

**MODELACIÓN MATEMÁTICA DE LOS NIVELES DE CONTAMINACIÓN EN
LA CIUDAD DE GUADALAJARA, JALISCO, MÉXICO.
Parte II. MODELO NUMÉRICO DE TRANSPORTE DE
CONTAMINANTES Y SU ADJUNTO**

Valentina DAVYDOVA-BELITSKAYA¹, Yuri N. SKIBA², Alejandro MARTÍNEZ¹
y Sergei N. BULGAKOV¹

¹Instituto de Astronomía y Meteorología, Universidad de Guadalajara, Av. Vallarta 2602, S.J., Guadalajara 44130, Jalisco, México

²Centro de Ciencias de la Atmósfera, UNAM, Ciudad Universitaria, Coyoacán 04510 D.F., México

(Recibido septiembre 2000, aceptado marzo 2001)

Palabras clave: modelación matemática, transporte de contaminantes, método adjunto

RESUMEN

El impacto de las emisiones industriales sobre el área metropolitana de la ciudad de Guadalajara se estima por medio de las concentraciones promedio de un contaminante en dos zonas ecológicamente importantes. Se estudia la dependencia de estas estimaciones con el viento, las posiciones y las tasas de emisión de las plantas industriales. El estudio está basado en el uso de varias soluciones de dos modelos: el de transporte de contaminantes y su adjunto. Se muestra que las soluciones del modelo adjunto aportan información importante sobre el papel que cada fábrica juega en el proceso de contaminar una u otra zona ecológica. Tales soluciones se calculan con ayuda de esquemas en diferencias finitas basados en el método de separación, balanceados, absolutamente estables y de segundo orden de aproximación con respecto a todas las variables del problema.

Key words: mathematical modelling, pollution transport, adjoint method

ABSTRACT

The impact of industrial emissions on the Metropolitan Area of Guadalajara City is estimated by means of average pollution concentrations in two ecologically important zones of the area. The dependence of these estimates on the wind and emissions rates and positions of industrial plants is studied. The study is based on using solutions to the pollution transport model and its adjoint. It is shown that the adjoint model solutions provide valuable information on the role of each industrial plant in polluting one or another ecologically important zone. These solutions are calculated with balanced, absolutely stable 2nd-order finite-difference schemes based on the splitting method.

INTRODUCCIÓN

El trabajo actual representa la continuación de la investigación dedicada al estudio del problema de la modelación de los procesos de transporte de contaminantes en la Zona Metropolitana de Guadalajara

(Davydova 1993, Davydova y Skiba 1999, Davydova *et al.* 1999). Existen varios modelos matemáticos y numéricos para describir el problema de transporte y difusión de contaminantes atmosféricos (Berlyand 1975, Marchuk 1982, 1986, Penenko y Raputa 1982, 1983, Penenko y Aloyan 1985, Gavrilov y Gormatyuk 1989, Williamson

1992, Liu y Carroll 1996). En el presente trabajo se aplican dos modelos simples: el bidimensional de transporte de contaminantes y su adjunto (Skiba 1997). Para estimar la concentración media de contaminación en zonas ecológicamente importantes se usan dos tipos de estimaciones: las directas y las adjuntas. Las primeras dependen de la solución del modelo de transporte de contaminantes y aportarán un conocimiento completo sobre el impacto ambiental que produce cada contaminante en la región del estudio, pero existen situaciones en que dichas estimaciones no son cómodas ni económicas. Por ejemplo, cada vez que en un estudio se cambia por lo menos uno de los parámetros importantes tales como las tasas de emisión, la posición o la cantidad de plantas industriales, se requiere calcular repetidamente la nueva solución del modelo de transporte. Así, el uso de las estimaciones directas en este caso consume mucho tiempo de computación y por tanto genera los gastos significativos. A diferencia del modelo de transporte, el adjunto depende de la zona en donde se realiza el monitoreo de la calidad del aire, pero es independiente de los parámetros mencionados y, por lo tanto, las estimaciones adjuntas son muy convenientes para analizar la sensibilidad de los niveles de contaminación en la zona con respecto a variaciones en las tasas de emisión, en las posiciones y en la cantidad de plantas industriales.

En este trabajo se formulan el modelo de transporte de contaminantes y su adjunto y se introducen las estimaciones directas y adjuntas. Para ambos se desarrollan los correspondientes modelos numéricos (discretos) usando las diferencias finitas y los métodos de balance y de separación (Skiba 1993, 1997). Los esquemas numéricos obtenidos aproximan modelos continuos con el segundo orden respecto a los tamaños de malla (tanto temporal como espacial) y son absolutamente estables y balanceados. En la última sección se muestran y discuten resultados de los experimentos numéricos realizados con ambos modelos en la Zona Metropolitana de Guadalajara, en donde como datos de entrada se utilizan parámetros climatológicos y niveles de contaminación estimados y/o calculados en la primera parte del trabajo (Davydova *et al.* 1999).

PROBLEMA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

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

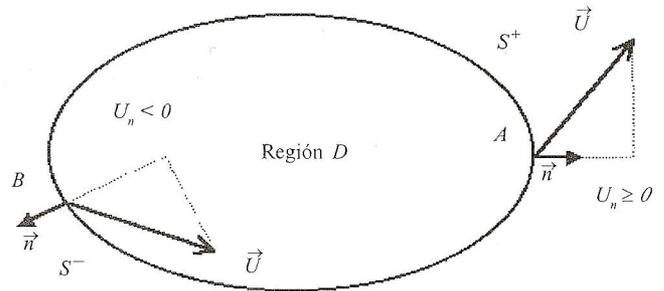


Fig. 1. Región de solución del problema de transporte

nante en la región D en un intervalo de tiempo $(0, T)$ se describe mediante la ecuación del transporte y difusión

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

donde μ es el coeficiente de difusión, ∇ es el gradiente bidimensional y el término $\sigma \phi$ con el coeficiente σ parametriza el decrecimiento del contaminante $\phi(r, t)$, o su extracción a causa de transformaciones químicas y fotoquímicas, depositación seca o húmeda (Stockwell y Calvert 1983, Boubel *et al.* 1994, Hicks *et al.* 1998). Para simplificar los modelos de transporte estos procesos complejos de decrecimiento frecuentemente se describen con una ley exponencial (Boubel *et al.* 1994, Manahan 1991, Seinfeld y Pandis 1998). Los experimentos numéricos de Shir y Shich (1974) también demuestran que la parametrización $\sigma \phi$ funciona satisfactoriamente en el caso de contaminantes tales como monóxido de carbono CO , bióxido de azufre (SO_2), plomo (Pb), carbono (C), etc. Nótese que en las zonas urbanas, CO se produce por las entidades que queman carbono o gas natural y las centrales eléctricas que consumen combustible de fósil producen 75% de SO_2 (Hill 1997, Hobbs 2000).

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

$$\frac{\partial}{\partial x} u + \frac{\partial}{\partial y} v = 0 \quad (2)$$

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

$$\phi(r, 0) = \phi^0(r) \quad (3)$$

y ahora se asignan las condiciones de frontera. Sea $U_n = U \cdot n$ la proyección de la velocidad U sobre el vector normal exterior n a la frontera S y dividimos S en dos partes

dependiendo de sí el flujo de contaminante entra a la región D ó sale de D , es decir, $S = S^+ + S^-$ donde S^+ contiene todos los puntos de S en los que $U_n \geq 0$ (punto A en la Fig.1), mientras que $U_n < 0$ en la parte complementaria S^- (punto B en la Fig. 1). Para la ecuación (1) se imponen las siguientes condiciones de frontera.

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial t} - U_n \phi = 0 \quad \text{en } S^-, \quad (4)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad \text{en } S^+ \quad (5)$$

La condición (4) significa que en la parte de la frontera D donde el viento ingresa a D , el flujo total del contaminante (generado por la difusión y la advección) es igual a cero, es decir, se supone que no existen fuentes de contaminación fuera de la región D . En la práctica, esta condición puede ser realizada extendiendo la región D con el fin de incluir en ésta todas las importantes fuentes de contaminación. La condición (5) dice que cuando el viento sale de la región D se desprecia el flujo turbulento en comparación con el flujo de advección $U_n \phi$ del contaminante. Estas condiciones de frontera fueron definidas por Marchuk (1986) para un problema bidimensional y generalizadas en el caso de tres dimensiones por Skiba (1993). Cuando no hay difusión ($\mu = 0$), la condición (4) se reduce a $\phi = 0$ (ausencia del contaminante sobre la frontera del flujo entrante), mientras que la condición (5) desaparece (Skiba y Adem 1995). Integrando la ecuación (1) en D y tomando en cuenta las condiciones (4)-(5) se obtiene la ecuación de balance.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi dr = \sum_{i=1}^I Q_i(t) - \int_D \sigma \phi dr - \int_{S^+} U_n \phi dS \quad (6)$$

Así pues, la concentración media del contaminante en el dominio D se incrementa debido a la presencia de las fuentes con tasas respectivas $Q_i(t)$ y decrece a causa de algunos procesos físicos y químicos ($\sigma > 0$) y flujo de advección saliente a través de la parte S^+ de la frontera. El modelo (1)-(5) es un problema bien formulado de acuerdo con Hadamard (1923), es decir, su solución ϕ existe, es única y depende continuamente de la condición inicial y de las tasas de emisión (Skiba y Parra-Guevara 2000).

Ahora considérese en la región D una zona de importancia ecológica Ω y defínase el funcional

$$J(\phi) = \frac{1}{\tau |\Omega|} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi(r,t) dr dt \quad (7)$$

donde $|\Omega|$ es el área de Ω . El funcional $J(\phi)$ representa la concentración promedio en la zona Ω y en el intervalo de tiempo $[T - \tau, T]$ del contaminante $\phi(r, t)$ y se denota como la estimación directa. Si la solución $\phi(r, t)$ del problema (1)-(5) es hallada entonces, el funcional (7) puede ser calculado para cualquier zona Ω . Se puede dividir la

región D en varias zonas Ω_i y calcular el funcional (7) para cada una de ellas. En particular, la zona Ω se reduce a un sólo punto cuando $|\Omega| \rightarrow 0$. En este sentido, las estimaciones directas pueden dar información completa sobre la contaminación del aire en toda la región D . Sin embargo, el estudio completo puede ser costoso y no es siempre necesario. A veces es suficiente monitorear los niveles de concentración del contaminante en tres o cuatro zonas, ubicadas en la región D y que son ecológicamente las más importantes.

PROBLEMA ADJUNTO

Ahora, se formula en el dominio $D \times (0, T)$ un modelo adjunto al problema (1)-(5). Con este fin se utiliza la definición del operador adjunto en un espacio de Hilbert y la identidad de Lagrange (Lyusternik y Sobolev 1964, Marchuk y Skiba 1976, 1990, Marchuk *et al.* 1996). La ecuación básica del modelo adjunto tiene la forma

$$-\frac{\partial}{\partial t} g - U \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot \mu \nabla g = P(r,t) \quad (8)$$

donde $P(r, t)$ es un forzamiento que será determinado posteriormente y todos los demás parámetros son iguales a los de (1). La construcción de la ecuación (8) se describe en detalle, por ejemplo, en Skiba *et al.* (1996). Si se asume que $P(r, t) = 0$ y $Q_i(t) \equiv 0$ para todos i y con la sustitución $t' = T - t$ se cambia en la ecuación (8) la dirección de tiempo (de $t = T$ a $t = 0$) entonces resulta que las ecuaciones homogéneas (1) y (8) difieren solamente en el signo de la velocidad U . Así la parte del flujo saliente S^+ (ó la parte del flujo entrante S^-) de la frontera S para la ecuación (1) en el mismo tiempo es la parte del flujo entrante S^- (la parte del flujo saliente S^+) para la ecuación (8). Por lo tanto las condiciones de frontera para el modelo adjunto se obtienen fácilmente de las condiciones (4) y (5):

$$\mu \frac{\partial g}{\partial t} = 0 \quad \text{en } S^- \quad (9)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial t} + U_n g = 0 \quad \text{en } S^+ \quad (10)$$

La ecuación (8) con las condiciones de frontera (9)-(10) se resuelve en dirección opuesta de tiempo (de $t = T$ a $t = 0$) usando la condición "inicial" nula en el momento $t = T$:

$$g(r, T) = 0 \quad \text{en } D \quad (11)$$

El modelo adjunto (8)-(11) también es un problema bien formulado de acuerdo con Hadamard (1923) (Skiba y Parra-Guevara 2000). Se nota que la solución $g(r, t)$ no es negativa en el dominio $D \times (0, T)$ si el forzamiento $P(r, t)$ no es negativo.

Con ayuda del problema adjunto, el funcional (7) se puede estimar de otra manera (Skiba 1997):

$$J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(r_i, t) Q_i(t) dt + \int_D g(r, 0) \phi^0(r) dr, \quad (12)$$

donde $g(r, t)$ es la solución del problema adjunto (8)-(11) hallada con el forzamiento

$$P(r, t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau |\Omega|}, & \text{si } (r, t) \in \Omega \times (T - \tau, T) \\ 0, & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (13)$$

La estimación adjunta de la concentración promedio del contaminante $\phi(r, t)$ en la zona Ω y en el intervalo de tiempo $[T - \tau, T]$ se hace con la fórmula (12) y es equivalente a la estimación directa (7). Sin embargo, a diferencia de (7), la estimación (12) muestra explícitamente la contribución de las tasas de emisión $Q_i(t)$ y de la contaminación inicial $\phi^0(r)$ en la concentración $J(\phi)$ del contaminante $\phi(r, t)$. Según (12), la contribución de la i -ésima tasa de emisión $Q_i(t)$ depende de los valores temporales $g(r, t)$ de la solución $g(r, t)$ calculados en el punto r_i (la ubicación de la i -ésima planta industrial), mientras que la contribución de la contaminación inicial $\phi^0(r)$ depende de los valores $g(r, 0)$ de la solución $g(r, t)$ en el momento $t=0$ en toda la región D . Por ejemplo, si para algún i , $g(r_i, t) = 0$ en todo el intervalo $(0, T)$, entonces las emisiones de la i -ésima fábrica no producen ningún impacto en la zona Ω ; y por el contrario, si los valores $g(r, t)$ son grandes en $(0, T)$, entonces las emisiones de la i -ésima fábrica tienen gran influencia en contaminar dicha zona. Debido a que el forzamiento (13) no es negativo, la solución $g(r, t)$ tampoco es negativa en $D \times (0, T)$. Así pues, se puede interpretar $g(r_i, t)$ y $g(r, 0)$ como funciones de peso (funciones de influencia ó funciones de información) en la estimación (12). Según (12), son de gran importancia los valores de $Q_i(t)$ y de $\phi^0(r)$ en los dominios en donde $g(r_i, t)$ y $g(r, 0)$ tienen valores grandes. Es preciso notar que al hallar la solución $g(r_i, t)$ del problema adjunto, no es necesario guardar en la memoria de una computadora todos sus valores, ya que la estimación (12) usa sólo los valores $g(r_i, t)$ y $g(r, 0)$. Además, según (13), el forzamiento $P(r, t)$ es nulo en el intervalo $(0, T - \tau)$. Por lo tanto, si el período $T - \tau$ es bastante largo, entonces $g(r, 0)$ se reduce a cero debido a disipación ($\sigma \neq 0, \mu \neq 0$) y la fórmula (12) se simplifica a:

$$J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(r_i, t) Q_i(t) dt. \quad (14)$$

En comparación con las estimaciones directas, las estimaciones adjuntas (12) y (14) son más económicas y convenientes en el estudio de la sensibilidad de la concentración $J(\phi)$ respecto a variaciones en $Q_i(t)$ y $\phi^0(r)$. En efecto, los valores $g(r_i, t)$ y $g(r, 0)$ una vez calculados, pueden ser guardados en la memoria de una computadora y utilizados repetidamente en la evaluación de $J(\phi)$ cada vez que se cambian las tasas de emisión $Q_i(t)$ y la conta-

minación inicial $\phi^0(r)$.

Un análogo discreto de la fórmula (14) usado en experimentos numéricos se obtiene de la manera siguiente. Se introduce en $(0, T)$ una malla bastante fina con tamaño Δt ($t_n = n \Delta t$; $t_0 = 0, t_N = T, n = 0, \dots, N$) y se aproxima (14) como

$$J(\phi) \cong \Delta t \sum_{i=1}^I \sum_{n=1}^N g(r_i, t_n) Q_i(t_n) \quad (15)$$

donde $g(r_i, t_n)$ y $Q_i(t_n)$ son valores promedios de las funciones $g(r_i, t)$ y $Q_i(t)$ dentro del intervalo (t_{n-1}, t_n) . Según (15), si para algunos i y n , el producto de $g(r_i, t_n)$ y $Q_i(t_n)$ es nulo ó pequeño, entonces dentro del intervalo (t_{n-1}, t_n) la contribución de la i -ésima fuente $Q_i(t_n)$ a $J(\phi)$ es nula ó muy insignificativa. Nótese que los valores $g(r_i, t_n)$ dependen tanto de la ubicación mutua de la zona Ω y las industrias como del viento U en la región D .

PROBLEMA DE TRANSPORTE DISCRETO Y SU ADJUNTO

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

Los esquemas y algoritmos numéricos utilizados para resolver el problema de transporte (1)-(5) y su adjunto son descritos detalladamente por Skiba (1997). Por lo tanto aquí se darán solamente resultados básicos. Usando (2) el operador A de la ecuación (1) puede ser descrito como $A = A_1 + A_2$ donde.

$$A_1 \phi = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (u \phi) + \frac{1}{2} u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma \phi - \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (16)$$

$$A_2 \phi = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} (v \phi) + \frac{1}{2} v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{1}{2} \sigma \phi - \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (17)$$

Con ayuda de (4)-(5) puede ser mostrado que cada uno de los operadores separados A_i ($i = 1, 2$) es positivamente semidefinido (Skiba 1993). El operador del problema (8)-(11) es adjunto al operador A y puede ser representado como $A^* = A_1^* + A_2^*$ donde

$$A_1^* g = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (u g) - \frac{1}{2} u \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma g - \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial g}{\partial x} \quad (18)$$

$$A_2^* g = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} (v g) - \frac{1}{2} v \frac{\partial g}{\partial y} + \frac{1}{2} \sigma g - \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial g}{\partial y} \quad (19)$$

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

$$(A_1^h \phi)_{ij} = \frac{u_{i+1,j} \phi_{i+1,j} - u_{ij} \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} + \frac{1}{2} \sigma \phi_{ij} - \frac{\mu}{(\Delta x)^2} [\phi_{i+1,j} - 2\phi_{ij} + \phi_{i-1,j}] \quad (20)$$

$$(A_2^h \phi)_{ij} = \frac{v_{i,j+1} \phi_{i,j+1} - v_{ij} \phi_{i,j-1}}{2\Delta y} + \frac{1}{2} \sigma \phi_{ij} - \frac{\mu}{(\Delta y)^2} [\phi_{i,j+1} - 2\phi_{ij} + \phi_{i,j-1}] \quad (21)$$

La ecuación de continuidad se aproxima como

$$\frac{u_{i+1,j} - u_{ij}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1} - v_{ij}}{\Delta y} = 0 \quad (22)$$

Las aproximaciones (20)-(22) son de segundo orden con respecto a los tamaños de malla Δx y Δy . Las matrices adjuntas $(A_i^h)^*$ se obtienen de (20) y (21) al sustituir u , v y ϕ por $-u$, $-v$ y g , respectivamente.

Ahora se muestra brevemente la aproximación de las condiciones de frontera. Supóngase, por ejemplo, que $M = (x_{1/2,j}, y_j)$ es el punto de frontera del dominio de malla y sea u_j un valor positivo de la u -componente de la velocidad de viento en el punto M . Entonces $U_n = -u_j < 0$, es decir, el punto M pertenece a S y las condiciones (4) y (9) se aproximan como

$$\mu \frac{\phi_{0j} - \phi_{1j}}{\Delta x} + u_{1j} \frac{\phi_{0j} + \phi_{1j}}{2} = 0, \quad g_{0j} = g_{1j} \quad (23)$$

Análogamente, se aproximan las condiciones (4) y (5), (9) y (10) en todos los puntos de la frontera.

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

ESQUEMAS NUMÉRICOS

Dentro de cada intervalo doble (t_{n-1}, t_{n+1}) de la malla

temporal, el esquema numérico para el problema de transporte consiste de las cinco ecuaciones que se resuelvan en el orden mencionado:

$$\begin{aligned} \Phi \left[n - \frac{3-i}{3} \right] - \Phi \left[n - \frac{4-i}{3} \right] = & \\ - \frac{\tau}{2} A_i^h \left(\Phi \left[n - \frac{3-i}{3} \right] + \Phi \left[n - \frac{4-i}{3} \right] \right) & \quad (i = 1, 2) \\ \Phi \left[n + \frac{1}{3} \right] - \Phi \left[n - \frac{1}{3} \right] = & 2\tau Q[n] \end{aligned} \quad (24)$$

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

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

$$\begin{aligned} G \left[n + \frac{3-i}{3} \right] - G \left[n + \frac{4-i}{3} \right] = & \\ - \frac{\tau}{2} (A_i^h)^* \left(G \left[n + \frac{3-i}{3} \right] + G \left[n + \frac{4-i}{3} \right] \right) & \quad (i = 1, 2) \\ G \left[n - \frac{1}{3} \right] - G \left[n + \frac{1}{3} \right] = & 2\tau P[n] \end{aligned} \quad (25)$$

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

en donde Φ y G son los vectores que aproximan los valores de las funciones (soluciones exactas) ϕ y g en los puntos de malla. Es preciso notar que de ellos, sólo los vectores $\Phi[n+1]$, $\Phi[n-1]$, $G[n+1]$ y $G[n-1]$ representan las soluciones numéricas, mientras que los de índices fraccionales son vectores auxiliares del método de separación. Los vectores $Q[n]$ y $P[n]$ aproximan los valores de las funciones Q y P en los puntos de malla en el momento central t_n del intervalo (t_{n-1}, t_{n+1}) . En cada intervalo (t_{n-1}, t_{n+1}) , el algoritmo es absolutamente estable, es decir, estable para cada τ :

$$\begin{aligned} \|\Phi[n+1]\| \leq \|\Phi[n-1]\| + 2\tau \|Q[n]\|, \\ \|G[n-1]\| \leq \|G[n+1]\| + 2\tau \|P[n]\| \end{aligned} \quad (26)$$

Además, en el caso particular (cuando $Q[n] = 0$, $P[n] = 0$, $\mu = 0$, $\sigma = 0$ y $U_n = 0$ en toda la frontera S), los esquemas (24) y (25) poseen dos leyes de conservación (Skiba 1997):

$$\begin{aligned} \|\Phi[n+1]\| &= \|\Phi[n-1]\|, \\ \|G[n-1]\| &= \|G[n+1]\| \end{aligned} \tag{27}$$

y

$$\begin{aligned} \sum_i \Phi_i[n+1]V_i &= \sum_i \Phi_i[n-1]V_i, \\ \sum_i G_i[n-1]V_i &= \sum_i G_i[n+1]V_i \end{aligned} \tag{28}$$

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

Cada una de las ecuaciones unidimensionales de los esquemas (24) y (25) se resuelve sin iteraciones utilizando la factorización LU para una matriz tridiagonal (Skiba 2001).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En los experimentos numéricos como primera etapa se seleccionaron dos zonas ecológicamente significativas (Fig. 2): el “Parque Colomos” (zona PC) y el “Cen-

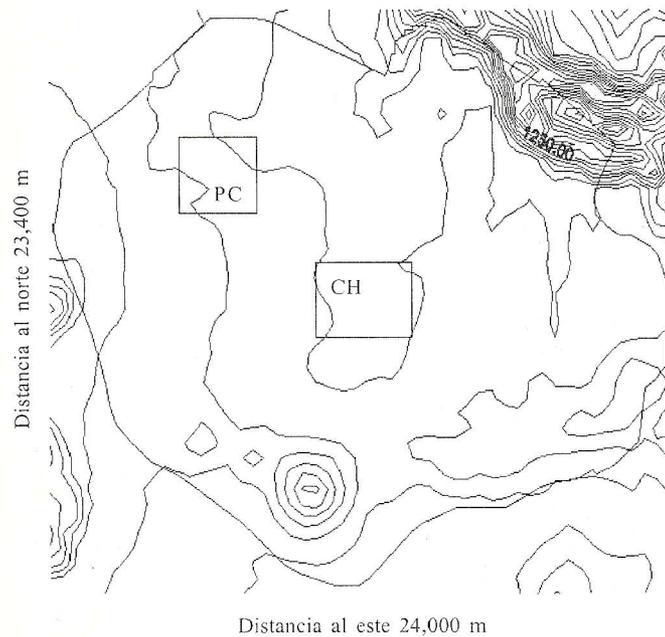


Fig. 2. Plano de la Cd. de Guadalajara con la ubicación de dos zonas ecológicamente importantes, Parque Colomos (PC) y Centro Histórico (CH)

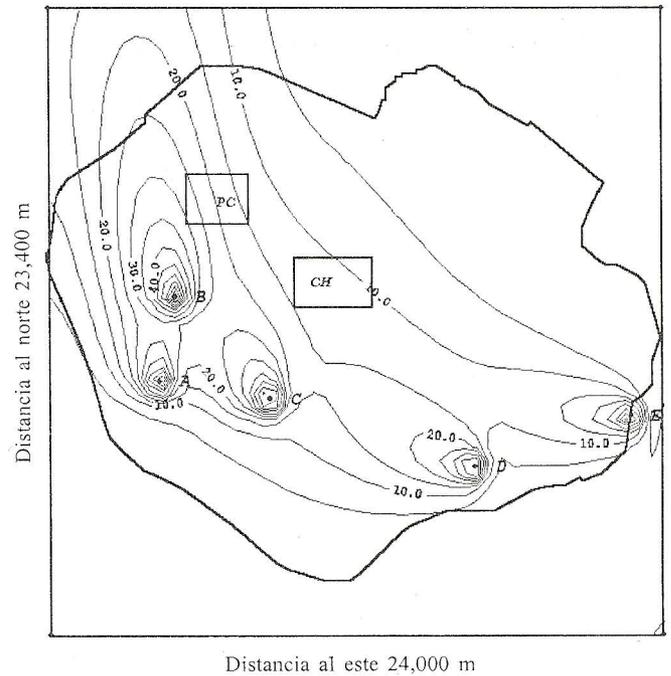


Fig. 3. Isolíneas de la solución del problema (1)-(5) en la ZMG para el viento tipo I (temporada húmeda), $t = 90$ min. Los puntos A, B, C, D , y E indican la ubicación de las cinco fábricas que contaminan significativamente las zonas PC y CH (A – fábrica en Zapopan Sur, B – aceitera próxima a la Plaza de México, C – fábrica en la Zona Industrial, D – fábrica en Tlaquepaque, E – ladrillera en Loma Dorada, Tonalá)

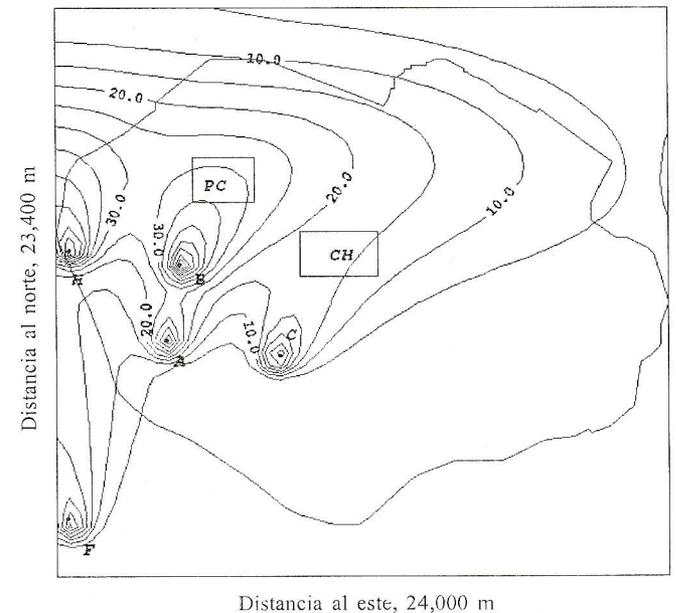


Fig. 4. Isolíneas de la solución del problema (1)-(5) en la ZMG para el viento tipo II (temporada seca), $t = 90$ min. Los puntos A, B, C, F y H indican la ubicación de las cinco fábricas que contaminan significativamente las zonas PC y CH (A – fábrica en Zapopan Sur, B – aceitera próxima a la Plaza de México, C – fábrica en la Zona Industrial, F – fábrica en suroeste de la ZMG, H – fábrica en la Ciudad Granja)

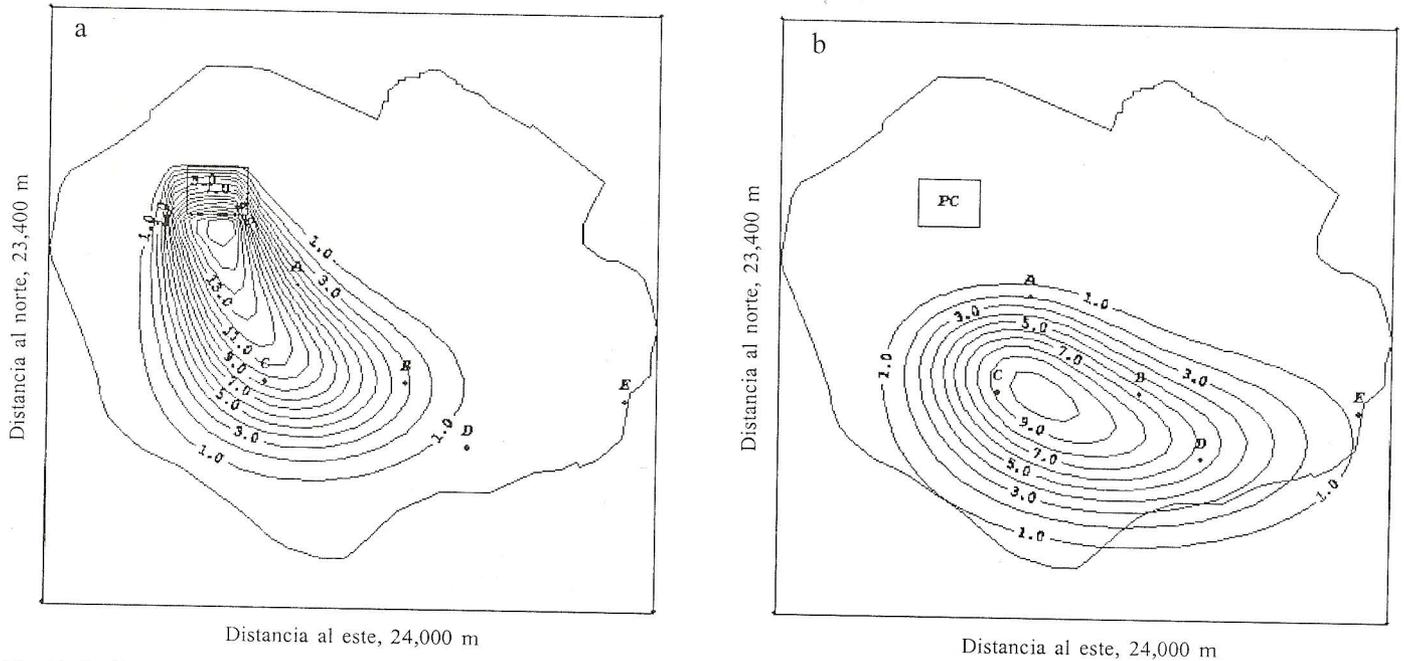


Fig. 5. Isolíneas de la solución del problema adjunto (8)-(11) para la zona PC y el viento tipo I (temporada húmeda) en los momentos $t = T - 60$ min (a) y $t = T - 90$ min (b)

tro Histórico” (zona CH). El “Parque Colomos” es la principal área verde de la zona urbana en donde la ciudadanía desarrolla actividades deportivas y de turismo, mientras que el “Centro Histórico” es la zona turística, comercial y de mayor densidad de población que cuenta con monumentos, edificios y otros atractivos turísticos. Debido a graves problemas de contaminación atmosférica, estos monumentos históricos sufren serios procesos de corrosión y como consecuencia, requieren gran apoyo económico para su mantenimiento y restauración. Por lo tanto, es muy importante definir las fuentes básicas de contaminantes que afectan estas zonas y controlar sus emisiones con el fin de evitar situaciones ecológicas severas.

Uno de los objetivos de este trabajo fue desarrollar un modelo numérico para resolver el problema (1)-(5) de transporte de bióxido de azufre (SO_2). En los experimentos numéricos se usaron dos tipos del viento climático para la ZMG: el viento tipo I característico para la temporada húmeda (junio–septiembre) y el viento tipo II característico para la temporada seca (octubre–mayo). Los campos de ambos tipos del viento fueron obtenidos basándose en los datos del archivo climatológico de la Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG) creado en un período de 1881 a 1999 (Davydova y Skiba 1999, Davydova *et al.* 1999). El coeficiente $\sigma = \sigma_s + \sigma_h + \sigma_o$ del modelo de transporte y difusión de SO_2 toma en cuenta las tres velocidades (de depositación seca y húmeda y de oxidación), considerando que $\sigma_s \gg \sigma_h$ para la temporada seca, y $\sigma_s \ll \sigma_h$ para la temporada húmeda (Stockwell y Calvert 1983, Manahan 1991, Seinfeld and Pandis 1998). La

velocidad de depositación seca para SO_2 tiene la variación diurna: de 0.5 a 1.2 cm/s según Boubel *et al.* (1994), y de 0.5 a 1.0 cm/s según Hidy (1994). Para los experimentos que fueron realizados en este trabajo se asumió el valor de la velocidad media de depositación seca igual a 1.0 cm/s (Seinfeld and Pandis, 1998). La complejidad de estimación de la velocidad de depositación húmeda consiste de una variedad de parámetros

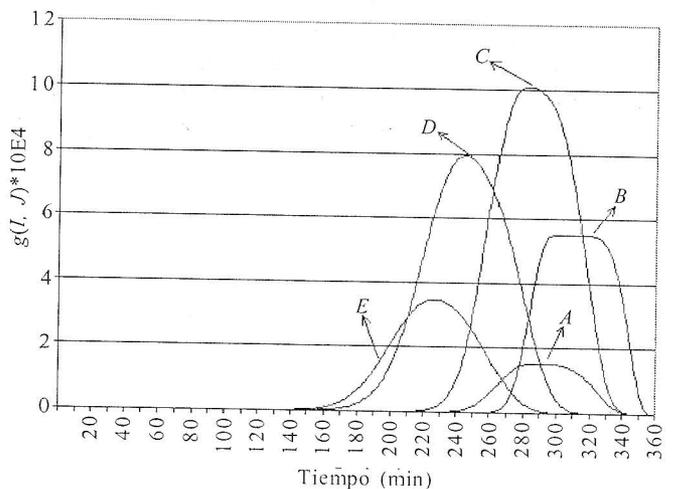


Fig. 6. Comportamiento temporal de las funciones de peso $g(r, t)$ para la zona PC y el viento tipo I (A – fábrica en Zapopan Sur, B – acitera próxima a la Plaza de México, C – fábrica en la Zona Industrial, D – fábrica en Tlaquepaque, E – ladrillera en Loma Dorada, Tonalá)

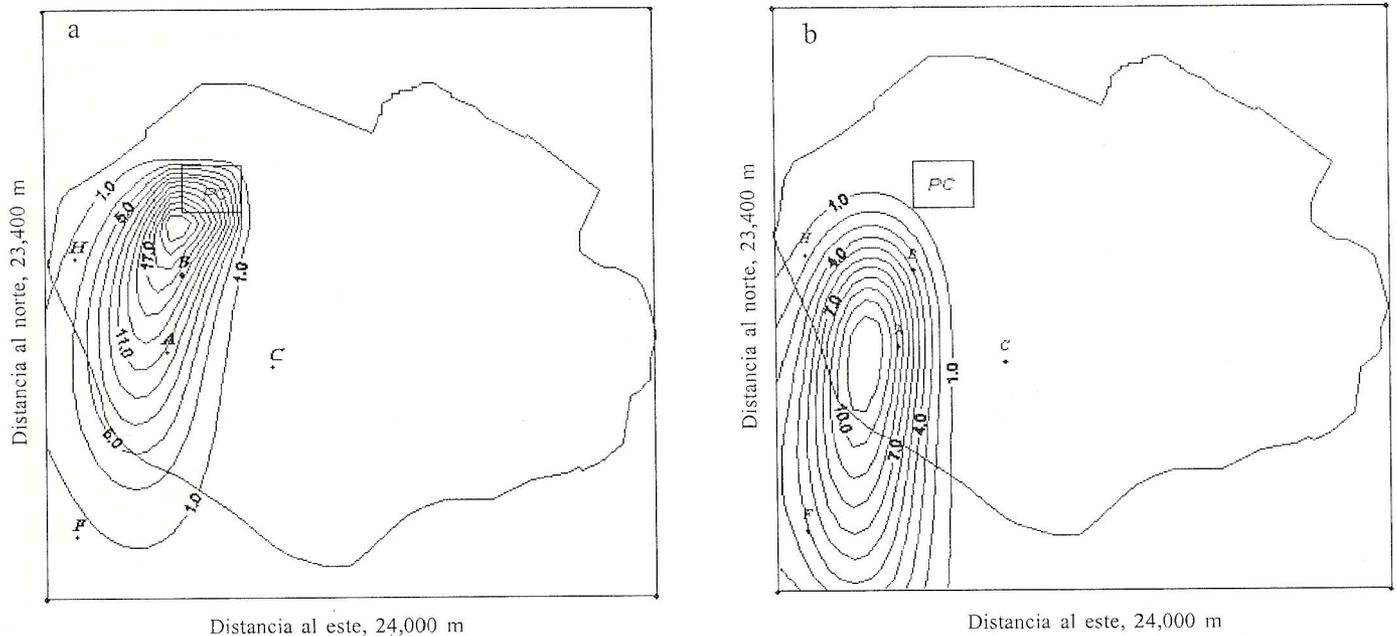


Fig. 7. Isolíneas de la solución del problema adjunto (8) - (11) para la zona *PC* y el viento tipo II (temporada seca) en los momentos $t = T - 60 \text{ min}$ (a) y $t = T - 90 \text{ min}$ (b)

involucrados: solubilidad del contaminante en agua, condiciones meteorológicas presentes (niebla, lluvia o nieve), intensidad de precipitación observada, humedad relativa, intercepción de gases en las nubes y altura de la capa baja de nubes (Chamberlain 1953, Seinfeld and Pandis 1998). Considérese aquí el valor promedio aproximado del coeficiente σ_h . Bajo las condiciones de tropósfera en fase gaseosa, el SO_2 reacciona con hidróxido ($\text{OH}\cdot$) formando trióxido de azufre y posteriormente ácido sulfúrico. Es la reacción dominante en transformaciones de bióxido de azufre que tienden a disminuir su concentración (Stockwell and Calvert 1983). Resumiendo, en los experimentos se usa el coeficiente σ que corresponde a la tasa de extracción de 8-9 % por hora para la temporada seca y de 13-14 % por hora para la temporada húmeda.

Las isolíneas de la solución $\phi(r, t)$ del problema de transporte (1)-(5) en el momento $t = 90 \text{ min}$ se presentan en la Fig.3 (para el viento tipo I, temporada húmeda) y en la Fig.4 (para el viento tipo II, temporada seca). En cada experimento fueron elegidas cinco fábricas como fuentes de SO_2 . Las ubicaciones de las fábricas se indican en las figuras con los puntos *A*, *B*, *C*, *D*, *E*, *F* y *H*. Se puede observar que durante cada temporada, las emisiones afectan de manera importante a las zonas *PC* y *CH* y es posible notar que en presencia de las fuentes elegidas, la zona *PC* resulta más contaminada que la *CH*.

Es de gran interés e importancia contar con información sobre la contribución de cada fuente (fábrica) en el nivel promedio de contaminación $J(\phi)$ en las zonas *PC* y *CH*, que es difícil hacer mediante el modelo directo (1)-

(5). Sin embargo, es bastante fácil calcular dicha contribución mediante soluciones del modelo adjunto (8)-(11) usando las fórmulas (12) ó (14). Con este fin, se hallan soluciones del modelo adjunto tanto para la zona *PC* como para la *CH*. Es necesario recordar que el modelo adjunto se corre en la dirección de tiempo opuesta (es decir, del momento "final" $t = T$ al momento "inicial" $t = 0$). En la Fig.5, se presentan isolíneas de la solución $g(r, t)$ del problema adjunto (8)-(11) calculada para la zona *PC* con el viento tipo I para los momentos $t = T - 60 \text{ min}$ (Fig.5a)

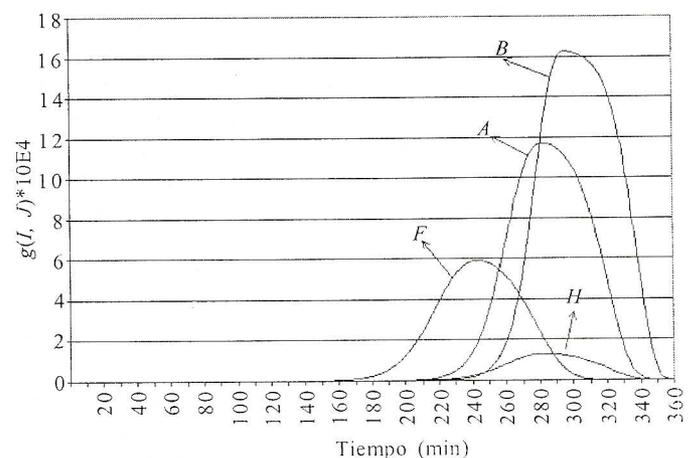


Fig. 8. Comportamiento temporal de las funciones de peso $g(r, t)$ para la zona *PC* y el viento tipo II (*A* - fábrica en Zapopan Sur, *B* - aceitera próxima a la Plaza de México, *F* - fábrica en suroeste de la ZMG, *H* - fábrica en la Ciudad Granja)

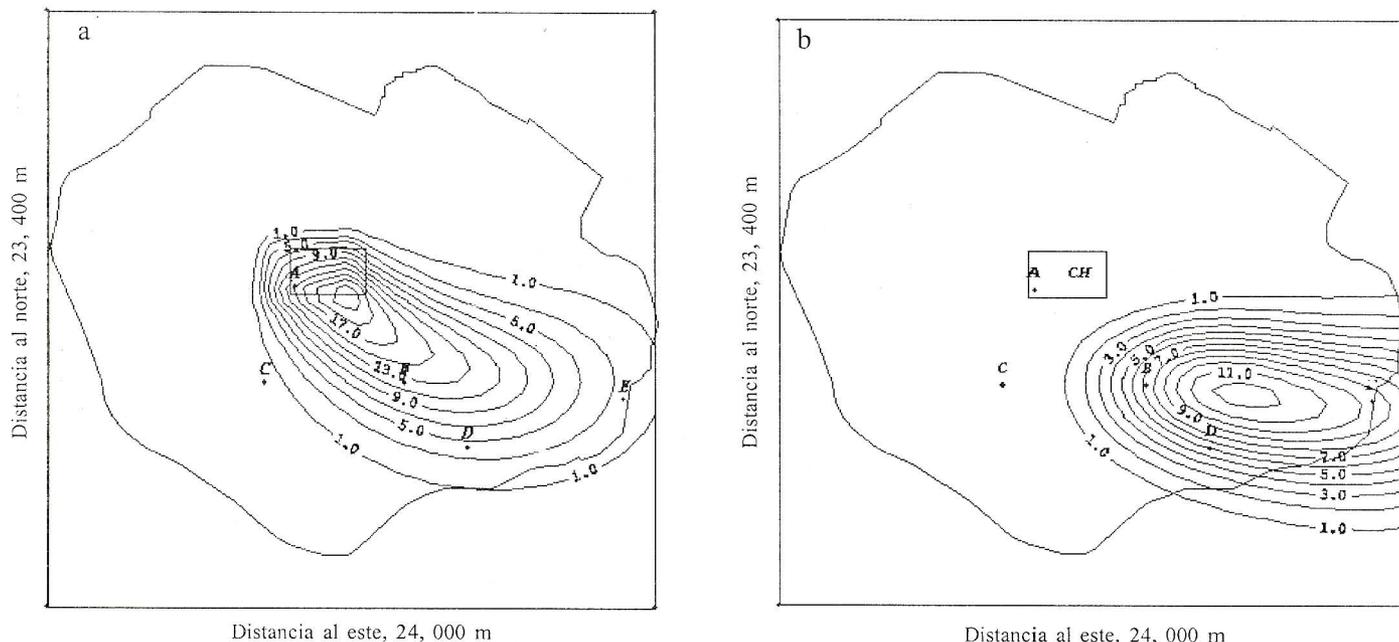


Fig. 9. Isolneas de la solución del problema adjunto (8) - (11) para la zona CH y el viento tipo I (temporada húmeda) en los momentos $t = T - 60 \text{ min}$ (a) y $t = T - 90 \text{ min}$ (b)

y $t = T - 90 \text{ min}$ (Fig.5b). Para el viento tipo II, las isóneas de la solución correspondiente $g(r, t)$ en los mismos dos momentos se presentan en Fig.7a,b. Según las fórmulas (12) y (14), el nivel de contaminación en las zona PC (ó en la zona CH) depende de la tasa de emisión $Q_i(t)$ de la i -ésima fábrica a través de los valores $g(r_i, t)$ de la solución del modelo adjunto en el punto de ubicación r_i de la fábrica. Así, para cada i ($i=1, 2, \dots, N$), función no negativa $g(r_i, t)$ sirve en la fórmula (12) como una función de peso para la tasa de emisión $Q_i(t)$ y su comportamiento temporal es de gran importancia para determinar las fábricas que contaminan más la zona elegida. Las curvas en las figuras 6 y 8 muestran el comportamiento temporal de dichas funciones de peso $g(r_i, t)$ para cada fábrica. Se puede notar que para cada r_i , la función $g(r_i, t)$ varía con el tiempo y es distinto del cero sólo en cierto intervalo de tiempo. Se puede observar que la contribución de una u otra fábrica en la contaminación de la zona PC depende del viento. Por ejemplo, se deduce de la Fig.6 que dentro de la temporada húmeda, la fábrica C ubicada en la Zona Industrial contamina la zona PC más que otras, mientras que la fábrica A ubicada en Zapopan Sur contamina menos que otras. La figura 8 muestra que dentro de la temporada seca, la fábrica que contamina más de todo la zona PC es la B ubicada cerca de la Plaza de México y la fábrica H ubicada en la Ciudad Granja contamina menos que todas. Así, las emisiones de la fábrica A (ó H) prácticamente no contribuyen en el funcional (12) para la zona PC dentro de la temporada húme-

da (temporada seca).

También, las figuras 6 y 8 muestran que todas las funciones de peso tienen valores nulos dentro del intervalo (0, 160), es decir, un contaminante transportado por los vientos alcanza la zona PC después de un período de casi 3 horas a partir del momento de su emisión. Este período cambia de una fábrica a otra y depende

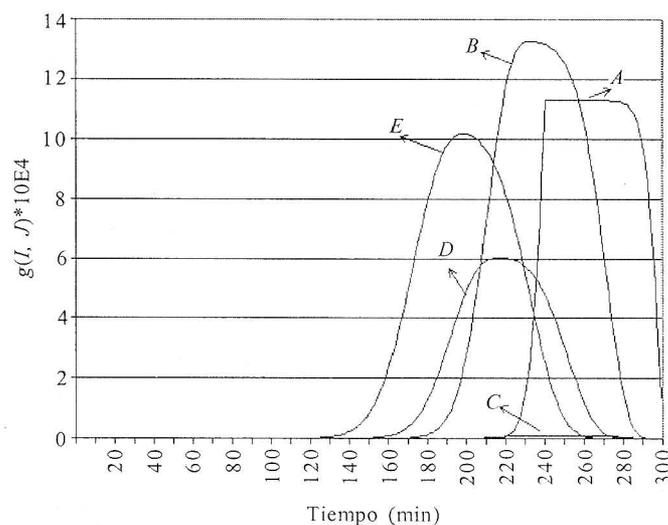


Fig. 10. Comportamiento temporal de las funciones de peso $g(r_i, t)$ para la zona CH y el viento tipo I (A - fábrica en el Centro Histórico, B - fábrica en Miravalle, C - fábrica en la Zona Industrial, D - fábrica en Tlaquepaque, E - ladrillera en la zona Dorada, Tonalá)

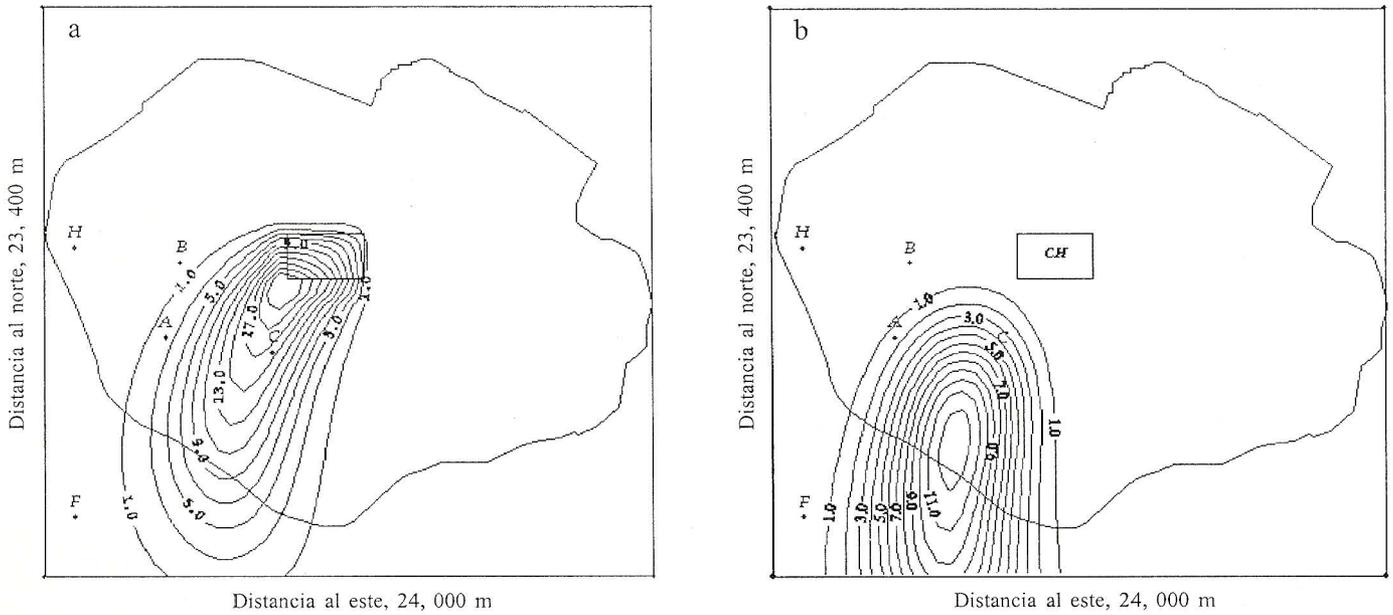


Fig. 11. Isolíneas de la solución del problema adjunto (8) - (11) para la zona *CH* y el viento tipo II (temporada seca) en los momentos $t = T - 60$ min (a) y $t = T - 90$ min (b)

de la dirección de los vientos y de la ubicación de la fábrica.

Para la zona *CH* (“Centro Histórico”), isolíneas de la solución $g(r, t)$ del problema adjunto (8)-(11) se presentan en la **Fig.9** para los vientos del tipo I (temporada húmeda) y en la **Fig.11** para los vientos del tipo II (temporada seca). Las **figuras 10** y **12** muestran el comportamiento de las funciones de peso para las fábricas marcadas en las **figuras 9** y **11**. Se puede observar que para la temporada húmeda, la fábrica *C* no contamina la zona *CH*, ya que su función de peso es

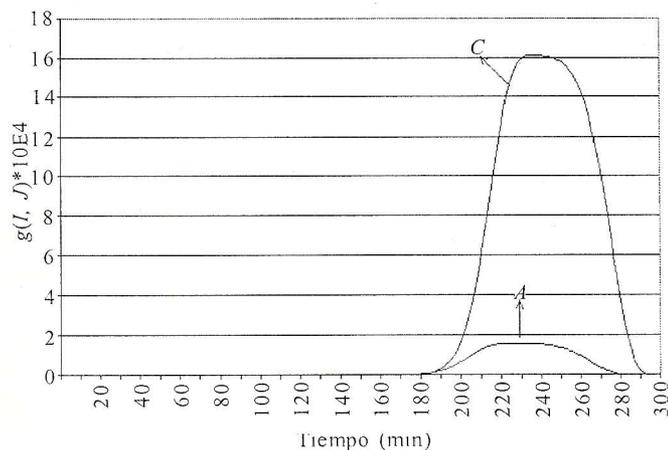


Fig. 12. Comportamiento temporal de las funciones de peso $g(r, t)$ para la zona *CH* y el viento tipo II (*A* – fábrica en Zapopan Sur, *C* – fábrica en la Zona Industrial)

prácticamente nula durante todo el período (véase la línea *C* en la **Fig.10**), mientras que las fábricas *B*, *A* y *E* son responsables por la contaminación de la zona. A su vez, para la temporada seca, de las cinco fábricas sólo las *A* y *C* contaminan la zona *CH*, ya que las funciones de peso para las otras tres fábricas (*B*, *H* y *F*) tienen valores prácticamente nulos dentro de todo el período $(0, T)$. Además, la **figura 12** muestra que la fábrica *C* juega el papel principal, porque su función de peso tiene valores dominantes. Así, las soluciones del modelo adjunto proporcionan información tanto cualitativa como cuantitativa sobre la contribución de cada fábrica en el nivel de contaminación de la zona. Dicha información es muy útil para estimar la situación ecológica en la ZMG y para aplicar las estrategias apropiadas de control de las emisiones industriales (Parra-Guevara y Skiba 2000).

AGRADECIMIENTOS

Los autores de este trabajo agradecen al Ing. Ramón González Núñez, Director de la Comisión Estatal de Ecología y en general a todo el personal de la RAMA de COESE por el apoyo brindado en el proceso del trabajo. La investigación fue apoyada por el proyecto SIMORELOS (CONACyT, México), el proyecto IN122098 de PAPIIT (UNAM, México), el proyecto 32247-T (CONACyT, México), el proyecto Silicon Graphics-UNAM SC-011800 (Dirección de Cómputo, UNAM, México) y el Sistema Nacional de Investigadores (SNI, México).

REFERENCIAS

- Berlyand M.E. (1975). *Modern problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere*. Gidrometeoizdat, Leningrad (en Ruso).
- Boubel R.W., Fox D.L., Bruce T.D. y Stern A.C. (1994). *Fundamentals of air pollution*. Academic Press, San Diego.
- Chamberlain A.C. (1953). *Aspects of travel and deposition of aerosols and vapor clouds*. AERE Harwell, Report R1261 HMSO, Londres.
- Crank J. y Nicolson P. (1947). A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type. *Proc. Cambridge Philos. Soc.* 43, 50-67.
- Davydova V. (1993). Análisis de las inversiones térmicas en Guadalajara. *Horizonte* 337, 8-12.
- Davydova-Belitskaya V. y Skiba Yu. N. (1999). Climate of Guadalajara City (Mexico); its variation and change within latest 120 years. *World Resour. Rev.* 11, 258-270.
- Davydova-Belitskaya V., Skiba Yu. N., Bulgakov S.N. y Martínez A.Z. (1999). Modelación matemática de los niveles de contaminación en la Cd. de Guadalajara, Jalisco, México. Parte I. Microclima y monitoreo de la contaminación. *Rev. Int. Contam. Ambient.* 15, 103-111.
- Gavrilov V.P. y Gormatyuk Yu. K. (1989). Pollutant dispersion from stationary sources in the surface layer of the atmosphere. *Sov. Meteorol. Hydrol.* 2, 28-37.
- Hadamard J. (1923). *Lectures on Cauchy's problems in linear partial differential equations*. Dover.
- Hicks B.B., Meyers T.P. y Baldocchi D.D. (1998). Aerometric measurement requirements for quantifying dry deposition. En: *Principles of Environmental Sampling* (L.H. Keith, Ed.) ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, pp. 297 - 315.
- Hidy G.M. (1994). *Atmospheric sulfur and nitrogen oxides*. Academic Press, San Diego.
- Hill M.K. (1997). *Understanding of environmental pollution*. Cambridge, Cambridge University Press.
- Hobbs P.V. (2000). *Introduction to atmospheric chemistry*. Cambridge, Cambridge University Press.
- Liu M. y Carroll J.J. (1996). A high-resolution air pollution model suitable for dispersion studies in complex terrain. *Mon. Wea. Rev.* 124, 2396-2409.
- Lyusternik L. y Sobolev V. (1964). *Elements of functional analysis*. Ungar, Nueva York.
- Manahan S.E. (1991). *Environmental chemistry*. Lewis Publisher, Chelsea.
- Marchuk G.I. y Skiba Yu. N. (1976). Numerical calculation of the conjugate problem for a model of the thermal interaction of the atmosphere with the oceans and continents. *Izvestiya, Atmosph. Oceanic Phys.* 12, 279-284.
- Marchuk G.I. (1982). Mathematical issue of industrial effluent optimization. *J. Meteor. Soc. Japan* 60, 481-485.
- Marchuk G.I. (1986). *Mathematical models in environmental problems*. Elsevier, New York.
- Marchuk G.I. y Skiba Yu. N. (1990). Role of adjoint functions in studying the sensitivity of a model of the thermal interaction of the atmosphere and ocean to variations in input data. *Izvestiya, Atmosph. Oceanic Phys.* 26, 335-342.
- Marchuk G.I. (1995). *Adjoint equations and analysis of complex systems*. Kluwer, Dordrecht.
- Marchuk G.I., Agoshkov V.I. y Shutyaev V.P. (1996). *Adjoint equations and perturbation algorithms in nonlinear problems*. CRC Press, Boca Raton, Nueva York.
- Parra-Guevara D. y Skiba Yu. N. (2000). Transport of industrial pollutions. Part II: Control of industrial emissions. *Environ. Model. Assess.* 5, 177-184.
- Penenko V.V. y Raputa V.F. (1982). Experiment planning in inverse problems of pollutant transport. *Sov. Meteorol. Hydrol.* 8, 28-35.
- Penenko V.V. y Raputa V.F. (1983). Some models for optimizing the operation of the atmospheric - pollution sources. *Sov. Meteorol. Hydrol.* 2, 46-54.
- Penenko V.V. y Aloyan A.E. (1985). *Models and methods for problems of environmental protection*. Nauka, Novosibirsk (en Ruso).
- Seinfeld J.H. y Pandis S.N. (1998). *Atmospheric chemistry and physics. From air pollution to climate change*. Wiley, Nueva York.
- Shir C.C. y Shich L.J. (1974). A generalized urban air pollution model and its application to the study of SO₂ distributions in the St. Louis Metropolitan Area. *J. Appl. Meteorol.* 13, 185-204.
- Skiba Yu. N. (1993). Balanced and absolutely stable implicit schemes for the main and adjoint pollutant transport equations in limited area. *Rev. Int. Contam. Ambient.* 9, 39-51.
- Skiba Yu. N. y Adem J. (1995). A balanced and absolutely stable numerical thermodynamic model for closed and open oceanic basins. *Geofis. Int.* 34, 385-393.
- Skiba Yu. N., Adem J. y Morales-Acoltzi T. (1996). Numerical algorithm for the adjoint sensitivity study of the Adem ocean thermodynamic model. *Atmósfera* 9, 147-170.
- Skiba Yu. N. (1997). Air pollution estimates. *World Resour. Rev.* 9, 542-556.
- Skiba Yu. N. y Parra-Guevara D. (2000). Industrial pollution transport. Part I: Formulation of the problem and air pollution estimates. *Environ. Model. Assess.* 5, 169-175.
- Skiba Yu. N. (2001). *Introducción a los métodos numéricos*. UNAM, México.
- Stockwell W.R. y Calvert J.G. (1983). The mechanism of HO - SO₂ reaction. *Atmos. Environ.*, 17, 2231 - 2235.
- Williamson D.L. (1992). Review of numerical approaches for modeling global transport. En: *Air pollution modelling and its application IX* (H. van Drop and G. Kallos, Eds.), Plenum Press, Nueva York, Vol. 17, pp. 377-394.