativa espacial se coteja el grado de coincidencia en cuanto a la ubicación de los máximos de concentración y se concluyó que entre más inestables sean las condiciones meteorológicas, más se aproximan las ubicaciones de los máximos pronosticados para INPUFF y LAGDIS, además el modelo parece reflejar de manera adecuada la física del fenómeno en cuanto a la dirección esperada en la cual se dispersan los contaminantes.
- ☛ En cuanto a la etapa cualitativa temporal, al comparar las series de tiempo de concentraciones para ambos modelos, se puede concluir que los máximos de concentración se presentan en tiempos iguales o aproximados, aunque la magnitud de los máximos pronosticados por INPUFF sean mayores que los obtenidos por LAGDIS.
- ☛ En la comparación cuantitativa se consideraron los siguientes estadísticos: error cuadrático medio, error cuadrático medio corregido, coeficiente de correlación, desviación estándar y ajuste de valores a la línea recta, por los resultados obtenidos para los tres primeros estadísticos, se puede concluir que INPUFF y LAGDIS realizan los pronósticos de manera similar; sin embargo la desviación estándar indica que INPUFF obtiene valores de concentraciones más dispersas del valor medio que LAGDIS y por otro lado en su mayoría el ajuste a la línea recta permite inferir que los resultados obtenidos por INPUFF y LAGDIS no son similares pues los valores de b_0 (punto de intersección del eje x) no se aproximan a cero, ni los de b_1 (valor de la pendiente) tienden a uno.
- ☛ A diferencia de varios modelos diseñados a partir del método Euleriano, un modelo de dispersión lagrangiano puede ser utilizado considerando un campo de vientos no homogéneo, lo cual permite utilizarlo a gran escala con éxito, no así los modelos eulerianos que comienzan a tener fallas al estimar las concentraciones en receptores alejados de las fuentes de emisión.
- ☛ Otra herramienta para el pronóstico de concentraciones de un contaminante es la aplicación de la metodología Box-Jenkins (o alguna otra dependiendo del contaminante) a las series de tiempo de los datos respectivos, sin embargo dicha metodología requiere de un registro histórico de datos de concentración, las estaciones de monitoreo únicamente miden dicha información en forma periódica en las ciudades con grandes problemas de contaminación (Ciudad de México, Guadalajara y Monterrey), es por ello que un modelo lagrangiano puede ser una alternativa para la estimación de concentraciones en lugares donde únicamente se conozca la información de emisiones y meteorología del lugar, como es el caso de ciertas termoeléctricas y refinерías.

ANEXO A

DEDUCCIÓN DEL GRADIENTE ADIABÁTICO SECO

Para obtener una expresión que refleje el comportamiento de la temperatura del aire con respecto a la altura en la atmósfera baja, hay que tener en cuenta que ésta se encontrará afectada por la presión existente en las diferentes alturas.

Por tanto, primero se deduce la función que expresa la variación de la presión conforme a la altura. La presión a una altura z es igual al peso del aire por encima de ésta, así la ecuación que representa los cambios de presión en la atmósfera queda representada por:

$$\frac{dp(z)}{dz} = -\rho g \quad \text{A.1}$$

donde ρ es la densidad; g es la fuerza de gravedad; y el signo menos se pone para indicar que la presión disminuye con la altura.

También hay que considerar que el aire de la atmósfera se comporta como un gas ideal, de este modo se verifica la ecuación de estado de los gases ideales en cualquier punto de la atmósfera:

$$p = \frac{\rho RT}{M_a} \quad \text{A.2}$$

donde p es la presión; ρ es la densidad másica del aire (kg/m^3); R es la constante universal de los gases ($8.134 \text{ J}/^\circ\text{K mol}$); T es la temperatura en grados Kelvin; y M_a es el peso molecular del aire (28.97).

Despejando ρ de la ecuación A.2 y sustituyendo en A.1 se tiene:

$$\frac{dp(z)}{dz} = -\frac{gM_a p}{RT} \quad \text{A.3}$$

siendo T constante. Sin embargo, como se ha referido a lo largo del trabajo la temperatura en la troposfera, disminuye conforme aumenta la altura, para tomar en cuenta el verdadero comportamiento del perfil de temperatura, se utiliza el concepto de parcela de aire, es decir, un pequeño volumen de aire que se desplaza verticalmente en la atmósfera, en el cual el intercambio de moléculas con su entorno no es significativo con respecto al total de moléculas que contiene el volumen. Además tampoco existe un intercambio térmico entre la parcela de aire y las zonas aledañas (proceso adiabático), por lo que el movimiento vertical de la parcela estará determinado por las diferencias de temperatura con su entorno.

ANEXO A

Para expresar el cambio de temperatura con la altura se utiliza la **Primera Ley de la Termodinámica** y la ecuación A.3 obtenida a partir de la **Ecuación de Estado de los Gases Ideales**.

Se aplica la **Primera Ley de la Termodinámica** la cual indica la conservación de la energía en un sistema termodinámico, la ecuación se representa de la siguiente forma:

$$dU = dQ - dW$$

donde dU implica un aumento de energía en el sistema, con un valor igual a $C_v dT$ (C_v es el calor específico a volumen constante); dQ es el calor absorbido por el sistema a través de su entorno; y dW es la energía perdida por el sistema hacia su entorno como resultado del trabajo realizado para cambiar el volumen de la parcela de aire, dW toma un valor igual a $p dV$ (V es el volumen específico).

Primeramente se hace uso de una forma de la ecuación de estado de los gases ideales que contenga tanto a V como a T .

$$pV = \frac{mRT}{Ma} \quad \text{-----} \quad \text{A.4}$$

Se obtiene la derivada de pV con respecto a T :

$$\frac{d(pV)}{dT} = \frac{d\left(\frac{mRT}{Ma}\right)}{dT} = \frac{mR}{Ma} \frac{dT}{dT} = \frac{mR}{Ma}$$

$$d(pV) = \frac{mR}{Ma} dT \quad \text{-----} \quad \text{A.5}$$

O bien:

$$d(pV) = p dV + V dp \quad \text{-----} \quad \text{A.6}$$

Para obtener dW se despeja $p dV = dW$ en A.6 así.

$$p dV = d(pV) - V dp \quad \text{-----} \quad \text{A.7}$$

Sustituyendo el valor $d(pV)$ obtenido en A.5 se tiene:

$$p dV = \frac{mR}{Ma} dT - V dp \quad \text{-----} \quad \text{A.8}$$

ANEXO A

Considerando que no hay intercambio de energía $dQ=0$, por tanto la Primera Ley de la Termodinámica se reduce a:

$$C_v dT = V dp - \frac{mR}{Ma} dT$$

De la ecuación A.4 $V = mRT/Ma p$, entonces:

$$C_v dT = \frac{mRT}{Ma p} dp - \frac{mR}{Ma} dT$$

Agrupando términos y despejando se tiene que:

$$C_v dT + \frac{mR}{Ma} dT = \frac{mRT}{Ma p} dp$$

$$\left(C_v + \frac{mR}{Ma} \right) dT = \frac{mRT}{Ma p} dp$$

$$\frac{dT}{dp} = \frac{(mRT/Ma p)}{C_v + mR/Ma} \quad \text{A.9}$$

Relacionando A.3 con A.9 se obtiene:

$$\frac{dT}{\left(-\frac{gMa p}{RT} \right) dz} = \frac{(mRT/Ma p)}{C_v + mR/Ma}$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{(mRT/Ma p)}{(C_v + mR/Ma)} - (gMa p/RT) = -\frac{gm}{C_v + mR/Ma} = -\frac{g}{C_v + R/Ma} \quad \text{A.10}$$

Como $C_v + R/Ma = C_p$ (C_p es el calor específico a presión constante) entonces la expresión A.10 queda reducida a la siguiente forma:

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{g}{C_p}$$

La expresión anterior se conoce como el gradiente adiabático seco simbolizado por $\Gamma_{\text{adia sec}}$ por consiguiente.

$$\Gamma_{\text{adia sec}} = -\frac{g}{C_p}$$

ANEXO B

DEDUCCIÓN DEL GRADIENTE ADIABÁTICO HÚMEDO

Al igual que en el gradiente adiabático seco se considera a la temperatura en la atmósfera baja influenciada por la presión existente en diferentes alturas de acuerdo a la expresión A.3 se tiene que:

$$\frac{dp(z)}{dz} = -\frac{gM_{ap}}{RT} \quad \text{-----} \quad \text{B.1}$$

Para relacionar B.1 con el perfil vertical de la temperatura se utiliza la Primera Ley de la Termodinámica, de la cual se hizo referencia en el Anexo A y que a grandes rasgos indica que la variación de energía dU de un sistema termodinámico se encuentra determinado por la energía absorbida por el sistema mediante su entorno (dQ) y la energía que pierde el sistema como resultado de un trabajo realizado por este (simbolizado por dW). Así:

$$dU = dQ - dW \quad \text{-----} \quad \text{B.2}$$

En el caso del gradiente adiabático seco se considera $dQ=0$, pero cuando se trata de una atmósfera húmeda, el enfoque cambia debido a que llegará un momento en que el vapor de agua se condensa y libera calor latente, por tanto el calor desprendido por una atmósfera considerada húmeda será:

$$dQ = -\Delta H dw$$

donde $-\Delta H$ es el calor latente y dw es el cambio de relación entre la cantidad de vapor de agua y aire seco en un volumen determinado.

Tomando en cuenta que $dU = C_v dT$ y $-dW = V dp - (mR/M_a) dT$, se sustituyen dichos valores en B.2.

$$C_v dT = -\Delta H dw + V dp - \frac{mR}{M_a} dT$$

Despejando $-\Delta H dw$ se tiene:

$$-\Delta H dw = C_v dT - V dp + \frac{mR}{M_a} dT \quad \text{-----} \quad \text{B.3}$$

Agrupando términos y considerando que $C_p = C_v + mR/M_a$ se reduce B.3.

$$-\Delta H dw = (C_v + mR/M_a) dT - V dp = C_p dT - V dp \quad \text{-----} \quad \text{B.4}$$

Derivando con respecto a z y sustituyendo B.1 en B.4.

ANEXO B

$$-\Delta H \frac{dw}{dz} = C_p \frac{dT}{dz} - V \left(-\frac{gM_{ap}}{RT} \right)$$

$$-C_p \frac{dT}{dz} = V \frac{gM_{ap}}{RT} + \Delta H \frac{dw}{dz} \quad \text{B.5}$$

De la ecuación de los gases ideales presentada en A.4 se tiene $V = mRT/M_{ap}$, por tanto sustituyendo en B.5, se reduce la ecuación a la forma:

$$-C_p \frac{dT}{dz} = \frac{mRT}{M_{ap}} \frac{gM_{ap}}{RT} + \Delta H \frac{dw}{dz}$$

$$-\frac{dT}{dz} = \frac{gm}{C_p} + \frac{\Delta H}{C_p} \frac{dw}{dz}$$

Simbolizando $-\frac{dT}{dz}$ por $\Gamma_{\text{grad sat}}$ queda:

$$\Gamma_{\text{grad sat}} = \frac{gm}{C_p} + \frac{\Delta H}{C_p} \frac{dw}{dz}$$

ANEXO C

DEDUCCIÓN DE LA TEMPERATURA POTENCIAL

La temperatura potencial es aquella que refleja cuantitativamente la desviación del perfil real de temperatura con respecto al gradiente adiabático.

Para probar la afirmación anterior, primero se relacionan las temperaturas y presiones a dos alturas diferentes en una atmósfera con comportamiento adiabático, utilizando e integrando la ecuación A.9 y evaluando el resultado en dos puntos cualesquiera se obtiene:

$$\frac{dT}{dz} = \frac{(mRT/Ma p)}{C_v + mR/Ma}$$

$$(C_v + mR/Ma) \frac{dT}{T} = \frac{mR}{Ma} \frac{dp}{p}$$

$$(C_v + mR/Ma) \int_{z_1}^{z_2} \frac{dT}{T} = \frac{mR}{Ma} \int_{z_1}^{z_2} \frac{dp}{p}$$

$$\left(C_v + m \frac{R}{Ma} \right) \ln(T) \Big|_{z_1}^{z_2} = \frac{mR}{Ma} \ln(p) \Big|_{z_1}^{z_2}$$

$$\left(C_v + m \frac{R}{Ma} \right) [\ln(T(z_2)) - \ln(T(z_1))] = \frac{mR}{Ma} [\ln(p(z_2)) - \ln(p(z_1))]$$

Agrupando y reduciendo los términos de la función a una forma más sencilla:

$$\left(C_v + m \frac{R}{Ma} \right) \ln \left[\frac{T(z_2)}{T(z_1)} \right] = \frac{mR}{Ma} \ln \left[\frac{p(z_2)}{p(z_1)} \right]$$

$$\ln \left[\frac{T(z_2)}{T(z_1)} \right] = \frac{mR/Ma}{(C_v + mR/Ma)} \ln \left[\frac{p(z_2)}{p(z_1)} \right] \quad \text{C.1}$$

Se reduce $(mR/Ma)/(C_v + mR/Ma)$ considerando $\gamma = C_p/C_v$ y $C_p = C_v + R/Ma$.

$$\frac{mR/Ma}{(C_v + mR/Ma)} = \frac{(mR/Ma) + C_v - C_v}{(C_v + mR/Ma)} = \frac{C_v}{C_v} = \frac{((mR/Ma + C_v) - C_v)/C_v}{(C_v + mR/Ma)/C_v}$$

ANEXO C

$$= \frac{(C_p/C_v)}{C_p/C_v} = \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \quad \text{C.2}$$

Sustituyendo C.2 en C.1 y reduciendo la expresión se obtiene:

$$\begin{aligned} \ln \left[\frac{T(z_2)}{T(z_1)} \right] &= \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \ln \left[\frac{p(z_2)}{p(z_1)} \right] \\ \ln \left[\frac{T(z_2)}{T(z_1)} \right] &= \ln \left[\frac{p(z_2)}{p(z_1)} \right]^{(\gamma - 1)/\gamma} \\ \left[\frac{T(z_2)}{T(z_1)} \right] &= \left[\frac{p(z_2)}{p(z_1)} \right]^{(\gamma - 1)/\gamma} \quad \text{C.3} \end{aligned}$$

Si se considera una masa de aire originalmente en el estados T, p y se desea saber la temperatura θ que alcanzaría, si ésta parcela de aire fuera llevada adiabáticamente a una presión de 1000 mb, C.3 quedaría.

$$\begin{aligned} \left[\frac{T}{\theta} \right] &= \left[\frac{p}{1000 \text{mb}} \right]^{(\gamma - 1)/\gamma} \\ \theta &= T \left[\frac{p}{1000 \text{mb}} \right]^{-(\gamma - 1)/\gamma} \quad \text{C.4} \end{aligned}$$

Derivando logaritmicamente C.4 con respecto a z.

$$\begin{aligned} \ln(\theta) &= \ln \left\{ T \left[\frac{p}{1000 \text{mb}} \right]^{-(\gamma - 1)/\gamma} \right\} \\ \ln(\theta) &= \ln(T) + \ln \left(\frac{p}{1000 \text{mb}} \right)^{-(\gamma - 1)/\gamma} \\ \ln(\theta) &= \ln(T) - \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \ln \left(\frac{p}{1000 \text{mb}} \right) \end{aligned}$$

ANEXO C

$$\frac{d \ln(\theta)}{dz} = \frac{d \ln(T)}{dz} - \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \frac{d \ln\left(\frac{p}{1000 \text{mb}}\right)}{dz}$$

$$\frac{d \ln(\theta)}{dz} = \frac{d \ln(T)}{dz} - \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \left(\frac{d \ln(p)}{dz} - \frac{d \ln(1000 \text{mb})}{dz} \right)$$

$$\frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dz} = \frac{1}{T} \frac{dT}{dz} - \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \frac{1}{p} \frac{dp}{dz} \quad \text{C.5}$$

Ahora se demostrará que:

$$\frac{\Gamma}{T} = - \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \frac{1}{p} \frac{dp}{dz}$$

lo cual puede obtenerse sustituyendo el valor dp/dz expresado en A.3.

$$\begin{aligned} \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \frac{1}{p} \frac{dp}{dz} &= - \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \frac{1 - gMa_p}{p} \frac{1}{RT} = - \frac{(C_p/C_v - 1) - gMa}{C_p/C_v} \frac{1}{RT} = \left(\frac{C_p - C_v}{C_v} \right) \frac{C_v}{C_p} \left(\frac{gMa}{RT} \right) \\ &= \left(\frac{C_p - C_v}{C_p} \right) \left(\frac{gMa}{RT} \right) = \left(\frac{C_v + R/Ma - C_v}{C_p} \right) \left(\frac{gMa}{RT} \right) = \frac{1}{T} \frac{g}{C_p} = \frac{1}{T} \Gamma \quad \text{C.6} \end{aligned}$$

Ya que el gradiente adiabático seco $\Gamma = g/C_p$

Ahora se sustituye C.6 en C.5, obteniéndose la siguiente expresión.

$$\frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dz} = \frac{1}{T} \frac{dT}{dz} + \frac{1}{T} \Gamma$$

$$\frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dz} = \frac{1}{T} \left(\frac{dT}{dz} + \Gamma \right)$$

Pero como θ y T tienen valores muy próximos, la expresión queda reducida a:

$$\frac{d\theta}{dz} \cong \frac{dT}{dz} + \Gamma \quad \text{C.7}$$

Integrando C.7 se obtiene la temperatura potencial, donde T es la fluctuación que sufre la temperatura con respecto al gradiente adiabático Γ .

ANEXO C

$$d\theta \cong dT + \Gamma dz$$

$$\int d\theta \cong \int dT + \int \Gamma dz$$

$$\theta \cong T + \Gamma z$$

ANEXO D

DEDUCCIÓN DE LA ECUACIÓN DE CONCENTRACIÓN DE ESPECIES

La ecuación que describe la concentración de las especies se obtiene realizando un balance de materia, para un elemento de volumen $\Delta x \Delta y \Delta z$ (ver figura D.1.1).

Supongase primero el siguiente balance de materia para una especie A:

Velocidad de variación molar de A con
el tiempo en el elemento de volumen =

$$\text{Entrada de A} - \text{Salida de A} + \text{Velocidad de producción de A por reacción química} + \text{Adición de la especie A}$$

D.1

Para calcular la velocidad de acumulación de materia por volumen a través del tiempo ($\Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial c_A}{\partial t}$), primero se plantean los términos de entrada y salida para la especie A en x, y y z:

La cantidad de materia que entra y sale en el plano $\Delta y \Delta z$; pasando a través de x y saliendo por $x + \Delta x$ es¹:

$$N_{Ax|x} \Delta y \Delta z - N_{Ax|x+\Delta x} \Delta y \Delta z$$

La cantidad de materia que entra y sale en el plano $\Delta x \Delta z$; pasando a través de y y saliendo por $y + \Delta y$ es:

$$N_{Ay|y} \Delta x \Delta z - N_{Ay|y+\Delta y} \Delta x \Delta z$$

La cantidad de materia que entra y sale en el plano $\Delta x \Delta y$; pasando a través de z y saliendo por $z + \Delta z$ es:

$$N_{Az|z} \Delta x \Delta y - N_{Az|z+\Delta z} \Delta x \Delta y$$

La velocidad de producción de A por reacción química, representada por una expresión matemática sería:

$$R_A \Delta x \Delta y \Delta z$$

¹ $N_A = c_A u_A$ donde c_A es la concentración molar de la especie A y u_A es la velocidad de la especie A

ANEXO D

Y la adición de la especie **A** debido a emisiones de alguna fuente situada en el elemento de volumen $\Delta x \Delta y \Delta z$ quedaría expresada por:

$$S_A \Delta x \Delta y \Delta z$$

Ahora, aplicando el balance de materia señalado en D.1 se tiene:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z = \left(N_{Ax|x} \Delta y \Delta z - N_{Ax|x+\Delta x} \Delta y \Delta z \right) + \left(N_{Ay|y} \Delta x \Delta z - N_{Ay|y+\Delta y} \Delta x \Delta z \right) + \left(N_{Az|z} \Delta x \Delta y - N_{Az|z+\Delta z} \Delta x \Delta y \right) + S_A \Delta x \Delta y \Delta z + R_A \Delta x \Delta y \Delta z$$

Si se pasa $\Delta x \Delta y \Delta z$ al segundo miembro de la ecuación anterior, la expresión se reduciría a:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = \frac{(N_{Ax|x} - N_{Ax|x+\Delta x})}{\Delta x} + \frac{(N_{Ay|y} - N_{Ay|y+\Delta y})}{\Delta y} + \frac{(N_{Az|z} - N_{Az|z+\Delta z})}{\Delta z} + S_A + R_A$$

Haciendo tender Δx , Δy y Δz a cero se obtiene la definición de derivada para cada uno de los miembros de la ecuación que los contengan:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_A}{\partial t} &= - \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{(N_{Ax|x+\Delta x} - N_{Ax|x})}{\Delta x} - \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{(N_{Ay|y+\Delta y} - N_{Ay|y})}{\Delta y} \\ &\quad - \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{(N_{Az|z+\Delta z} - N_{Az|z})}{\Delta z} + S_A + R_A \\ &= - \frac{\partial N_A}{\partial x} - \frac{\partial N_A}{\partial y} - \frac{\partial N_A}{\partial z} + S_A + R_A \end{aligned} \quad \text{D.2}$$

Si se expresa la ecuación D.2 en términos del gradiente ∇ quedaría:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla N_A = S_A + R_A$$

Como $N_A = X_A (N_A + N_B) - c D_A \nabla X_A$ ² la ecuación anterior se transformaría en:

² B simboliza a otra especie contenida en el fluido y X_A es la fracción molar de la especie A.

ANEXO D

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \{ X_A (N_A + N_B) - c D_A \nabla X_A \} = S_A + R_A \quad \text{D.3}$$

Tomando en cuenta que $N_A + N_B = cu^{*3}$, D.3 se convierte en:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \{ X_A cu^* - c D_A \nabla X_A \} = S_A + R_A$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla (X_A cu^*) = \nabla \{ c D_A \nabla X_A \} + S_A + R_A \quad \text{D.4}$$

Sustituyendo $X_A = c_A/c$ en D.4 se llega a la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \left(\frac{c_A}{c} cu^* \right) = \nabla \left\{ c D_A \nabla \frac{c_A}{c} \right\} + S_A + R_A \quad \text{D.5}$$

Suponiendo que c y D_A son constantes D.5 se transforma en:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla (c_A u^*) = D_A \nabla^2 c_A + S_A + R_A \quad \text{D.6}$$

Expresando D.6 en coordenadas rectangulares.

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \frac{\partial u_x c_A}{\partial x} + \frac{\partial u_y c_A}{\partial y} + \frac{\partial u_z c_A}{\partial z} = D_A \left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) + S_A + R_A$$

Generalizando para N especies, donde $i = 1, 2, \dots, N$ y $j = 1, 2, 3$ la ecuación de concentración de especies queda finalmente como:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial u_j c_i}{\partial u_j} = D_i \left(\frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j \partial x_j} \right) + S_i + R_i$$

³ u^* es la velocidad media de difusión del fluido.

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

ANEXO D

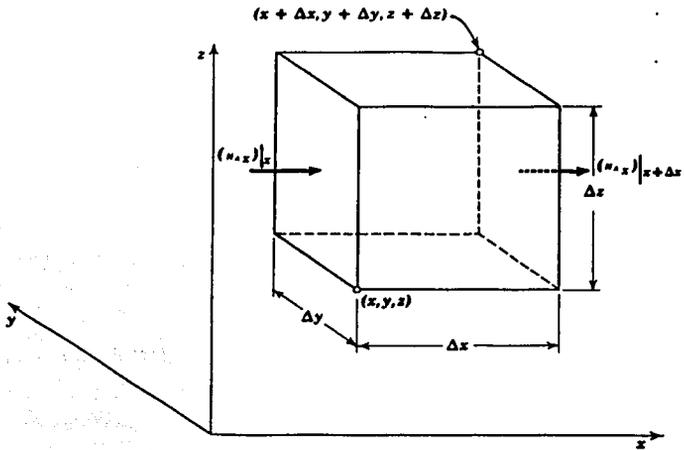


Figura D.1.1

TESTEON
FALLA DE ORIGEN

GLOSARIO

Adiabático. Dícese de los cuerpos impenetrables de calor.

Atmósfera libre. Parte de la atmósfera arriba de la capa límite planetaria, en la cual es despreciable el efecto de la rugosidad de la superficie de la tierra sobre el movimiento del aire, y en el cual el aire usualmente es tratado (dinámicamente), como un fluido ideal. La base de la atmósfera libre se toma como el nivel del viento geostrofico.

Bouyancia (flotación). Propiedad de un objeto, el cual es capaz de ascender a través de o permanecer suspendido libremente en un fluido comprensible tal como la atmósfera. Cuantitativamente es la razón (cociente) entre los pesos específicos del fluido y el objeto.

Calor específico. Es el número de calorías necesarias para elevar la temperatura de 1 g de una sustancia determinada en 1°C. El calor específico se mide en calorías por gramo y grado centígrado (cal/g°C)

Cortante de viento. Variación local del vector viento o cualquiera de sus componentes en una dirección dada.

Difusión. En meteorología, el intercambio de las parcelas del fluido (de aquí el transporte de las propiedades conservativas), entre regiones del espacio, en movimientos aparentemente azarosos de una escala tan pequeña para ser tratados por las ecuaciones de movimiento.

Ecuación de Langevin. Esta ecuación modela la fluctuación de la velocidad de una partícula como una combinación de dos partes una determinista y la otra aleatoria.

$$\frac{du}{dt} = -\alpha u + \beta \xi(t)$$

donde u es la velocidad, t el tiempo y $\xi(t)$ es ruido blanco gaussiano, el primer término del segundo miembro de la ecuación representa la parte determinista y el segundo representa la parte aleatoria.

Esta ecuación surgió como una alternativa al movimiento browniano y fue presentada por P. Langevin en un trabajo publicado en 1908.

Especie. Puede ser cualquier sustancia o materia, pero en el trabajo es utilizada para señalar exclusivamente a sustancias contaminantes.

Fuentes antropogénicas de contaminación. Cuando la polución se genera por actividades humanas, por ejemplo la sustancias emitidas por el flujo vehicular en las grandes ciudades.

Fuentes naturales de contaminación. Cuando la contaminación se genera por eventos naturales, como son: la erupción de volcanes, la descomposición de materia, la erosión, etc.

GLOSARIO

Isobaras. Líneas trazadas para determinar regiones de la atmósfera con igual presión.

Masa de aire. Cuerpo de aire muy amplio, cuyas propiedades se (a) establecieron mientras el aire estaba situado sobre una región particular de la superficie de la tierra (fuente de la masa de aire), y (b) sufre modificaciones específicas mientras se aleja de su región original. Una masa de aire frecuentemente se define como un amplio volumen de aire el cual es homogéneo en su extensión horizontal, particularmente en su distribución de humedad y temperatura; además, las variaciones verticales de temperatura y humedad son casi las mismas que sobre su extensión horizontal. El estancamiento de una masa de aire sobre una región fuente, permite que la distribución vertical de humedad y temperatura, alcance un equilibrio relativo con la superficie adyacente.

Masa de un contaminante. La masa de un contaminante se expresa como microgramos de contaminante por metro cúbico de aire. La fórmula es:

$$\frac{\text{microgramos}}{\text{metro cubico}} = \mu\text{g}/\text{m}^3$$

Meteorología. Ciencia que estudia los fenómenos de la atmósfera. Esto incluye no sólo la física, química y dinámica de la atmósfera, sino también los efectos directos de la atmósfera sobre la superficie de la tierra, océanos y la vida en general. Las metas de la meteorología son el completo entendimiento, predicción exacta y control artificial de los fenómenos.

Parcela de aire. Un cuerpo imaginario de aire a la cual se le asignan cualquiera o todas las propiedades básicas dinámicas y termodinámicas del aire atmosférico. Una parcela de aire es lo bastante pequeña de modo que las propiedades asignadas a ella son aproximadamente uniformes dentro de ella, de modo que al moverse con respecto a la atmósfera que la rodea no induce movimientos compensatorios.

Partes por millón (ppm). Para determinar la concentración de una sustancia química en un volumen se utilizan las partes por millón. Se divide el volumen en un millón de partes iguales. Cada millonésima parte de este volumen que correspondan a la sustancia de interés se considera una parte por millón de la sustancia.

$$\frac{1 \text{ volumen de contaminante gaseoso}}{10^6 \text{ volúmenes de (contaminante + aire)}} = 1 \text{ ppm}$$

Pluma o penacho. En calidad del aire es la figura que forman los gases emitidos por una chimenea o cualquier otra fuente de emisión.

Proceso estacionario. Es un proceso estocástico que conserva sus propiedades estadísticas a través del tiempo.

GLOSARIO

Proceso estocástico. Es una familia de variables aleatorias asociadas a un conjunto índice de números reales, de forma tal que a cada elemento del conjunto le corresponda una y sólo una variable aleatoria, esto se escribe como $\{Z(\tau); \tau \in T\}$, en donde T es el conjunto índice y $Z(\tau)$ es la variable aleatoria correspondiente al elemento τ de T.

Proceso markoviano. Se les conoce también como procesos sin memoria ya dado el estado presente del sistema, el comportamiento futuro es independiente de la historia pasada del proceso.

Proceso de ruido blanco. Es una sucesión de variables aleatorias $\{a_j\}$, cuya media es constante (generalmente se le considera igual a cero) y varianza σ^2 .

Radiosondeos. Medición de distintas variables meteorológicas en la vertical a través de un globo sonda lanzado que emite los resultados obtenidos y los cuales son recibidos y procesados por equipos especiales llamados receptores.

Receptor. Son lugares en una región de estudio donde se desea conocer la concentración de materia contaminante.

Termodinámica. Es la ciencia que estudia la transformación de la energía y las propiedades de las sustancias involucradas. La aplicación de los principios básicos de ésta ciencia a la atmósfera constituye lo que se llama termodinámica de la atmósfera.

Turbulencia. Perturbaciones en el comportamiento medio de ciertas variables, como es el caso del viento o la temperatura y cuyas propiedades únicamente pueden ser tratadas estadísticamente.

UTM (Universal Transverse Mercator). La naturaleza esférica de la Tierra provoca que al plasmar su representación en mapas, estos hagan una distorsión; durante siglos se ha trabajado para realizar dicha representación en mapas llamados de proyección, uno de tales sistemas de proyección es el **Universal Transverse Mercator (UTM)**, también conocido como sistema militar de coordenadas, es importante mencionar que proporciona un medio para localizar rápidamente puntos en un mapa con una razonable aproximación; por otro lado el sistema UTM es más fácil y sencillo de usar que el sistema convencional llamado también sistema civil o **grados|minutos|segundos**, basado en la localización de un punto de acuerdo a su latitud y longitud.

WBAN (Weather Bureau, Army). Es una clave para identificar las estaciones meteorológicas establecidas en todo el mundo, consta de cinco dígitos asignados por el National Climatic Data Center.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN