

# *Química Atmosférica*

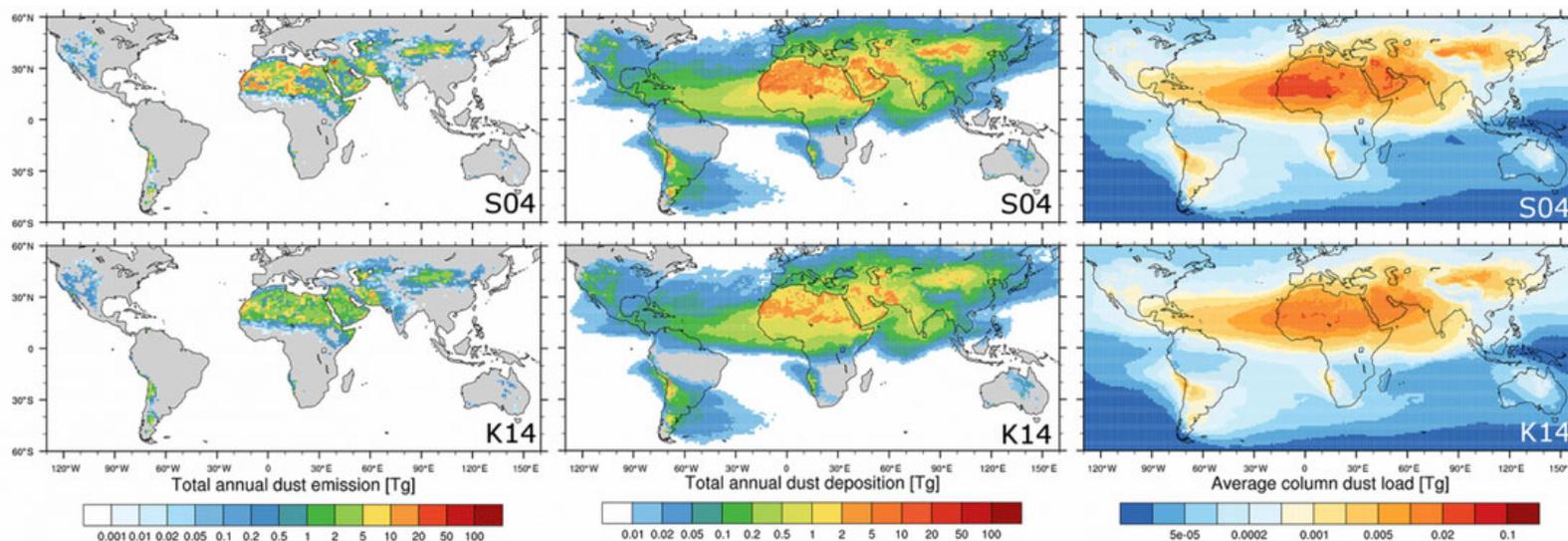
## 5. Métodos de simulación.

a) Métodos gaussianos de dispersión de contaminantes.

b) Modelo de caja EKMA.

## Métodos de simulación

Debido a que la dispersión de contaminantes atmosféricos es un proceso complejo, los fenómenos que se desarrollan en la atmósfera no son controlables ni reproducibles completamente en laboratorio. Es por ello que los modelos de dispersión de contaminantes se han convertido en una herramienta imprescindible en el estudio de la contaminación atmosférica.



Ejemplo de distribución de polvo mineral a escala global realizado con el modelo MONARCH. / Martina Kloose, Oriol Jorba et al / *Geosci. Model Dev.*

## Métodos de simulación

Los modelos de calidad del aire requieren la siguiente información:

- Ubicación geográfica de las fuentes
- La concentración de los contaminantes emitidos
- Estimaciones de dispersión
- Condiciones meteorológicas

Y dependen de factores como:

- Temperatura
- Turbulencia atmosférica
- La velocidad del viento
- Presión atmosférica
- Estabilidad
- Topografía

Los datos varían dependiendo de la complejidad de los modelos empleados.

## Métodos de simulación

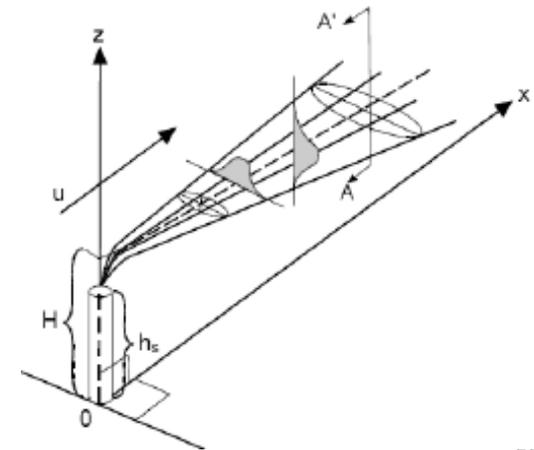
## TIPOS DE MODELOS

Tipos básicos de modelos existentes:

-*Físicos*: A partir de experimentos de laboratorio a pequeña escala, tratan de obtener representaciones globales o parciales del fenómeno (Ej. Túneles de viento).

-*Matemáticos*: basados en ecuaciones algebraicas y/o diferenciales, que describen los aspectos físicos y químicos del problema. Pueden separarse en dos grupos, los *modelos determinísticos* basados en ecuaciones matemáticas y los *modelos empíricos*, basados en relaciones estadísticas y empíricas entre los datos de contaminación y factores que influyen en ella.

Según el tratamiento de las ecuaciones de transporte, pueden clasificarse en: (i) gaussianos, (ii) eulerianos y (iii) lagrangianos. Los gaussianos son los más usados para contaminación atmosférica y asumen que la distribución de la concentración de contaminantes dentro del penacho tiene una distribución gaussiana.



Modelos eulerianos: Una aproximación estrictamente matemática para modelar contaminación ambiental. El área de estudio se divide en un número de celdas (cuadrícula o *grid*) verticales y horizontales. La concentración promedio del contaminante en cada celda es calculada a cada instante de tiempo.

Aunque inicialmente se usaron para modelar periodos de tiempo de solo días por simulación, las versiones más recientes pueden usarse para tiempos más largos.

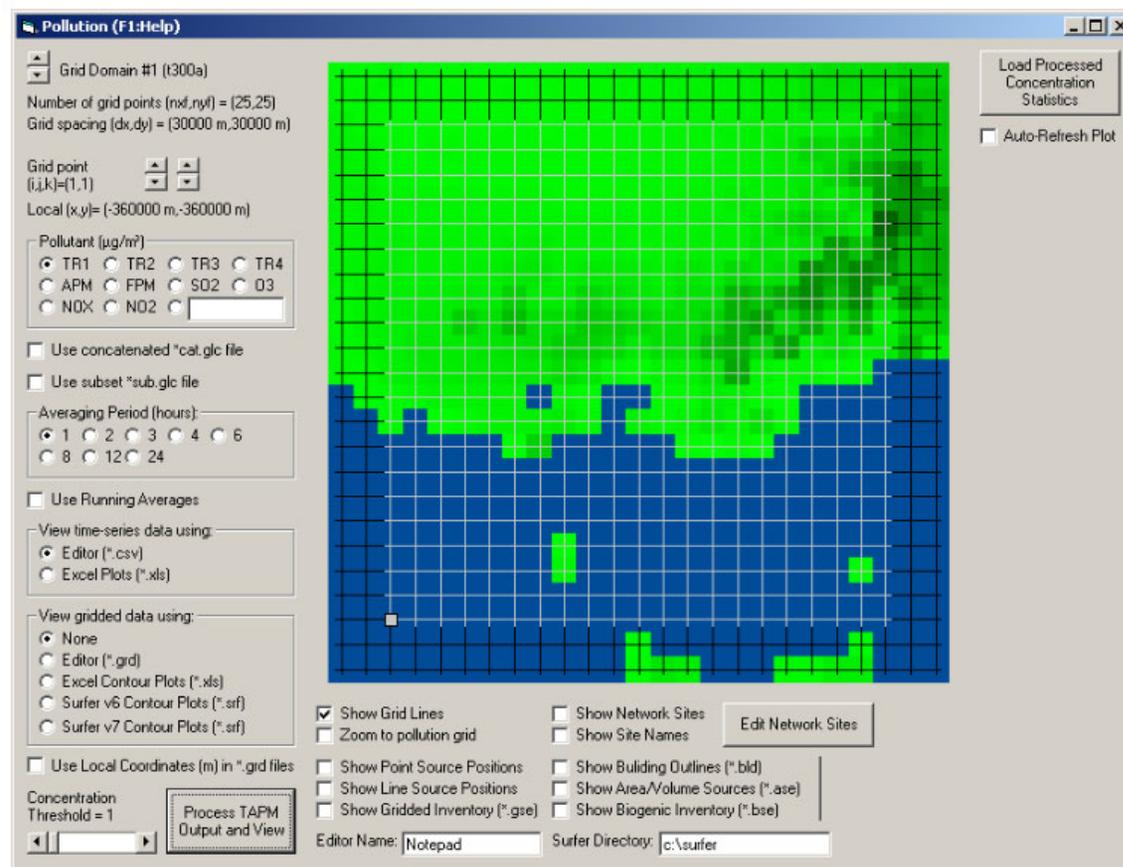
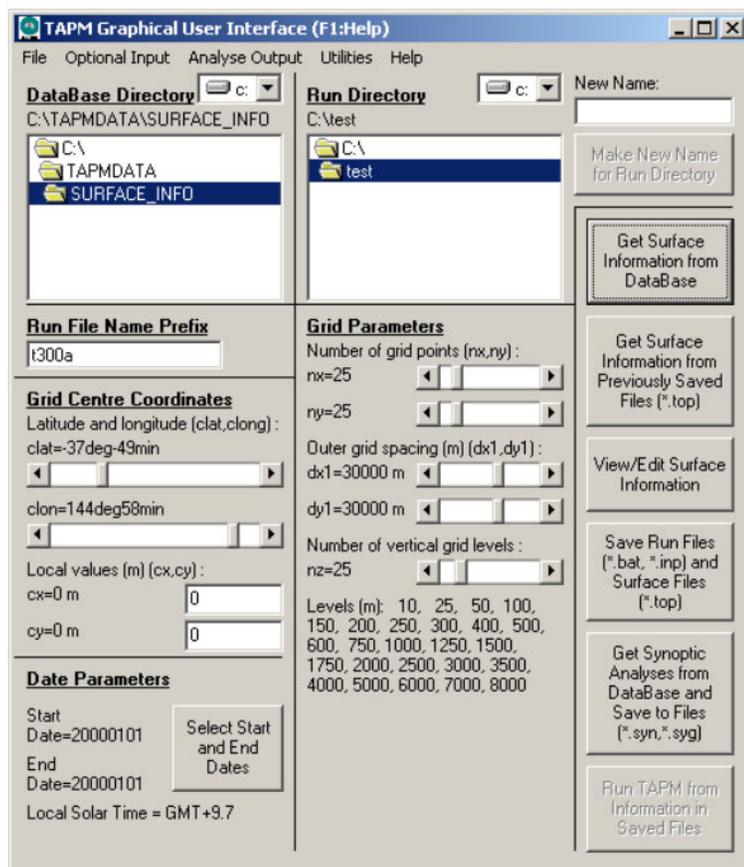
Como se basan en concentraciones promedio por cuadrícula y no en el penacho completo, toman en cuenta la remoción de partículas a través de deposición o reacciones químicas.

Ej: software TAPM

# Métodos de simulación

# MODELOS GAUSSIANOS

Ej: software TAPM



Modelos lagrangianos: Simulan un número de “pufs” (bocanadas) de contaminantes emitidos por la fuente, usualmente a intervalos regulares. Los más comunes son conocidos como “Gaussian pufs” porque asumen que cada bocanada sigue una distribución gaussiana al moverse con el viento y expandirse.

Las bocanadas son elementos 3D y se expanden en  $(x,y,z)$  en el tiempo. Un modelo puede incluir desde cientos hasta cientos de miles de bocanadas y cada una se trata de manera independiente. Pueden tener diferentes velocidades de dispersión y moverse en diferentes direcciones, lo que permite un modelado realista de condiciones locales.

Las bocanadas son elementos 3D y se expanden en  $(x,y,z)$  en el tiempo. Un modelo puede incluir desde cientos hasta cientos de miles de bocanadas y cada una se trata de manera independiente. Pueden tener diferentes velocidades de dispersión y moverse en diferentes direcciones, lo que permite un modelado realista de condiciones locales.

## Métodos de simulación

## MODELOS GAUSSIANOS

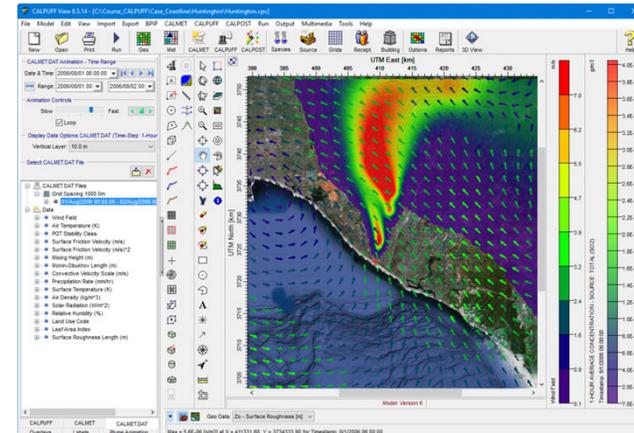
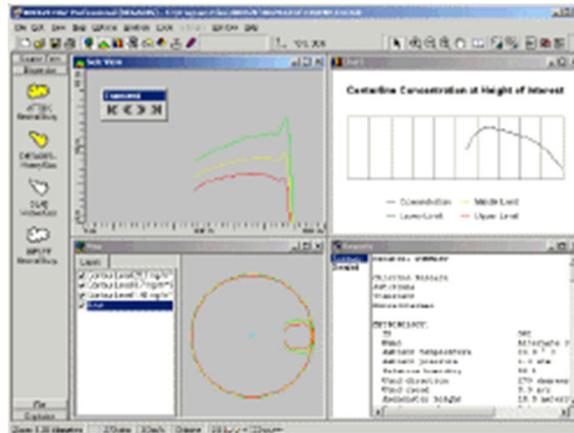
También existen modelos lagrangianos aleatorios, en los cuales los penachos se discretizan como trazadores de partículas independientes que son transportadas por campos de viento promedio con turbulencias locales.

Los modelos lagrangianos son más precisos para sistemas de topología y flujos complejos, así como cuando se necesitan modelar variaciones temporales en emisiones o condiciones meteorológicas.

Se utilizan usualmente para modelar largas distancias y periodos de tiempo de hasta varios años.

Softwares:

AFTOX  
CALPUFF  
HDMs



Los modelos gaussianos asumen condiciones meteorológicas estables (velocidad y dirección del viento constantes en el tiempo y el espacio), que la fuente emite un flujo constante del contaminante a evaluar y que no ocurren transformaciones químicas. Bajo estas condiciones, se puede demostrar matemáticamente que el penacho (o pluma) resultante tendrá un perfil de concentración de características gaussianas en las direcciones horizontal y vertical. Dicho perfil se desarrolla a lo largo de la distancia desde la fuente, siendo su forma la característica principal de este tipo de modelo.

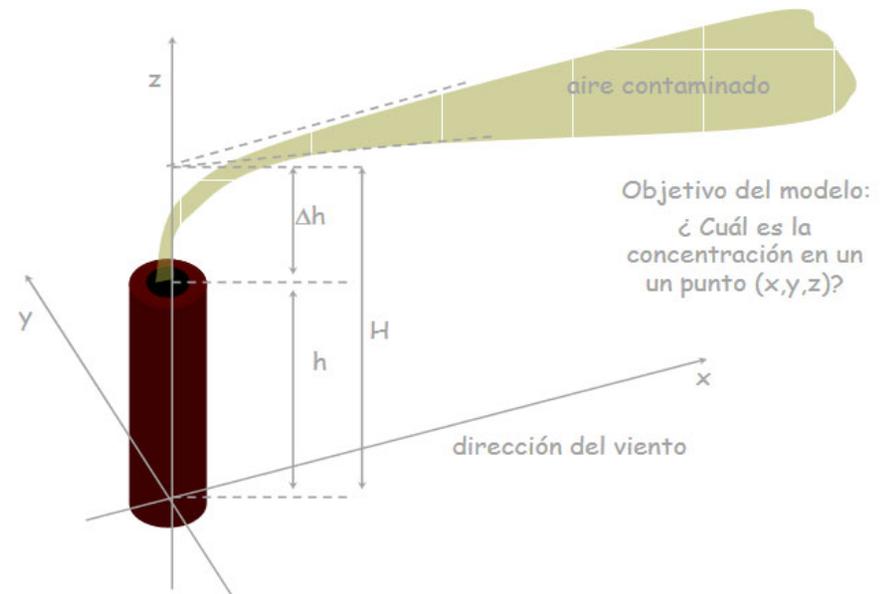
Debido a su simpleza han sido ampliamente utilizados. Sin embargo, su exactitud tiende a disminuir rápidamente luego de los 20 km de distancia desde la fuente de emisión. También presentan dificultades para representar entornos costeros y condiciones de estancamiento caracterizadas por vientos calmos o de velocidad muy baja, con direcciones de viento variables.

## Métodos de simulación

1- La columna de humo emitida por la chimenea se eleva hasta cierta altura efectiva,  $H$ , que es la suma de la altura de la chimenea,  $h$ , más el ascenso,  $\Delta h$ , debido al momento inicial del humo así como a la diferencia de temperaturas entre el gas saliente y el aire que le rodea.

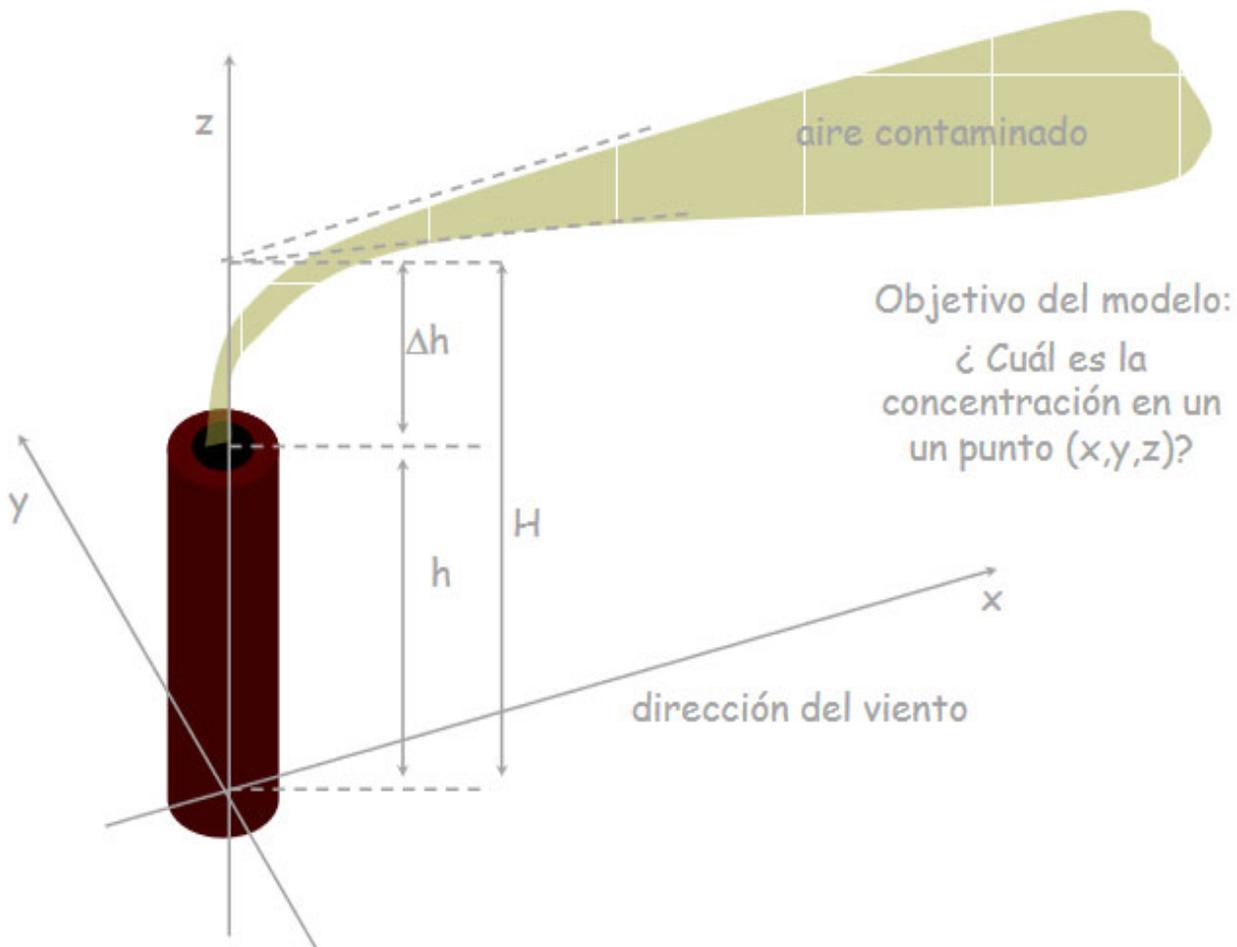
2- A partir de  $H$  la columna de humo se mueve horizontalmente en la dirección del viento (dirección  $x$ ) con velocidad  $u$  y se dispersa en las direcciones perpendiculares a éste,  $y$  y  $z$ . ( $y$  = horizontal,  $z$  = vertical). La dispersión en el plano  $yz$  se debe principalmente a la turbulencia atmosférica y puede calcularse como una distribución gaussiana.

## MODELOS GAUSSIANOS



3- El suelo se trata como una superficie plana que no absorbe contaminante.

## Métodos de simulación



## MODELOS GAUSSIANOS

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right)$$

$C(x,y,z)$  es la concentración,  $Q$  es la cantidad de contaminante emitido por unidad de tiempo ( $\text{g s}^{-1}$ ),  $u$  es la velocidad del viento y las  $\sigma$  son coeficientes de dispersión que dependen de la clase de estabilidad y de la distancia al foco en la dirección del viento,  $x$ .

Los coeficientes de dispersión vertical se calculan según fórmulas empíricas, por ejemplo las de Griffiths:

Estabilidad	$\sigma_y$	$\sigma_z$
A-B	$0.32 x ( 1 + 0.0004 x )^{-1/2}$	$0.24 x ( 1 + 0.0001 x )^{-1/2}$
C	$0.22 x ( 1 + 0.0004 x )^{-1/2}$	0.20 x
D	$0.16 x ( 1 + 0.0004 x )^{-1/2}$	$0.14 x ( 1 + 0.0003 x )^{-1/2}$
E-F	$0.11 x ( 1 + 0.0004 x )^{-1/2}$	$0.08 x ( 1 + 0.0015 x )^{-1/2}$

Estas fórmulas suelen estar implementadas en los programas informáticos de modelos de dispersión que se utilizan habitualmente y son función de la clase de estabilidad atmosférica.

La clase de estabilidad atmosférica se puede deducir para cada condición meteorológica a partir de la siguiente tabla:

$U_{10} / \text{m s}^{-1}$	Día, radiación solar			Noche	
	Fuerte	Moderada	Débil	Nubes $> 1/2$	Nubes $< 3/8$
$< 2$	A	A-B	B		
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	D	D	E
5-6	C		D	D	D
$> 6$	C	D	D	D	D

La clase de estabilidad atmosférica se representa por un código alfabético que va desde la A (más inestable) hasta la F (más estable).

Para el cálculo del ascenso vertical de la columna de humo,  $\Delta h$ , se utilizan expresiones empíricas como la de Briggs. En ellas el ascenso vertical depende de la diferencia de temperatura entre los gases de salida y la temperatura ambiente y la velocidad de salida de gases. Otros parámetros que también influyen en el ascenso vertical son el diámetro de la chimenea y la estabilidad atmosférica.

$$\Delta h(m) = 114 C F^{1/3} / u$$

Briggs

Al igual que ocurre con los coeficientes de dispersión, las fórmulas para el cálculo de  $\Delta h$  ya suelen estar incluidas en los modelos informáticos.

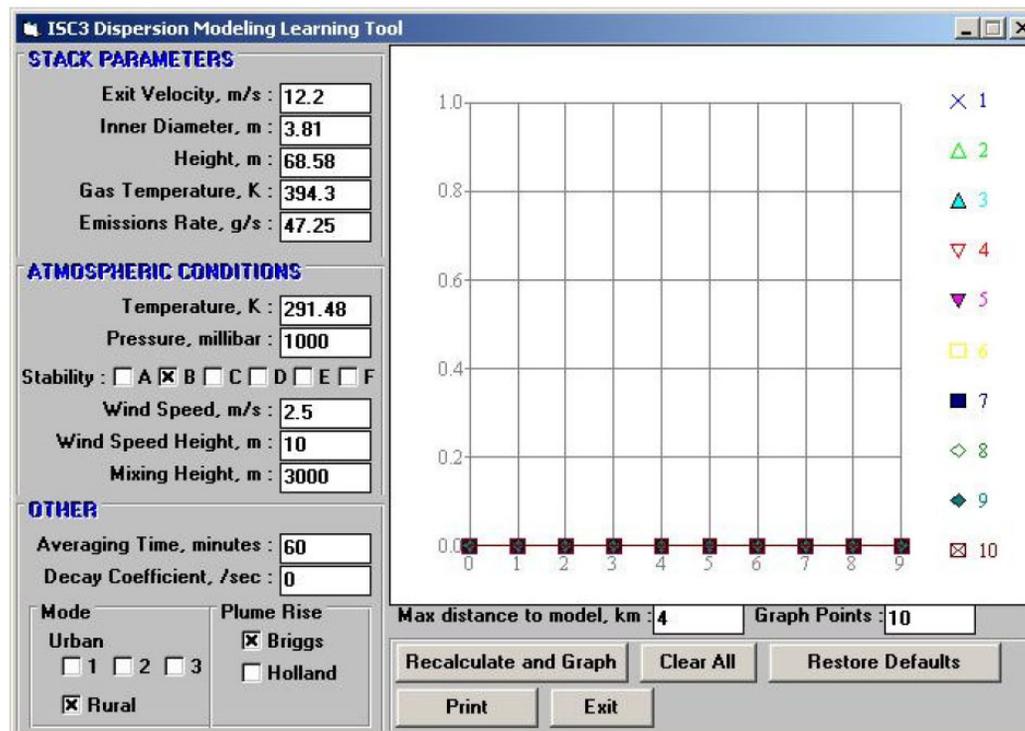
$C$  es un parámetro que depende del gradiente de temperatura,  $u$  es la velocidad del viento a la altura geométrica de la chimenea,  $h$ , y  $F$  es el flujo de flotación que se obtiene a partir de:

$$F(\text{m}^4/\text{s}^3) = g v_s D_s^2 (T_f - T_a) / (4 T_a)$$

donde  $g$  es la aceleración de la gravedad,  $v_s$  la velocidad del gas a la salida de la chimenea,  $D_s$  el diámetro interno de la chimenea y  $T_f$  y  $T_a$  son las temperaturas de salida del gas y la ambiente en K, respectivamente.

## Métodos de simulación

AERMOD  
AUSPLUME  
AEOLIUSF  
CALINE3  
CAL3QHC  
CTDMPLUS  
ISC  
OCD  
...



## MODELOS GAUSSIANOS

**AERMOD View**

pDsAERMOD-AUSMOD Pro Features

Start  
• New  
• Editing project  
• Import from AUSPLUME

Important Feature  
You can import (recycle) your existing AUSPLUME configuration files.

pDs Consultancy  
Australia

Your Model Support Group  
www.pdsconsultancy.com.au

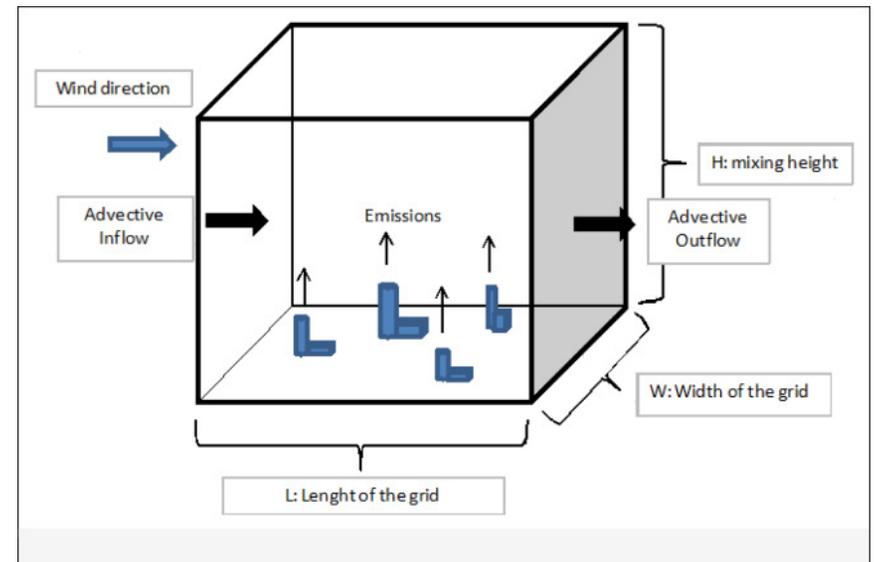
<http://www.ehsfreeware.com/amodclean.htm>

## Métodos de simulación

Modelos caja: Son de los primeros modelos que se desarrollaron y también de los más simples. Tradicionalmente son usados cuando se requiere simular interacciones químicas entre contaminantes.

La cuenca atmosférica se asume como una caja simple de dimensiones establecidas, con todas las emisiones siendo liberadas en ella. Una vez liberadas, se asume que se distribuyen homogéneamente en toda la caja. Como es de esperar, la precisión de estos modelos es limitada.

## MODELOS EKMA



La mayor ventaja de los modelos de caja es su simplicidad. Requieren bajo poder de procesamiento y permiten simulaciones muy rápidas. Además requieren pocos datos de entrada.

Modelos EKMA: Siglas de Empirical Kinematic Modelling Approach. Fueron de los primeros modelos usados para estimar la probabilidad de formación de esmog urbano. En este modelo las concentraciones de VOXs y NOx se asumen constantes e iguales a sus valores medidos en la mañana. EKMA es un modelo tipo lagrangiano, aunque limitado a una caja. A pesar de su antigüedad, sigue siendo usado para estimar la relación ozono-VOCs-NOx.

Sin embargo, dada su simplicidad los modelos caja ya no se usan para hacer estimaciones relacionadas con regulaciones ambientales. Sin embargo, se siguen usando para modelar dispersión de contaminantes, especialmente en pequeños espacios antropogénicos cerrados. Por ejemplo, la desaparición de formaldehído en espacios interiores via foto-degradación. Para este tipo de espacios los modelos caja pueden funcionar suficientemente bien, ya que no se esperan variaciones ambientales significativas.

El método EKMA se desarrolló como un procedimiento para relacionar los picos de ozono troposférico con VOCs no-metano NOx. Los picos de ozono se predicen con base a:

- Concentraciones mañaneras de VOCs y NOx, incluyendo precursores transportados por el viento.
- Emisiones de VOCs, NOx, y otras especies diurnas.
- Condiciones meteorológicas.
- Reactividad de las diferentes mezclas de VOCs.

La base conceptual de EKMA es el modelo de trayectorias. En su formulación se asume una columna o parcela de aire transportado por los vientos a través de un área urbana. Mientras la columna se transporta, entran emisiones que se distribuyen de manera uniforme.

EKMA está pensado para usarse de forma relativa, o sea para estimar cambios fraccionales. Es apropiado para áreas urbanas.

No es aplicable a:

- (1) ozono en zonas rurales,
- (2) situaciones en las que el ozono transportado (y/o sus precursores) son especies dominantes,
- (3) cuando la máxima concentración de ozono ocurre en las noches, y
- (4) el desarrollo de estrategias de control para una o varias fuentes de emisión.

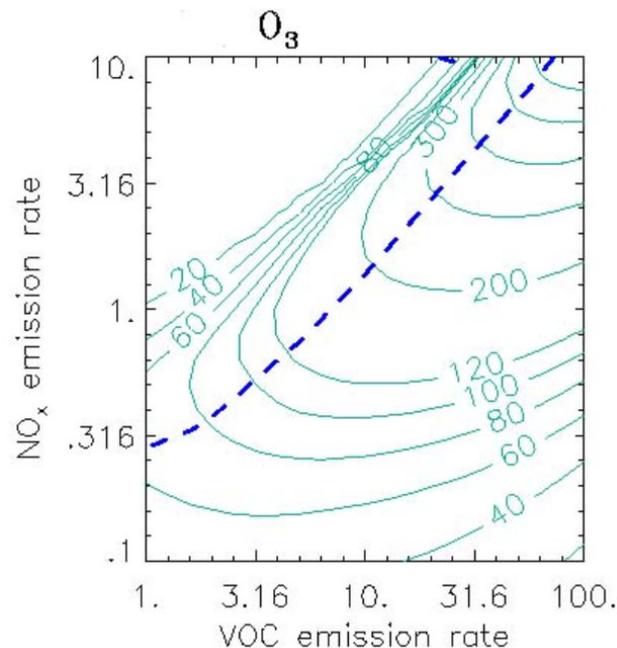
Además, la validez de los diagramas de isopletras de ozono para una ciudad en particular está sujeta a limitaciones generales de los modelos de trayectorias. La única manera de evaluar el desempeño de EKMA es usar registros históricos de picos de ozono versus las emisiones correspondientes de VOCs y NOx y comprobar la exactitud de los resultados para ese momento.

## Métodos de simulación

## MODELOS EKMA

El modelo EKMA, y los modelos de trayectoria, contienen el más detallado y actualizado mecanismo químico al mismo tiempo que son computacionalmente eficientes. Así que siguen siendo utilizados para hacer estimaciones rápidas de ozono troposférico. Además, cuando no hay suficientes datos meteorológicos o de calidad del aire para un modelo de cuadrículas, EKMA puede ser la única alternativa viable.

OZIPP  
OZIPM  
EKMAI



Los programas suelen dar como resultado isopletas de ozono.

## Métodos de simulación

Los modelos de difusión atmosférica son herramientas cruciales para abordar problemas relacionados con los procesos de evaluación ambiental. Se usan como instrumentos en los siguientes tipos de estudios:

1. De impacto ambiental de instalaciones industriales donde la contaminación atmosférica es originada por uno o varios focos de carácter puntual, lineal o superficial, de tal manera que se evalúe el impacto existente y se definan distintas alternativas para identificar la de menor impacto.
2. Optimización de alturas de chimeneas para grandes y medianas instalaciones industriales. Los modelos de contaminación atmosférica sirven en este caso de herramientas de contraste y corrección de las alturas teóricas determinadas mediante las ecuaciones recogidas en esta normativa.
3. Investigaciones pre-operacionales o estudios de contaminación de fondo. Se aplican de forma previa a la instalación de nuevas Industrias. La información del entorno existente suele obtenerse de forma práctica mediante mediciones reales.

## Métodos de simulación

4. Modelos de planificación urbana e industrial a escala local, regional o nacional.
5. Redes de vigilancia de la contaminación atmosférica que permiten estimar la calidad del aire en zonas no cubiertas por estaciones de mediciones.
6. Predicciones de contaminación potencial y programas de prevención. Se realizan en complejos sistemas informáticos en tiempo real, de tal manera que se pueda informar a la población de eventos de contaminación episódicos.

## Métodos de simulación

7. Estudios epidemiológicos, de relación entre niveles de contaminantes en la atmósfera y el número de muertes y/o hospitalizaciones debidos a afecciones pulmonares.
8. Apoyo a la elaboración de legislaciones y reglamentaciones para mejorar la calidad del aire, incidiendo sobre los límites permitidos de emisiones de contaminantes.
9. Gestión de emergencias por contaminación urbana e industrial o por escapes accidentales de material tóxico o radiactivo que pueden provocar episodios de contaminación aguda. Estas aplicaciones se realizan con modelos específicos desarrollado para su aplicación con gases densos o radiactivos.

## Métodos de simulación

Independientemente del empleo de los modelos, de forma general los tipos de estudios suelen estar relacionados con los siguientes contaminantes:

- Estudios de calidad del aire urbano [ $\text{PM}_{10}$ ; CO; NO<sub>x</sub>; O<sub>3</sub>; SO<sub>2</sub>]
- Estudios de ozono troposférico (modelos fotoquímicos) [CO; COVs; NO<sub>x</sub>]
- Estudios de lluvia ácida [NH<sub>3</sub>; NO<sub>x</sub>; SO<sub>2</sub>]
- Estudio de contaminantes relacionados con cambio climático [CO<sub>2</sub>; CH<sub>4</sub>; N<sub>2</sub>O]
- Estudios de contaminantes relacionados con eutrofización de las aguas (superficiales y subterráneas) [NH<sub>3</sub>; NO<sub>x</sub>]