

TEMA 2. “MODELOS DE CONCENTRACIÓN DE CONTAMINANTES ATMOSFÉRICOS”

2.1. Introducción a los modelos de concentración y tipos principales.

Los modelos de concentración de contaminantes son protocolos matemáticos que proporcionan una estimación de la concentración de un contaminante en función de una serie de parámetros de entrada de tipo meteorológico, químico, topográfico y de cantidad y velocidad de emisión. En concreto,

- Cantidad de contaminante emitida por unidad de tiempo, posición y altura de emisión.
- Velocidad y dirección de los vientos dominantes, estabilidad atmosférica y altura de mezclado.
- Comportamiento químico del contaminante, como la vida media o las reacciones potenciales.

Existen tres tipos de modelos de concentración: los de celda fija (adecuados para vertidos homogéneos), los de dispersión (para vertidos puntuales) y los combinados, como los de celda múltiple, que combinan los dos anteriores para determinar la concentración en una región definida. Todos ellos tienen en común la aplicación de un

balance de materia en un elemento de volumen o *celda*. El balance de materia es muy sencillo:

$$\frac{dC}{dt} = \text{velocidad de entrada} + \text{velocidad de formación} \\ - \text{velocidad de salida} - \text{velocidad destrucción}$$

donde dC/dt , la derivada de la concentración de contaminante con respecto al tiempo, se corresponde con la velocidad de acumulación del contaminante, expresada, por ejemplo, en gramos/(m³ segundo). Así, una derivada positiva indica que el contaminante se está acumulando en la celda, bien porque entra más contaminante del que sale, o porque se crea a más velocidad que a la que se destruye. Estos términos de “creación” y de “destrucción” son fundamentalmente debidos a reacciones químicas y para contaminantes que no reaccionen o que reacciones muy despacio, se pueden ignorar.

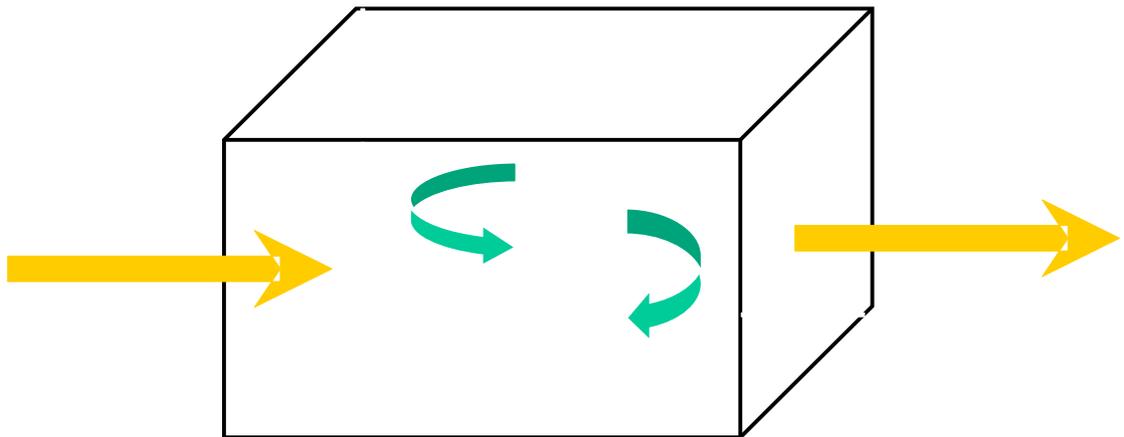


Figura 2.1. Ilustración del método del balance de materia. La velocidad de acumulación de contaminante dentro de un volumen de aire o *celda* depende del balance entre los flujos de entrada y de salida, y de las reacciones químicas de creación y destrucción que se producen en su interior.

2.2. Estabilidad atmosférica. Fundamentos.

La estabilidad atmosférica es un factor clave a la hora de estimar en qué grado los contaminantes se dispersan o “diluyen” en aire a partir de los lugares en los que se emiten. Se considera **atmósfera inestable** aquella en la que existe turbulencia, fuertes corrientes de convección, etc... Por el contrario, en una **atmósfera estable** el aire se

encuentra básicamente en reposo, y la turbulencia y las corrientes de convección se reducen al mínimo. Es fácil comprender que, desde el punto de vista del técnico ambiental, una atmósfera inestable representa una situación más favorable, ya que en ese caso los contaminantes se “reparten” mejor y los niveles de concentración, sobre todo a ras de suelo, son menores.

En este curso nos centraremos en el estudio de la llamada **estabilidad vertical**, que es por otro lado la que contribuye de forma más importante en el problema de la dispersión de contaminantes. El método básico para establecer, a priori, si una atmósfera presenta estabilidad vertical o no, consiste en comparar el gradiente vertical de temperaturas (es decir, cómo varía la temperatura del aire a medida que ascendemos) con el llamado **gradiente adiabático del aire**, que es un valor característico de la atmósfera.

Cálculo del gradiente adiabático del aire

Para calcular el gradiente adiabático del aire **seco**, partimos de una masa de aire que asciende de forma *adiabática* (esto quiere decir que suponemos que no intercambia calor con el entorno: $\delta Q=0$). En cualquier texto básico de Física podremos encontrar cómo se determina la llamada *presión hidrostática*, esto es, la presión que se soporta cuando un cuerpo se encuentra sumergido en un fluido, en nuestro caso, el aire. De la ecuación hidrostática se deduce que un incremento de altura implica un descenso de la presión:

$$dp = -\rho g dz \quad (1)$$

Recordemos que el comportamiento de la atmósfera en su conjunto puede considerarse ideal, y que, además nos interesa la variación de p con z . Aplicando la ecuación de los gases ideales:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g = -gp \frac{M}{1000R}$$

Siendo M la masa molecular del aire en g/mol (de ahí el factor 1000 necesario para expresarlo en Kg/mol).

Por otro lado, la Termodinámica nos permite calcular el calor transferido a través de la ecuación:

$$\delta Q = c_p dT - V dp \quad (2)$$

Como consideramos que el proceso es adiabático ($\delta Q=0$) y que el gas se comporta de forma ideal ($V=RT/p$), resulta inmediato que:

$$\frac{\partial T}{\partial p} = \frac{RT}{pc_p}$$

De donde, usando el gradiente de presión de la atmósfera obtenemos el valor del gradiente adiabático seco λ :

$$\lambda = \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial p} \cdot \frac{\partial p}{\partial z} = -\frac{gM}{c_p} \quad (3)$$

Para M en Kg/mol. Teniendo en cuenta que la masa molecular del aire es de 28.88 g/mol y que el aire se puede tratar como un gas diatómico ideal ($c_p=7R/2$). La aplicación directa de la ecuación (3) da:

$$\lambda = \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{gM}{c_p} = -\frac{2gM}{1000 \cdot 7R} = 9.73 \cdot 10^{-3} \text{ K/m}$$

es decir, el aire se enfría un grado por cada 100 metros que se asciende en altura.

El cálculo del gradiente adiabático del aire húmedo es un poco más complejo y no entraremos aquí.

Tal como se ha mencionado, la comparación de gradiente adiabático con el real es lo que permite establecer si la atmósfera estable o no. Para ello basta con comprobar si la burbuja a una determinada altura está más fría que el entorno, de forma que debe bajar porque es más denso que la atmósfera (condiciones de estabilidad absoluta) o si está más caliente que el entorno, con lo que ascenderá (condiciones de inestabilidad absoluta).

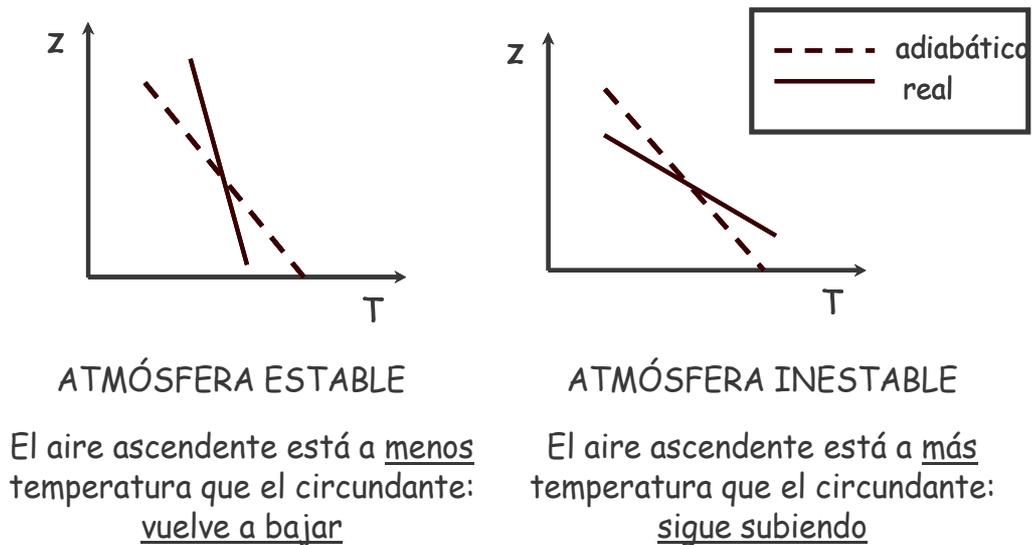


Figura 2.2. Gradiente vertical de temperaturas para atmósfera estable e inestable.

Determinar si un determinado tipo de atmósfera es estable o inestable resulta de comparar el gradiente real de temperaturas con el correspondiente al ascenso adiabático de una columna de aire.

Las condiciones de máxima estabilidad se dan en las situaciones de inversión térmica, es decir, situaciones en las que el gradiente real de temperatura es positivo (la temperatura aumenta con la altura). Existen cuatro tipos principales de inversiones térmicas:

- a).- Inversión de subsidencia en zonas de altas presiones: cuando el aire sale de una alta superficial, es reemplazado por aire más frío de la baja relativa en altura.
- b).- Inversión por radiación: ya conocemos que por la noche el aire cercano al suelo se enfría con rapidez, mientras que la atmósfera, por su baja conductividad térmica, se mantiene a una temperatura mayor.
- c).- Inversión marina: cuando llega a la costa aire frío en contacto con el agua.
- d).- Inversión topográfica: el aire frío rellena los valles.

Cuando se produce una inversión térmica en altura, el punto de inversión corresponde con una barrera de muy difícil franqueo para los contaminantes (que no pueden ascender). La existencia de una inversión térmica a baja altura puede producir graves consecuencias contaminantes, ya que esta tiende a que los contaminantes se

acumulen en las cercanías del suelo y que no se dispersen. Una inversión térmica representa el caso más sencillo en el que se puede definir una **altura de mezclado**, esto es, la altura por debajo de la cual se puede suponer que se produce mezclado total de contaminantes para producir una concentración homogénea.

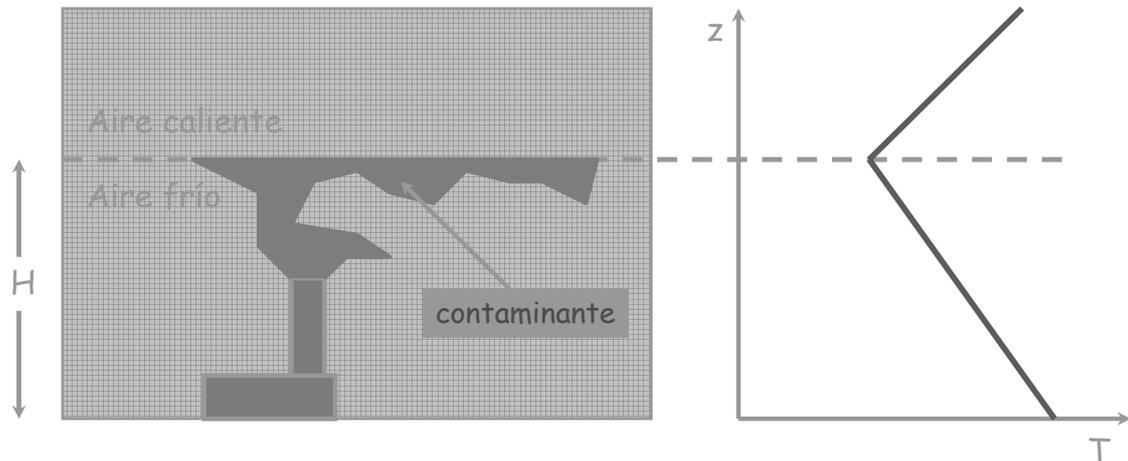


Figura 2.3. Inversión térmica y altura de mezclado. La existencia de una zona de inversión equivale a la existencia de una “barrera” que impide la dispersión de los contaminantes por encima de una determinada altura. Dicha barrera determina la “altura de mezclado” (H)

Según el perfil de estabilidad, existen tablas empíricas para clasificar la atmósfera según la velocidad del viento y la insolación. La más usada es la clasificación de Pasquill-Gifford, que clasifica los distintos tipos de atmósfera con un código de letras que van de la A (la más inestable) a la F (la más estable), pasando por la D, que corresponde a una atmósfera neutra, en la que el gradiente real coincide con el adiabático.

Si no se dispone de datos acerca de cómo varía la temperatura con la altura, se puede recurrir a la Tabla 2.1, empleada comúnmente por los técnicos. Esta tabla nos permite estimar cuál sería la clase de estabilidad a partir de la fuerza del viento y el grado de insolación. Vemos, por ejemplo, que durante el día la atmósfera tiende a ser más inestable, mientras que durante la noche ocurre lo contrario.

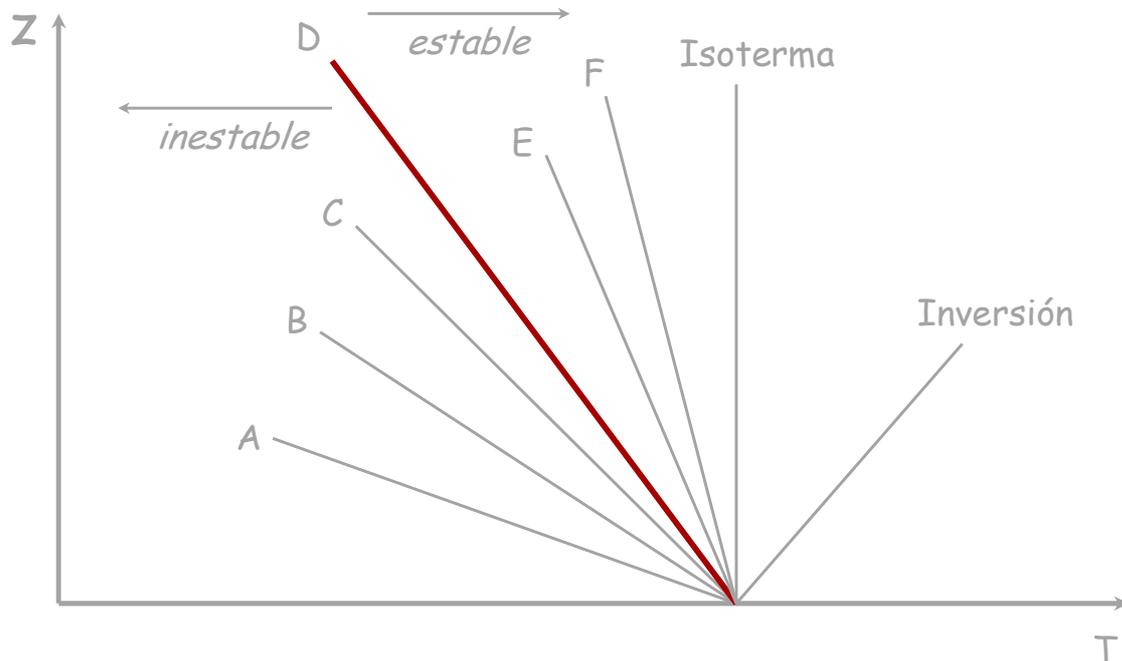


Figura 2.4. Clasificación de Pasquill-Gifford. En función del gradiente real de temperaturas se establece el tipo de atmósfera utilizando una código de letras que posteriormente se emplea como dato de entrada en los modelos de dispersión.

Tabla 2.1 Condiciones meteorológicas que definen las clases de estabilidad de Pasquill

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

2.3. Modelos de celda fija estacionaria y no estacionaria.

Estos modelos son los más simples y aquellos que se utilizan en el caso de estudiar una **emisión difusa** o no puntual. El caso típico es el de una ciudad donde la fuente principal de contaminación es el tráfico rodado.

Los modelos de celda fija parten de asumir las siguientes hipótesis esenciales:

- La ciudad es un rectángulo de dimensiones W y L , con uno de sus lados paralelo a la dirección del viento (L).
- La turbulencia atmosférica produce la mezcla completa de los contaminantes hasta la altura de mezclado (H), y no hay mezcla por encima de esa altura, con lo que se puede asumir que la concentración en la celda es homogénea en el espacio y de valor C .
- El viento sopla con velocidad u en la dirección x , con fuerza independiente del tiempo y de la elevación sobre el suelo.
- La concentración de contaminante que entra en la ciudad ($x=0$) es constante e igual a b (concentración de fondo).
- El índice de emisiones por unidad de área es q (por ejemplo, en $\text{g}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$), con lo que la emisión total es $Q=q\cdot A$, siendo $A=W\cdot L$ el área de la ciudad. El índice de emisiones no varía ni con el tiempo ni con el viento.
- Ningún contaminante entra o sale por los lados perpendiculares a la dirección del viento.

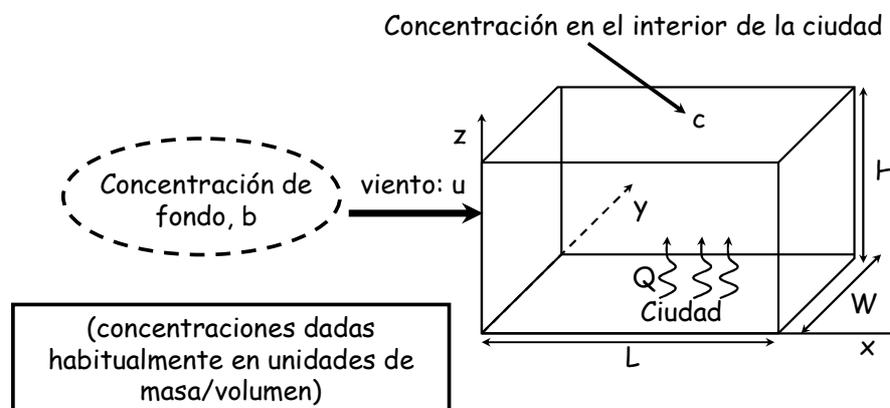


Figura 2.5. Ilustración del modelo de celda estacionaria.

En todo modelo de celda se puede establecer un balance de materia general que se expresa como:

$$\underbrace{u b W H + q W L}_{\text{entra}} - \underbrace{c u W H}_{\text{sale}} = \underbrace{W H L}_{\text{se acumula}} \frac{dc}{dt}$$

donde los dos primeros términos corresponden al flujo de contaminante que entra en la celda en gramos/segundo (arrastrado por el viento y debido a la emisión de contaminante dentro de la celda) y el tercero al flujo de contaminante que arrastra el viento fuera de la celda.

2.3.1. Modelos de celda fija estacionaria.

En el modelo de celda fija estacionaria, se supone que se ha alcanzado una situación de **estado estacionario** en el que la concentración es independiente del tiempo (C_e) y por tanto la derivada de la concentración es cero. El balance de materia se reduce a:

$$ubWH + qWL - uC_eWH = 0 \rightarrow C_e = b + \frac{qL}{uH} \quad (4)$$

De la ecuación (4) se deduce que la concentración será mayor cuanto más larga sea la ciudad en la dirección del viento. Además, ésta es independiente de la anchura de la ciudad.

Cuando las condiciones meteorológicas cambian, se establece una concentración de equilibrio media que se determina en función del tanto por ciento de tiempo que el sistema se encuentre en la condición i según:

$$\bar{C}_e = \sum_i f_i \cdot [C_e]_i \quad (5)$$

El modelo de celda estacionaria se utiliza en numerosas ocasiones para estimar en cuanto han de recortarse las emisiones ($q_1 \rightarrow q_2$) para que la concentración de contaminante se reduzca en cierto valor ($C_1 \rightarrow C_2$). Es fácil deducir a partir de la ecuación (4) que la expresión que permite obtener el nuevo índice de emisiones es:

$$q_2 = q_1 \frac{C_2 - b}{C_1 - b} \quad (6)$$

2.3.2. Modelo de celda fija no estacionaria.

La otra versión del modelo de celda, la llamada celda no estacionaria, es suponer que la concentración de contaminante no se puede considerar constante dentro de la celda y que éste se acumula (derivada positiva) o va desapareciendo (derivada negativa). Un caso típico es cuando se está produciendo un escape y se quiere saber de cuánto tiempo se dispone antes de que la concentración de una determinada sustancia alcance cierto umbral.

El balance de materia en este caso es:

$$ubWH + qWL - uC_eWH = WLH \frac{dC}{dt} \rightarrow \frac{C_e - C(t)}{C_e - b} = \exp(-ut / L) \quad (7)$$

Podemos comprobar que el modelo de celda fija no es más que un caso particular del modelo de celda no estacionaria en el que $t = \infty$.

2.4. El modelo gaussiano de dispersión.

Los modelos gaussianos son los modelos que emplean los técnicos para evaluar el efecto de **emisiones puntuales** hasta distancias que no superen los 20 Km de distancia. No son pues adecuados para tratar problemas que impliquen largas distancias tales como la lluvia ácida. El problema típico que trata un modelo gaussiano es el de una chimenea de una fábrica que emite, de forma continua o esporádica, una cierta cantidad de contaminante. La combinación del **ascenso vertical** inicial de la columna de humo, la velocidad del viento y la turbulencia atmosférica producen una estructura característica denominada “penacho” (“plume” en inglés)

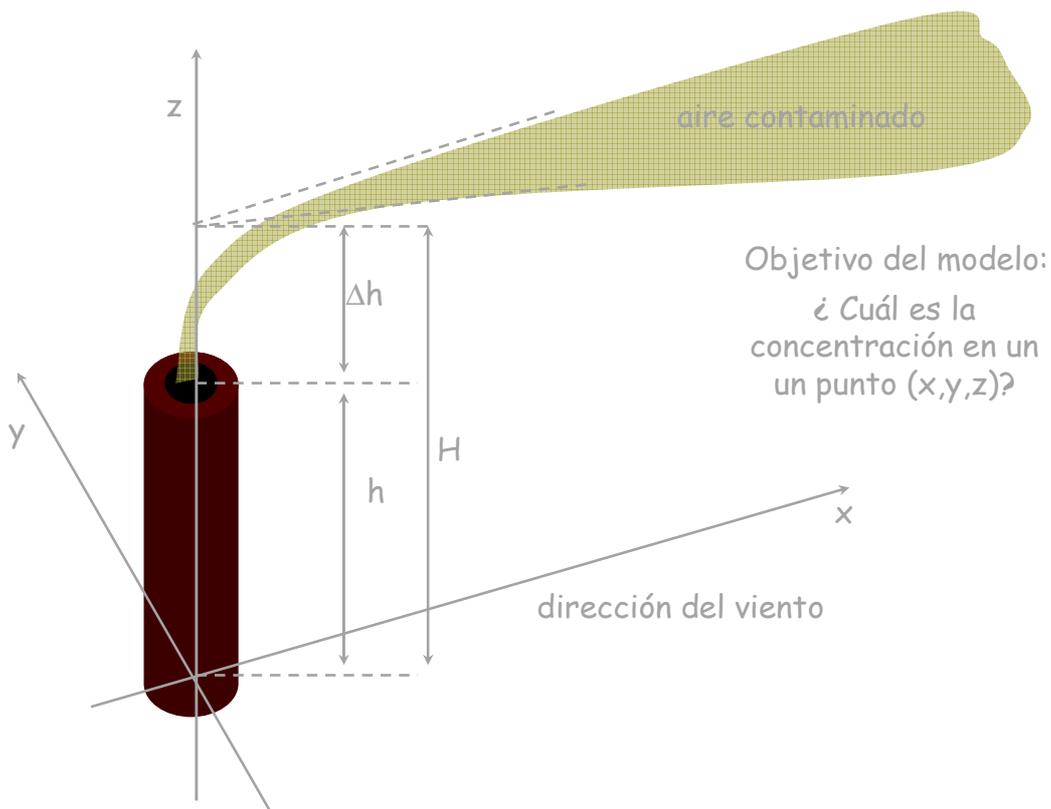
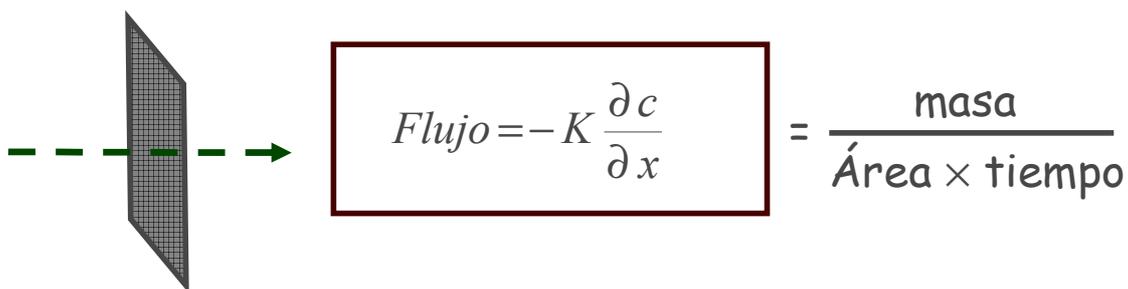


Figura 2.6. Nomenclatura básica del modelo gaussiano. En los modelos gaussianos se trabaja con sistema de coordenadas en el que el eje x es siempre la dirección del viento, y es la dirección perpendicular y z representa la altura. El contaminante se emite a una altura $z = H$, donde H es la altura efectiva de emisión, resultado de sumar la altura física de la chimenea, h , al llamado ascenso vertical Δh .

Uno de los puntos más importantes a la hora de trabajar con modelos gaussianos es basarse en un sistema de referencia coherente, apropiado y “confortable”. Así, el eje x se hace coincidir con la dirección del viento, y es la dirección perpendicular al viento y z representa la altura. El contaminante se emite a una altura $z = H$, donde H es la **altura efectiva de emisión**, resultado de sumar la altura física de la chimenea, h , al llamado **ascenso vertical** Δh . Este ascenso vertical, como se verá más adelante, es el resultado del impulso inicial con el que se emiten los gases de emisión, y de su temperatura.

Es importante señalar que, aunque el modelo gaussiano nos proporcione, en principio, la concentración de contaminante en cualquier punto del espacio (x,y,z) , lo más común es trabajar para $z = 0$ (ras de suelo) y para $y = 0$ (en la dirección del viento). El caso de $z = 0$ es importante porque es en la superficie donde se encuentra la población y donde más interesa conocer las previsiones de contaminación. Por otro lado el caso de $y = 0$ es el que permite establecer los toques máximos de concentración esperables (es previsible que el contaminante se encuentre en mayor concentración en la dirección en la que lo arrastra el viento). Esto es importante si se desea elaborar un informe de impacto ambiental, en el que es necesario evaluar la situación más desfavorable.



$$\text{Flujo} = -K \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\text{masa}}{\text{Área} \times \text{tiempo}}$$

Figura 2.7. Ilustración de la primera ley de la difusión o Ley de Fick. Conforme a la ley de Fick el flujo de sustancia que atraviesa una superficie, expresado en cantidad de masa por unidad de área y unidad de tiempo, es proporcional al gradiente de concentración de dicha sustancia en la dirección del flujo cambiado de signo.

Deducción del modelo gaussiano.

Los modelos de dispersión están basados en un modelo de flujo en el que el flujo de materia J_m , esto es, la cantidad de materia que fluye por unidad de superficie y por unidad de tiempo, se determina con una ecuación análoga a la ley de Fick para difusión molecular (ver la figura 2.7), pero introduciendo coeficientes de dispersión turbulentos K en lugar de coeficientes de difusión. Si suponemos que estos coeficientes son constantes en la dirección de flujo y únicamente dependen de esta dirección:

$$J_m = -K_x \frac{\partial C}{\partial x} - K_y \frac{\partial C}{\partial y} - K_z \frac{\partial C}{\partial z} \quad (8)$$

En un elemento de volumen $dV=dx dy dz$, la acumulación diferencial de contaminante por unidad de tiempo $\partial C/\partial t$ vendrá dada por la diferencia de flujos entre la dirección arbitraria ζ y el flujo en $\zeta+d\zeta$ por unidad de longitud, es decir:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial t} \right|_{\zeta} = \frac{\left(-K_{\zeta} \frac{\partial C}{\partial \zeta} \right)_{\zeta} - \left(-K_{\zeta} \frac{\partial C}{\partial \zeta} \right)_{\zeta+d\zeta}}{\zeta} = K_{\zeta} \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2}$$

La ecuación general en las tres dimensiones del espacio será:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (9)$$

Si consideramos una emisión puntual y la masa de contaminante emitida es X (en unidades de masa), las soluciones para una, dos y tres dimensiones de la ecuación diferencial anterior son ecuaciones gaussianas de la forma:

$$(1D) \quad C(x,t) = \frac{X}{2(\pi K_x t)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{4t} \cdot \frac{x^2}{K_x}\right) \quad (10)$$

$$(2D) C(x, y, t) = \frac{X}{4\pi(K_x K_y)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{4t} \cdot \left(\frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y}\right)\right) \quad (11)$$

$$(3D) C(x, y, z, t) = \frac{X}{8(\pi)^{3/2}(K_x K_y K_z)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{4t} \cdot \left(\frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{z^2}{K_z}\right)\right) \quad (12)$$

El **modelo gaussiano en tres dimensiones** se utiliza cuando existe un vertido esporádico o instantáneo. La expresión que se aplica en este caso no es más que la ecuación (12) pero realizando un cambio de coordenadas para tener en cuenta el efecto del viento. Dado que en el caso de un vertido instantáneo el origen de coordenadas implícito en las ecuaciones (10), (11) y (12), es decir, donde se deposita la masa de contaminante, se desplaza en la dirección del viento, es preciso realizar el cambio $x \rightarrow x - ut$, donde u es la velocidad del viento. Análogamente, dado que la emisión se produce a una cierta altura H , también es necesario realizar el cambio de coordenadas $z \rightarrow z - H$. Además, si consideramos una emisión puntual Q (en unidades de masa/tiempo) en un tiempo Δt (de forma que $X = Q\Delta t$) a una altura correspondiente a una chimenea por debajo de la altura de mezclado, entonces:

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q\Delta t}{8(\pi)^{3/2}(K_x K_y K_z)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{4t} \cdot \left(\frac{(x - ut)^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{(z - H)^2}{K_z}\right)\right) \quad (13)$$

El **modelo gaussiano en dos dimensiones** se utiliza si el vertido es continuado en el tiempo. Este es el caso más común, correspondiente a una emisión constante de gases desde la chimenea de una industria. En este caso es posible ignorar la dispersión a lo largo del eje x , dado que en dicha dirección el transporte de contaminante tiene lugar únicamente por el efecto del viento, y no por el de la turbulencia atmosférica, que es el que se describe por el modelo matemático de la gaussiana, y el que afecta en el transporte en las direcciones y y z .

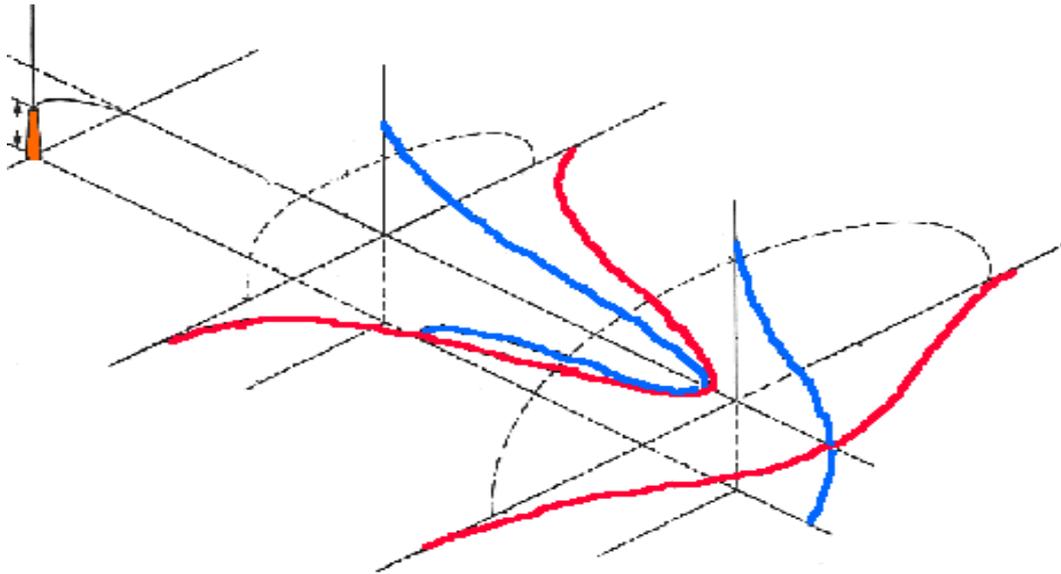


Figura 2.8. Ilustración del modelo gaussiano en dos dimensiones. Cuando el vertido es continuado en el tiempo, la dispersión de contaminantes se produce conforme a una gaussiana en la dirección y (línea azul) y otra en la dirección z (línea roja). La anchura de la gaussiana (el coeficiente de dispersión) se incrementa a medida que nos alejamos de la fuente.

La expresión matemática del modelo gaussiano en dos dimensiones es:

$$C(y, z, t) = \frac{Q}{4\pi ut (K_y K_z)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{4t} \cdot \left(\frac{y^2}{K_y} + \frac{(z-H)^2}{K_z}\right)\right) \quad (14)$$

En contaminación atmosférica es común sustituir las constantes de difusión turbulenta K_z, K_y por los llamados **coeficientes de dispersión**. Estos no son más que las desviaciones típicas (anchura a media altura) asociadas a las gaussianas que aparecen en las ecuaciones (13) y (14). Estos coeficientes de dispersión tienen unidades de longitud y se obtienen a partir de las constantes de difusión turbulenta a través de la relación:

$$\sigma_i^2 = 2K_i t = 2K_i x / u \quad (15)$$

con lo que la ecuación (14) se puede escribir de forma más habitual:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (16)$$

Los coeficientes de dispersión, que como veremos dependen de la distancia x, se pueden estimar empíricamente a través de gráficas y ecuaciones empíricas (Tabla 2.2) que relacionan la estabilidad atmosférica con la distancia a la fuente y la desviación estándar. Así, a medida que nos alejamos de la fuente (ver Figura 2.10 y Tabla 2.2) el coeficiente de dispersión se incrementa, ya que el contaminante ha dispuesto de “más tiempo” para difundirse o diluirse más. Por otro lado, para una distancia dada, el coeficiente de dispersión es tanto más grande cuanto más inestable es la atmósfera, en otras palabras, una mayor turbulencia favorece la dispersión de los contaminantes. Por este motivo, los coeficientes son mayores de día que de noche, y mayores también en suelo urbano que en suelo rural.

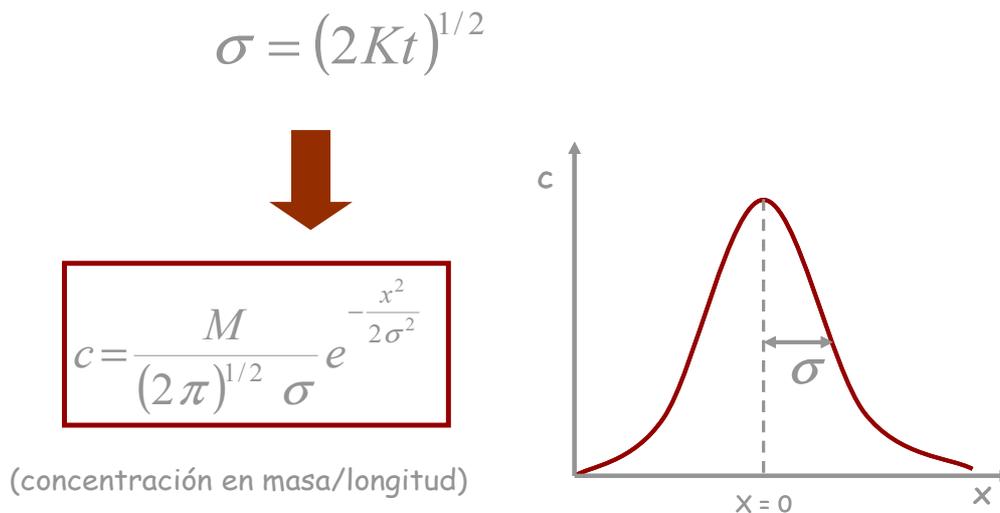


Figura 2.9. ¿Por qué lo llamamos modelo gaussiano? Normalmente, el modelo de dispersión se expresa en términos de un coeficiente de dispersión en lugar de en la constante de dispersión turbulenta K . Cuando se representa con respecto a la distancia de dispersión, el coeficiente de dispersión coincide con la desviación típica de la correspondiente gaussiana (la anchura a media altura).

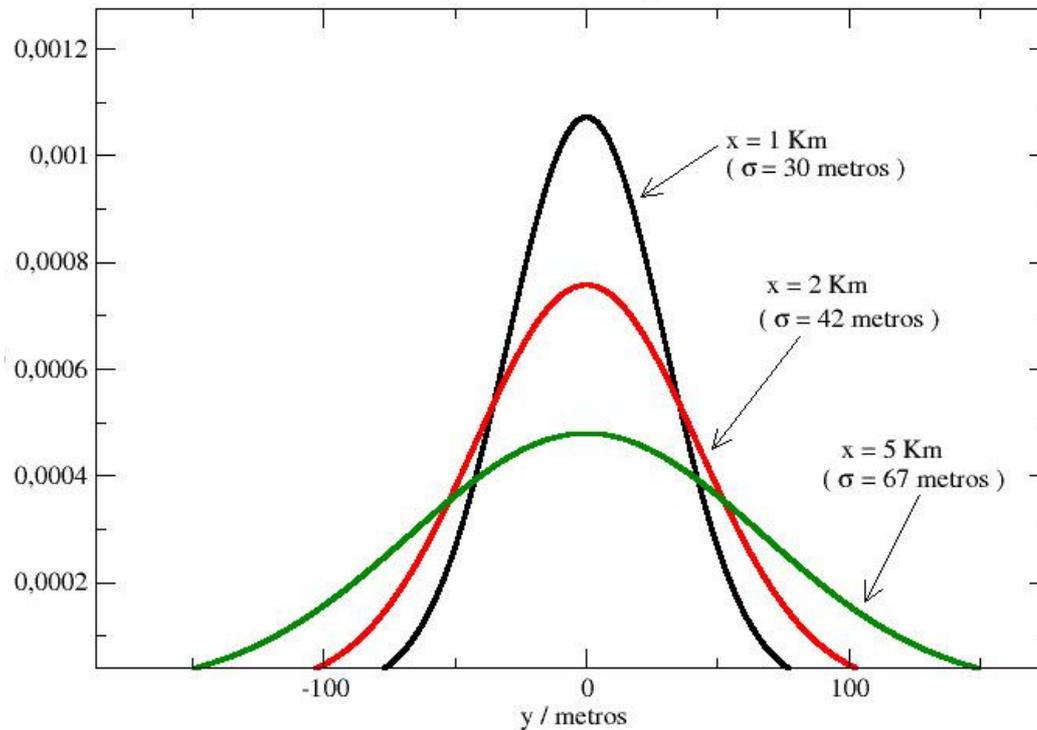


Figura 2.10. Perfil de concentración de contaminante en la dirección perpendicular al viento (eje y). Conforme al modelo gaussiano se obtiene una distribución gaussiana centrada en $y = 0$, que es donde hay más contaminante por coincidir con la dirección del viento. Además, a medida que nos alejamos de la chimenea (distancia en x), el contaminante se diluye cada vez más, con lo que el correspondiente coeficiente de dispersión (la anchura de la gaussiana) se incrementa.

Tabla 2.2. Fórmulas para los coeficientes de dispersión para suelos urbanos

Estabilidad	σ_y	σ_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	$0.11 x (1 + 0.0004 x)^{-1/2}$	$0.08 x (1 + 0.0015 x)^{-1/2}$

La ecuación (16) es válida cuando se supone que el contaminante es absorbido por el suelo. Este es el caso de las sustancias solubles en agua como el SO₂ y, también en algunos casos, los NO_x. Sin embargo, sustancias poco solubles en agua como el CO y los COVs no son absorbidas por el suelo y es necesario tener en cuenta el efecto de “rebote” provocado por éste. En este caso es necesario realizar una modificación del modelo gaussiano. Para ello se usa un truco matemática conocido como el de la chimenea “ficticia” o fantasma.

Consideremos una chimenea de altura h que emite de forma continua Q partículas por segundo. Las coordenadas del foco de emisión son entonces (0,0,h). Si se supone que las moléculas de contaminante son reflejadas por el suelo, desde un punto de vista matemático es posible tener en cuenta este efecto sumando la contribución de una fuente ficticia con coordenadas (0,0,-h). El resultado es que la concentración se calcula a través de

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left(-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right\} \quad (18)$$

Para el caso de estar interesados en la concentración a nivel del suelo (z=0), la ecuación (18) se reduce a:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{H^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (19)$$

Y si además queremos la concentración en el eje del penacho o del viento, y=0, la ecuación (18) se puede expresar como:

$$\frac{C(y, z)u}{Q} = \frac{1}{\pi \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{H^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (20)$$

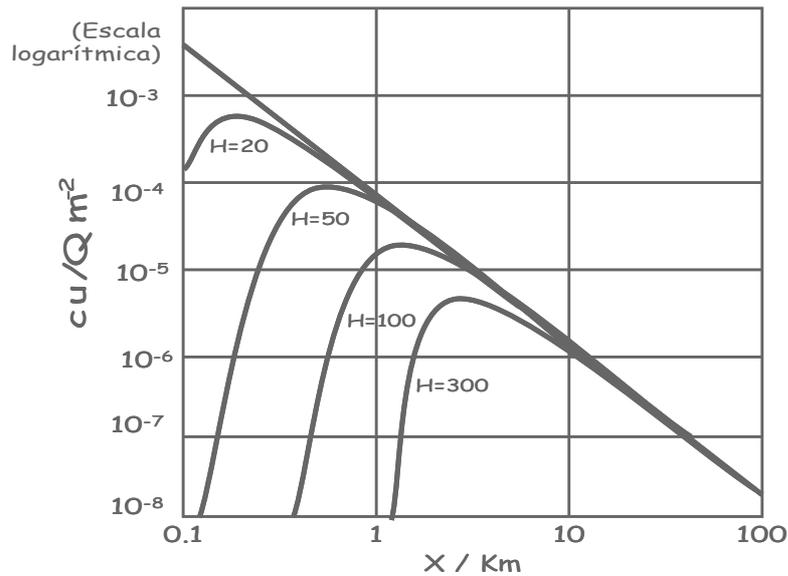


Figura 2.11. Concentración reducida (Cu/Q) de contaminante a ras de suelo ($z=0$) y en eje del viento ($y=0$) en función de la distancia a la fuente. El máximo de concentración se produce a cierta distancia de la chimenea, tanto mayor cuánto más alta es ésta.

La representación de la ecuación (20) frente a la distancia a la fuente x (no olvidemos que σ_z depende de x) se puede encontrar en la Figura 2.11. Esta muestra cómo paradójicamente el máximo de concentración a ras de suelo no se produce en las inmediaciones de la chimenea, sino a una cierta distancia. Esto no es más que una consecuencia de que el contaminante requiere cierto tiempo para llegar al suelo por dispersión. Por este motivo, cuánto más alta sea la chimenea, más lejos tendrá lugar el máximo de concentración y este será de una menor magnitud. Este resultado es muy importante y nos muestra de una forma muy clara que desde el punto de vista del impacto ambiental chimeneas de gran altura son preferibles en todos los casos.

Por último, el **modelo gaussiano en una dimensión**, se emplea cuando hay que tener en cuenta, de forma aproximada, el efecto de la altura de mezclado (L). A cierta distancia desde la fuente en la dirección del viento, la concentración de contaminante se puede considerar verticalmente homogénea entre $z=0$ y $z=L$ y la dispersión sólo ocurre en el plano xy . De nuevo podemos modificar la ecuación (18) para calcular la concentración a partir de esa distancia:

$$C(x, y) = \frac{Q}{(2\pi)^{1/2} uL\sigma_y} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \quad (21)$$

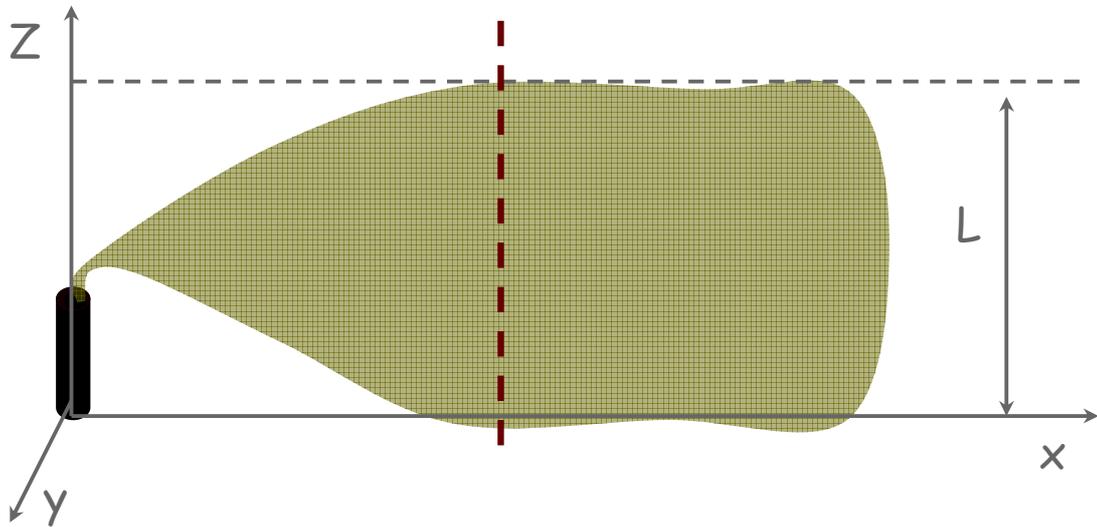


Figura 2.12. Ilustración de las circunstancias en las que se puede utilizar el modelo gaussiano en una dimensión. Cuando existe un suelo y una altura de mezclado que limitan la dispersión del contaminante es posible suponer que se produce mezclado total en la dirección z para una distancia suficientemente alejada de la fuente (línea discontinua).

Para determinar el parámetro Δh o **ascenso vertical** podemos recurrir a múltiples fórmulas empíricas como la de Holland:

$$\Delta h = v_s D / u \left(1.5 + 2.68 \cdot 10^{-3} p D_i \frac{T_s - T_a}{T_s} \right) \quad (m) \quad (22)$$

En la que v_s es la velocidad de salida del gas (m/s), D es el diámetro de la chimenea (m), u la velocidad del viento (m/s), p la presión (en mb), T_s la temperatura de salida de los gases de la chimenea y T_a la temperatura atmosférica.

El ascenso vertical es tanto mayor cuánto más grande es la velocidad de salida de gas (mayor impulso inicial) y mayor la diferencia entre la temperatura de salida de los gases y la temperatura ambiente (mayor flotación). Por los motivos expresados

anteriormente, es siempre deseable emitir los gases a gran temperatura y mucha velocidad para incrementar la altura efectiva de emisión.

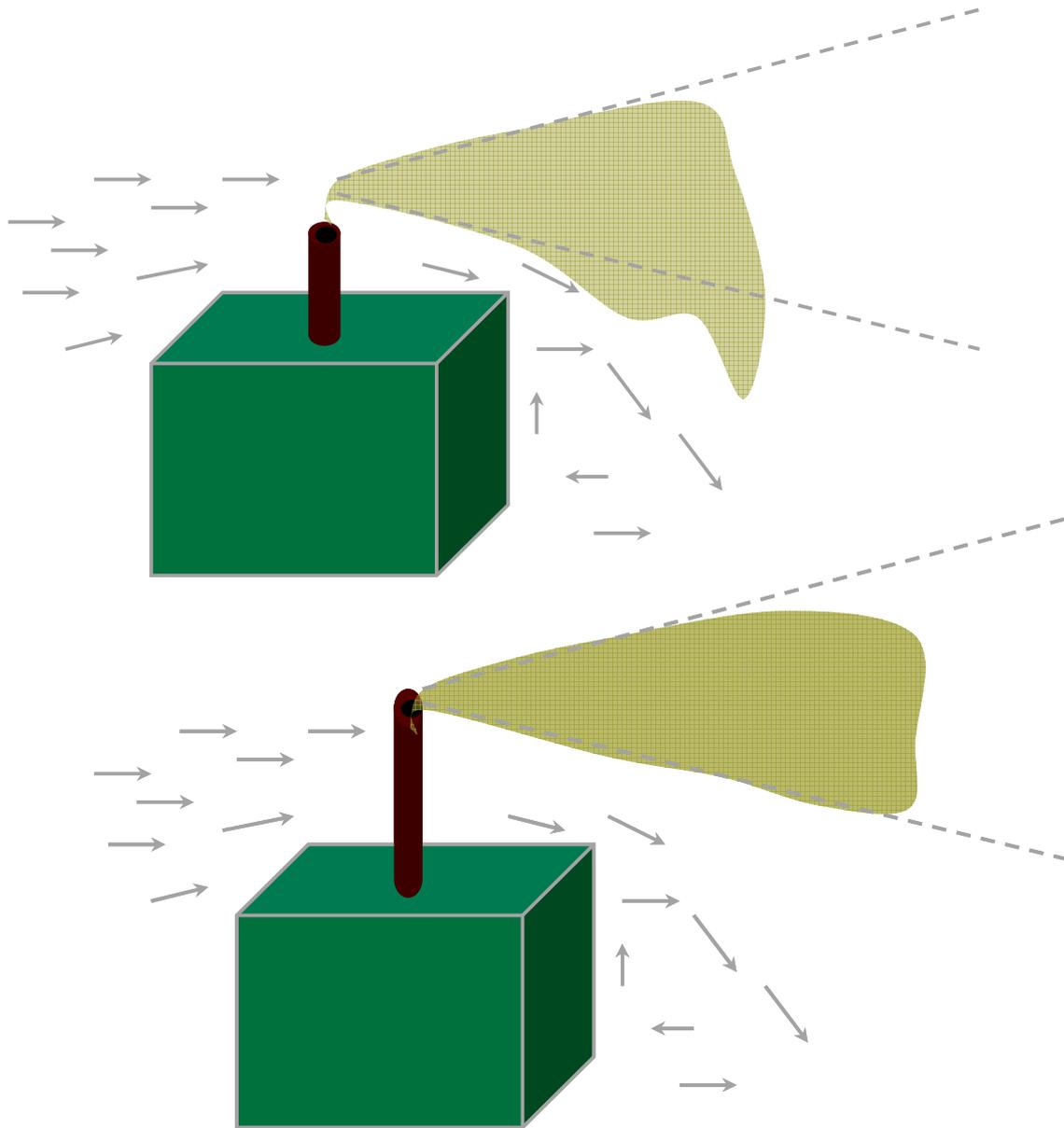


Figura 2.13. Efecto de los edificios sobre la dispersión de contaminantes. La presencia de una edificación provoca turbulencias adicionales que arrastran el penacho hacia el suelo. El efecto se palía construyendo chimeneas suficientemente altas con respecto a la altura del propio edificio.

2.5. Modelos sofisticados.

2.5.1. Refinamientos del modelo gaussiano.

Uno de los modelos sofisticados más simples es la aplicación del modelo gaussiano a largo plazo. Para ello basta con promediar sobre todas las condiciones atmosféricas, fuentes y dirección del viento:

$$\bar{C} = \sum_{\text{viento}} \sum_{\text{fuentes}} \sum_{\substack{\text{estabilidad} \\ \text{atmosférica}}} f_i \cdot C_i(x, y, z) \quad (23)$$

Otra modificación del modelo gaussiano consiste en tener en cuenta la altura del edificio sobre el que se sitúa la fuente. Como hemos visto, la fuente debe estar alta respecto al suelo, pero también respecto al techo del edificio en el que se encuentra para evitar dispersión hacia el suelo. La recomendación es que la altura de la chimenea sea una vez y media la del edificio.

2.5.2. Incorporación de la cinética de primer orden en el modelo gaussiano.

La concentración obtenida por el modelo gaussiano en sus distintas modificaciones debe corregirse en el caso de que el contaminante en estudio sufra una reacción química o fotoquímica que provoque que su concentración disminuya con el tiempo. Para ello basta recurrir a las ecuaciones cinéticas correspondientes e integrar la ecuación respecto del tiempo. Por ejemplo, si la molécula se degrada según una ecuación de primer orden, la concentración respecto del tiempo es:

$$\frac{dC}{dt} = -kC(t) \rightarrow \int_{C_0}^C \frac{dC}{C} = -\int_0^t k dt \rightarrow C(t) = C_0 \exp(-kt)$$

donde k es la constante de velocidad. Si definimos el tiempo de vida medio $t_{1/2}$ de la molécula como el tiempo necesario para que $C(t)=C_0/2$, tenemos:

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} \quad (24)$$

Entonces la exponencial o factor de destrucción se puede describir como:

$$f = \exp(-kt) = \exp\left(-\frac{t \cdot \ln 2}{t_{1/2}}\right) = \exp\left(-\frac{x \cdot \ln 2}{u \cdot t_{1/2}}\right) \quad (25)$$

y se calcula la concentración de contaminante como:

$$C = C_{\text{Gauss}} f \quad (26)$$

2.5.3. Modelos de celda múltiple.

Son modelos que combinan los modelos de celda con los de dispersión, con lo que se pueden emplear para emisiones continuas y puntuales a la vez en regiones definidas. Consisten en dividir el volumen total en celdas en las que se almacena el valor numérico de la concentración de varios contaminantes. Posteriormente se establecen los balances de flujo entre las cajas y se consideran la cinética de los contaminantes. El protocolo de cálculo es muy simple:

1. Se determina la concentración en $t=0$ teniendo en cuenta las emisiones (puntuales o no) y las condiciones atmosféricas de viento, humedad e insolación.
2. A partir de modelos gaussianos se determina la dispersión de cada uno.
3. Se aplica si procede el efecto de la cinética.
4. Las concentraciones obtenidas en los pasos 2 y 3 se llevan de nuevo al paso 1 para calcular las concentraciones en $t+dt$.

De esta manera podemos determinar la evolución de una serie de contaminantes a lo largo del tiempo, ver las relaciones entre los picos de concentración máximos de unos y otros y establecer qué factores los modifican o si alguno de ellos se autorregula.

RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS.

2.1 Una ciudad tiene la siguiente descripción: $W=5$ Km, $L=15$ Km, $u=3$ m/s, $H = 1000$ m. La concentración de fondo de monóxido de carbono es $b=5 \mu\text{g}/\text{m}^3$. El índice de emisiones por unidad de área es $q = 4 \times 10^{-6} \text{ g s}^{-1} \text{ m}^{-2}$. ¿Cuál es la concentración de CO sobre la ciudad?

Suponiendo un modelo de celda fija estacionaria, la aplicación directa de la ecuación (4) da como resultado:

$$C_{\infty} = b + \frac{qL}{uH} = 5 \mu\text{g} / \text{m}^3 + \frac{4 \mu\text{g m}^{-2} \text{ s}^{-1} \times 15000 \text{ m}}{3 \text{ m s}^{-1} \times 1000 \text{ m}} = 25 \mu\text{g}/\text{m}^3$$

2.2 El 10 de Febrero de 2003, se tomaron las siguientes lecturas de concentración de CO en estaciones de vigilancia de Sevilla:

Alcalá de Guadaira: $600 \mu\text{g} / \text{m}^3$
Parque de los Príncipes: $2200 \mu\text{g} / \text{m}^3$

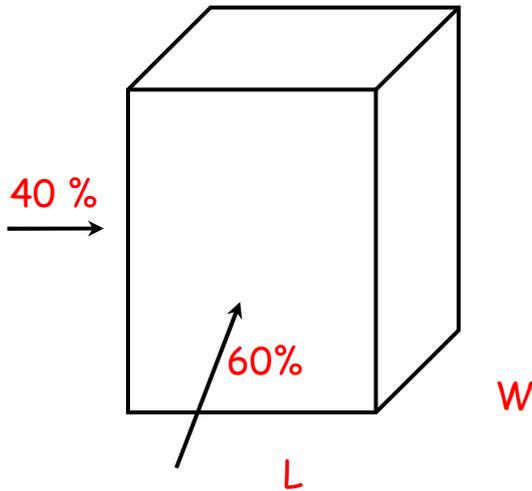
Teniendo en cuenta que los vientos preferentes en Sevilla ciudad son de componente sur (valor anunciado para el 10 de Febrero: 1 MPH), y que la distancia de la dársena al cementerio es de 10 Km, hacer una estimación, utilizando el modelo de celda fija estacionaria, de cuál es la cantidad de CO que se emite en Sevilla por metro cuadrado y por segundo. Suponer que la altura de mezclado sobre la ciudad es 1000 m.

La única complicación del problema es determinar a cuánto equivale 1 MPH (milla por hora) en el SI. Existe cierta controversia entre la milla americana y la inglesa y las de otros países, pero tomaremos que 1 milla son 1600 m. por tanto, $1 \text{ MPH} = 0.42 \text{ m/s}$. Por lo demás, consideramos que la componente sur viene de Alcalá de Guadaira y que la altura de mezclado son 1000 m. Despejando el valor de q en la ecuación (4) se tiene:

$$q = (C_{\infty} - b) \frac{uH}{L} = 66.7 \mu\text{g m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

Lógicamente el resultado varía según el valor que adoptemos para 1 MPH. Por ejemplo, si consideramos que 1 milla son 1600 m, el resultado es de $71 \mu\text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

2.3 Para la ciudad del problema 2.1, las condiciones meteorológicas se presentan el 40% del tiempo. Durante el 60% restante, el viento sopla formando ángulos rectos con la dirección que se muestra en la figura con una velocidad de 6 m/s y la misma altura de mezclado ¿Cuál es la concentración promedio anual de CO en la ciudad?



Calculamos C_∞ para las nuevas condiciones a partir del siguiente balance de materia:

$$ubLH + qWL - uLHC_e = 0 \rightarrow C_e = b + \frac{qW}{uH}$$

Sustituyendo los datos se obtiene $C_e = 8.33 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

A partir de los datos de frecuencia, la concentración promedio sería:

$$\bar{C}_\infty = \sum_i f_i \cdot [C_\infty]_i = 25 \cdot 0.4 + 8.33 \cdot 0.6 = 15 \mu\text{g}/\text{m}^3$$

2.5 Supongamos que el límite legal para concentración en aire de PM10 es $75 \mu\text{g}/\text{m}^3$ y que el valor obtenido para una ciudad es de $190 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Si la concentración de fondo es $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ¿en qué porcentaje han de reducirse las emisiones para cumplir la norma?

Este problema se resuelve por aplicación directa de la ecuación (6). Con ello obtenemos que:

$$q_R = q_L \frac{C_R - b}{C_L - b} \rightarrow \frac{q_R}{q_L} = 0.32$$

donde L indica legal y R real. Esto significa que se está emitiendo 3.1 veces más de lo permitido. La cantidad que se tendría que emitir es 0.32 veces la que se emite en la actualidad, por lo que tendremos que disminuir la emisión aproximadamente en un 68 %.

2.6 Una calle tiene 25 m de anchura, 1000 m de longitud y está bordeada por edificios que limitan la dispersión de contaminantes a una altura de 100 m. Una tubería de gas natural (metano) se rompe y el gas se filtra a través de las alcantarillas y los drenajes del suelo, emitiendo una cantidad igual a $4 \text{ g}/(\text{m}^2\text{s})$. Si la velocidad del viento es 0.5 m/s, ¿cuánto tarda en alcanzarse el límite de explosión (5.4 % en volumen para el metano)? Suponer que la concentración de fondo, b, y la concentración inicial son cero.

Determinamos la concentración de la celda estacionaria C_e a partir de la ecuación (4) para $b=0$, resultando $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Éstos son 5 moles de metano que, si las condiciones son estándar corresponden a $0.122 \text{ m}^3 \text{ metano}/\text{m}^3$ ($22.4 \text{ L}/\text{mol}$). El volumen de la calle despreciando edificios es $WLH=2.5 \cdot 10^6 \text{ m}^3$. El límite de explosión sería que $C(t)$ fuera $1.35 \cdot 10^5 \text{ m}^3$ de metano (el 5.4 %), es decir $0.054 \text{ m}^3 \text{ metano}/\text{m}^3$. Despejando t de la ecuación (7):

$$t = -\frac{L}{u} \ln\left(\frac{C_\infty - C(t)}{C_\infty}\right) = 19.3 \text{ min}$$

2.7 Comprobar usando las expresiones de las diapositivas de teoría que el coeficiente de dispersión tiene unidades de longitud

El problema se puede abordar de diferentes maneras. Si partimos de la segunda ley de Fick (ecuación (9)) resulta inmediato que:

$$[K]=L^2/T$$

Si aplicamos ahora la ecuación (15):

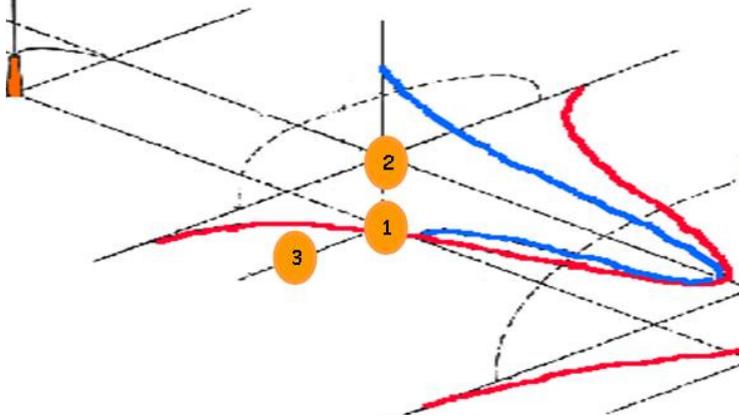
$$[\sigma]=[K]^{1/2}T^{1/2}=L$$

2.8 Comprueba que las concentraciones de los tres modelos de dispersión (3D, 2D y 1D) salen en unidades de masa/volumen.

Se trata de ver que (10), (11) y (12) son dimensionalmente homogéneas. Para esto tenemos que darnos cuenta que las dimensiones de concentración en 1 D se refiere a concentración lineal, por lo que debe tener unidades de g/m (M/L en general), la del modelo 2D será una concentración superficial (M/L^2) y la del modelo 3D sí será una concentración convencional (M/L^3). Los términos exponenciales no contribuyen a la dimensionalidad de la ecuación, porque tenemos $L^2/[(T^{-1})TL^2]=\emptyset$. El denominador del primer factor tiene dimensiones de L para el modelo 1D, L^2 para el 2D y L^3 para el 3D.

2.9 Una industria emite 20 g/s de SO₂ a una altura H = 30 m. La velocidad del viento es 3 m/s. Los valores de σ_y y σ_z a una distancia de 1 Km en la dirección del viento son 30 m y 20 m respectivamente. Estima las concentraciones de SO₂ a 1 Km de distancia de la base de la chimenea y

- (1) A ras del suelo y en el eje del viento
- (2) A 10 metros de altura y en el eje del viento
- (3) A ras del suelo y a 10 metros de distancia del eje del viento



(1) Las coordenadas del punto serán $y=0$ m, $z=0$ m, por lo que según (16) tendremos para contaminantes absorbidos por el suelo

$$C(60, H - 20) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) = 574 \mu\text{g}/\text{m}^3$$

(2) Las coordenadas del punto serán $y=0$ m, $z=10$ m, por lo que según (16) tendremos para contaminantes absorbidos por el suelo

$$C(60, H - 20) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) = 1072 \mu\text{g}/\text{m}^3$$

(3) Las coordenadas del punto serán $y=10$ m, $z=0$ m, por lo que según (16) tendremos para contaminantes absorbidos por el suelo

$$C(60, H - 20) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) = 543 \mu\text{g}/\text{m}^3$$

2.10 Repite los cálculos del problema 2.9 pero ahora suponiendo que el contaminante es monóxido de carbono.

Si suponemos que el contaminante no se absorbe sino que es reflejado por el suelo hay que aplicar la ecuación (18):

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

Para $z = 0$ da justo el doble que la ecuación sin rebote en el suelo. El resultado para los tres casos planteados en el problema es 1148, 1312 y 1086 $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

2.14 Reconsidera el caso planteado por el problema 2.9 pero teniendo en cuenta que el contaminante emitido no es SO_2 , sino uno cuya concentración decae siguiendo una cinética de primer orden y cuyo tiempo de vida media es 22 h ¿Cuál sería la concentración de contaminante en el problema 2.9 si tenemos en cuenta el efecto de la cinética?

Aplicando la ecuación (26), y sabiendo que $t_{1/2} = 22 \text{ h} \times 3600 \text{ s}$, $u = 3 \text{ m/s}$ se obtiene que, para $x=1000 \text{ m}$ (donde son válidos los valores de dispersión proporcionados),

$$C(x = 1000, y = 0, z = 0) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \exp\left(-\frac{x \cdot \ln 2}{u \cdot t_{1/2}}\right) = 572 \mu\text{g}/\text{m}^3.$$

Exactamente el mismo factor de descomposición, $\exp[-x \ln 2 / (u t_{1/2})] = 0.997$, hay que aplicar en los otros dos casos puesto que la distancia a la fuente es la misma.