

Tema 2: Modelos de concentración y dispersión de contaminantes atmosféricos

Tipos principales de modelos de concentración

Estabilidad y turbulencia atmosférica

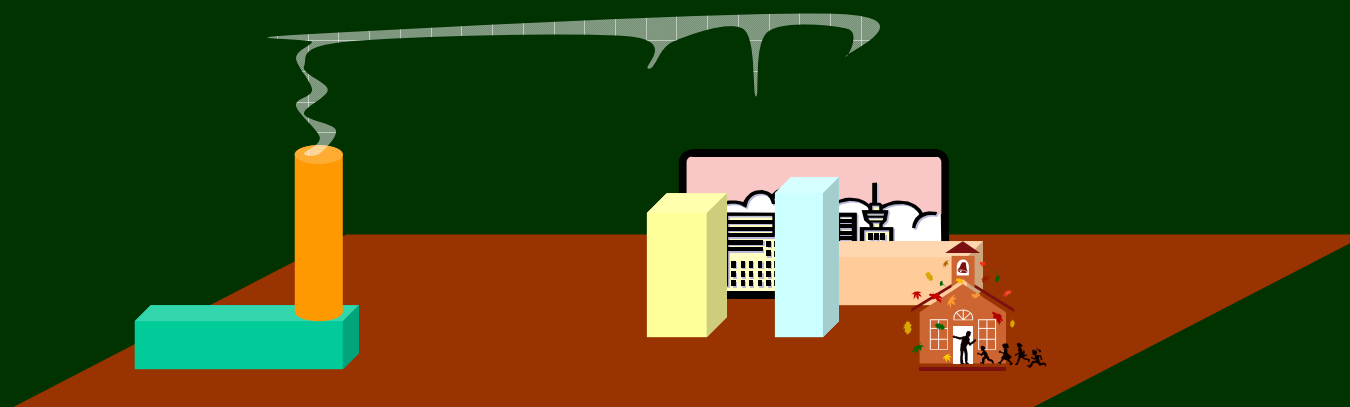
Modelos de celda fija estacionaria

Modelos de dispersión: modelo gaussiano

Modelos de celda múltiple

Tipos principales de modelos de concentración de contaminantes

➤ Son protocolos matemáticos que proporcionan estimaciones de concentración de contaminante en función de una serie de parámetros meteorológicos, químicos, topográficos y de cantidad y velocidad de emisión.



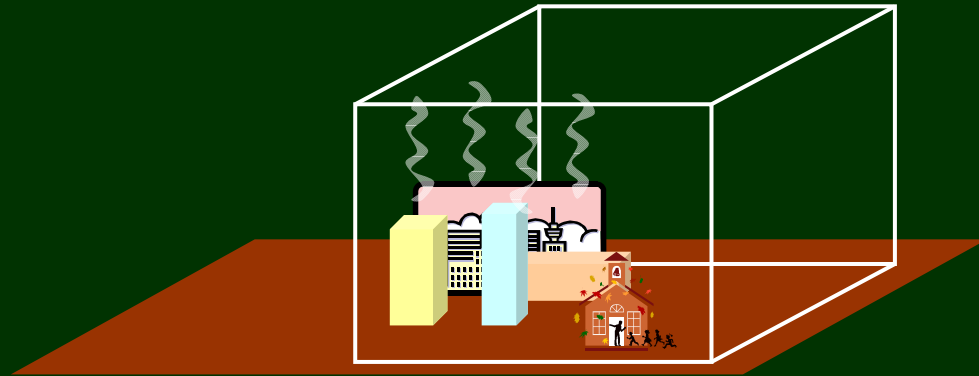
PARÁMETROS DE ENTRADA:

- Cantidad de contaminante emitida por unidad de tiempo. Posición y altura de emisión.
- Velocidad y dirección de los vientos dominantes. Estabilidad atmosférica. Altura de mezclado.
- Comportamiento químico del contaminante: posibles reacciones, vida media.

Tipos principales

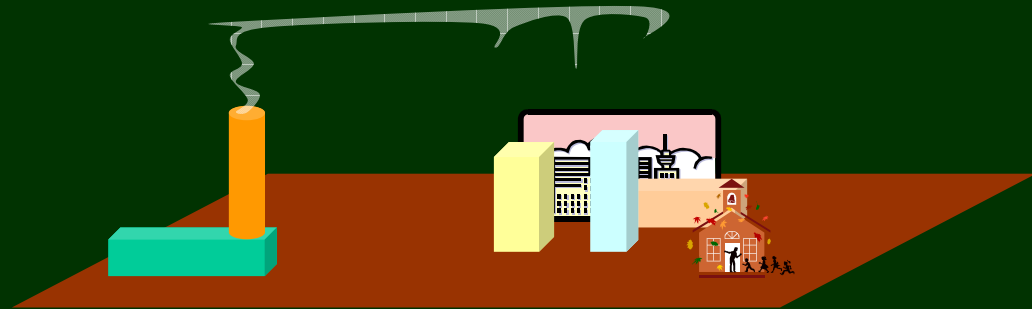
MODELOS DE CELDA
FIJA

(vertidos homogéneos)

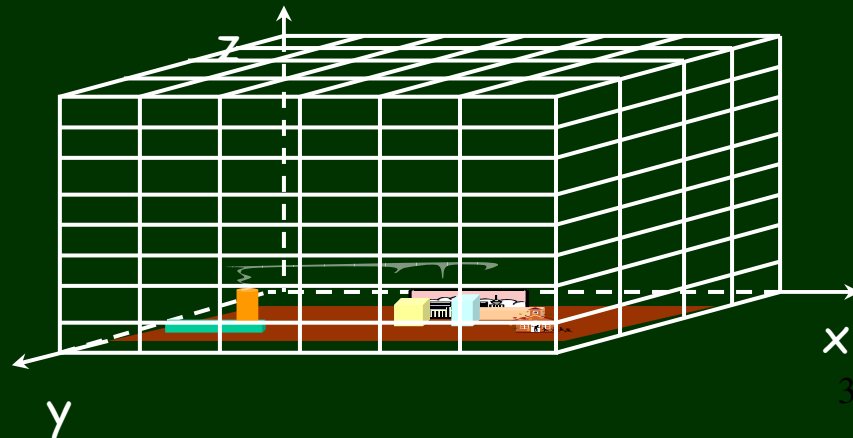


MODELOS
GAUSSIANOS DE
DISPERSIÓN

(vertidos puntuales)

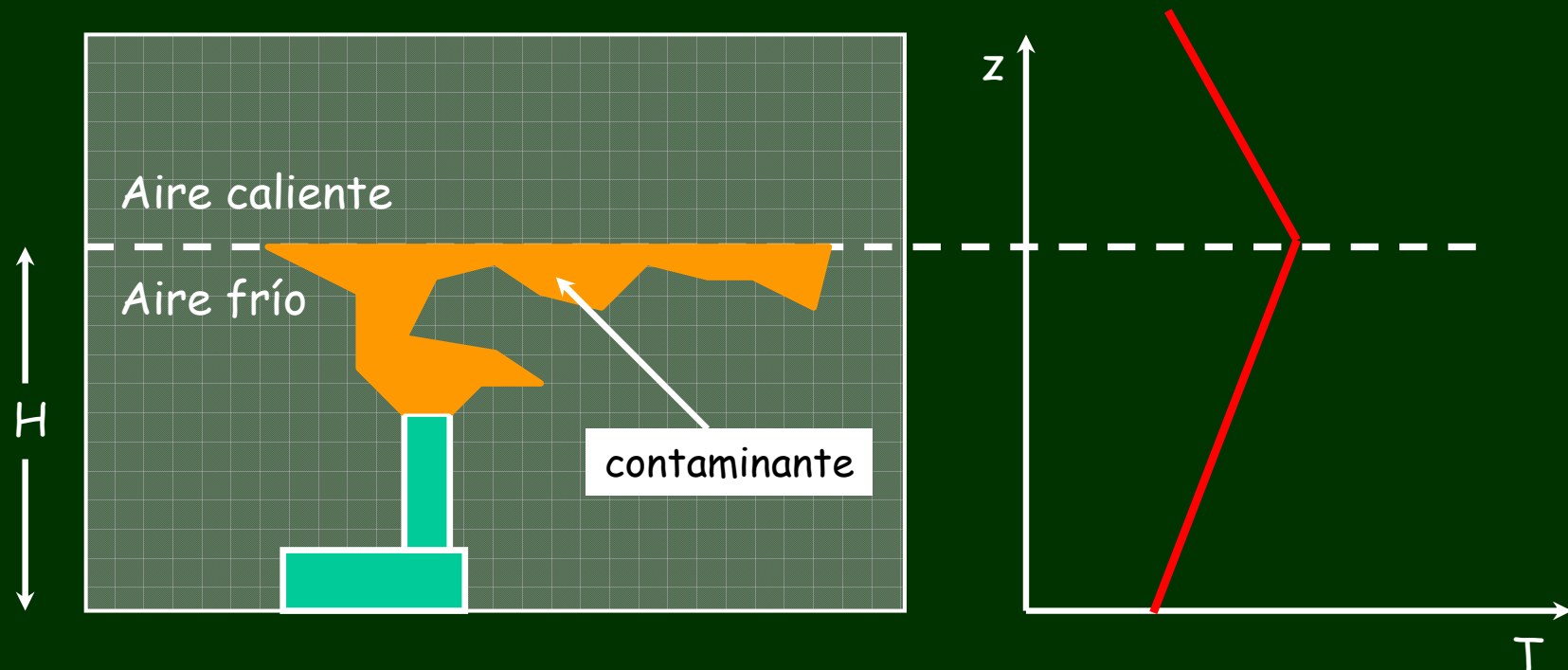


MODELOS
COMBINADOS
(celda múltiple, etc..)



Confinamiento de contaminantes por inversión térmica

- 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.
- Mientras haya inversión, esta barrera constituye la altura de mezclado efectiva en cada periodo del día.



Estabilidad y turbulencia atmosférica: fundamentos

Gradientes de temperatura

Esquema simple:

1. El aire caliente es menos denso y tiende a ascender.
2. Un ascenso de aire caliente produce una expansión del gas, porque la presión disminuye con la altura.

$$dP = - \rho g dz$$

3. La expansión del gas se hace a costa de su energía interna: el aire se enfría:

"entalpía" perdida: $dH = n C_p dT$

Calor específico molar a presión constante

Gradiente adiabático:

Ascenso de una masa de aire seco en ausencia de transferencias de calor con el aire circundante: expansión adiabática (sin intercambio de calor, $dS=0$)

$$\text{Termodinámica: } dH = TdS + VdP = n C_p dT$$

$$dP = - \rho g dz$$

Gradiente de temperatura
adiabático del aire seco:

$$\frac{dT}{dz} = - \frac{g M}{C_p}$$

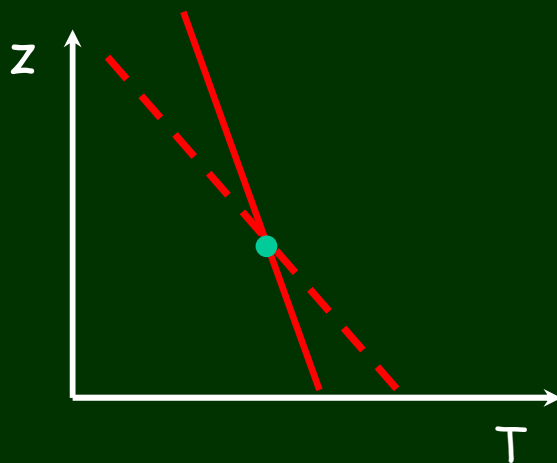
Ejercicio. Comprobar que el gradiente adiabático del aire seco es de unos -10 grados/km.

Datos: M (Masa molecular promedio del aire) = 29 g/mol,

C_p (calor específico a presión constante del aire) = $7/2 R$

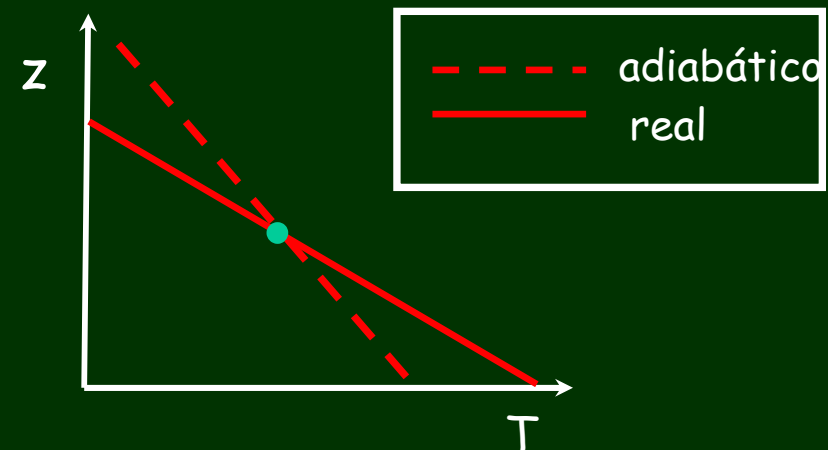
Estabilidad atmosférica

- La existencia o no de corrientes verticales (atmósfera estable o inestable) se deduce de la comparación entre el gradiente adiabático (variación de temperatura de una masa ascendente de aire) y el gradiente real de temperatura (aire circundante)



ATMÓSFERA ESTABLE

El aire ascendente está a menos temperatura que el circundante: vuelve a bajar

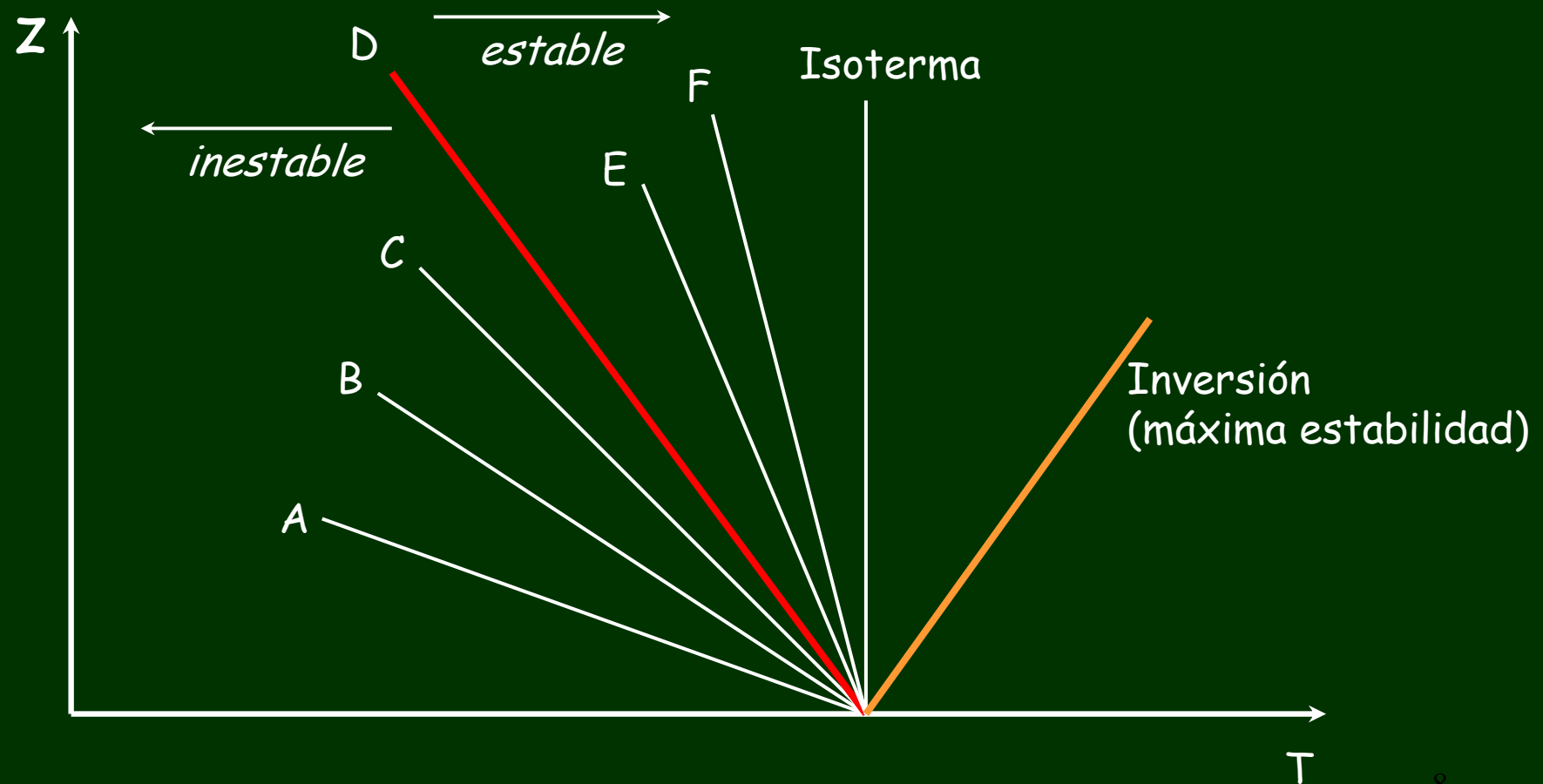


ATMÓSFERA INESTABLE

El aire ascendente está a más temperatura que el circundante: sigue subiendo

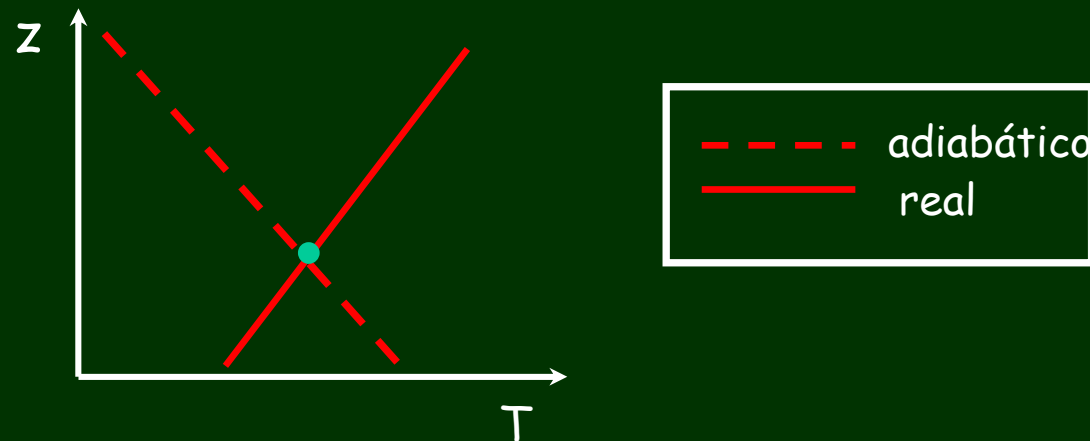
Clases de atmósfera según su estabilidad

Gradiente en altitud de temperaturas:



Inversiones térmicas

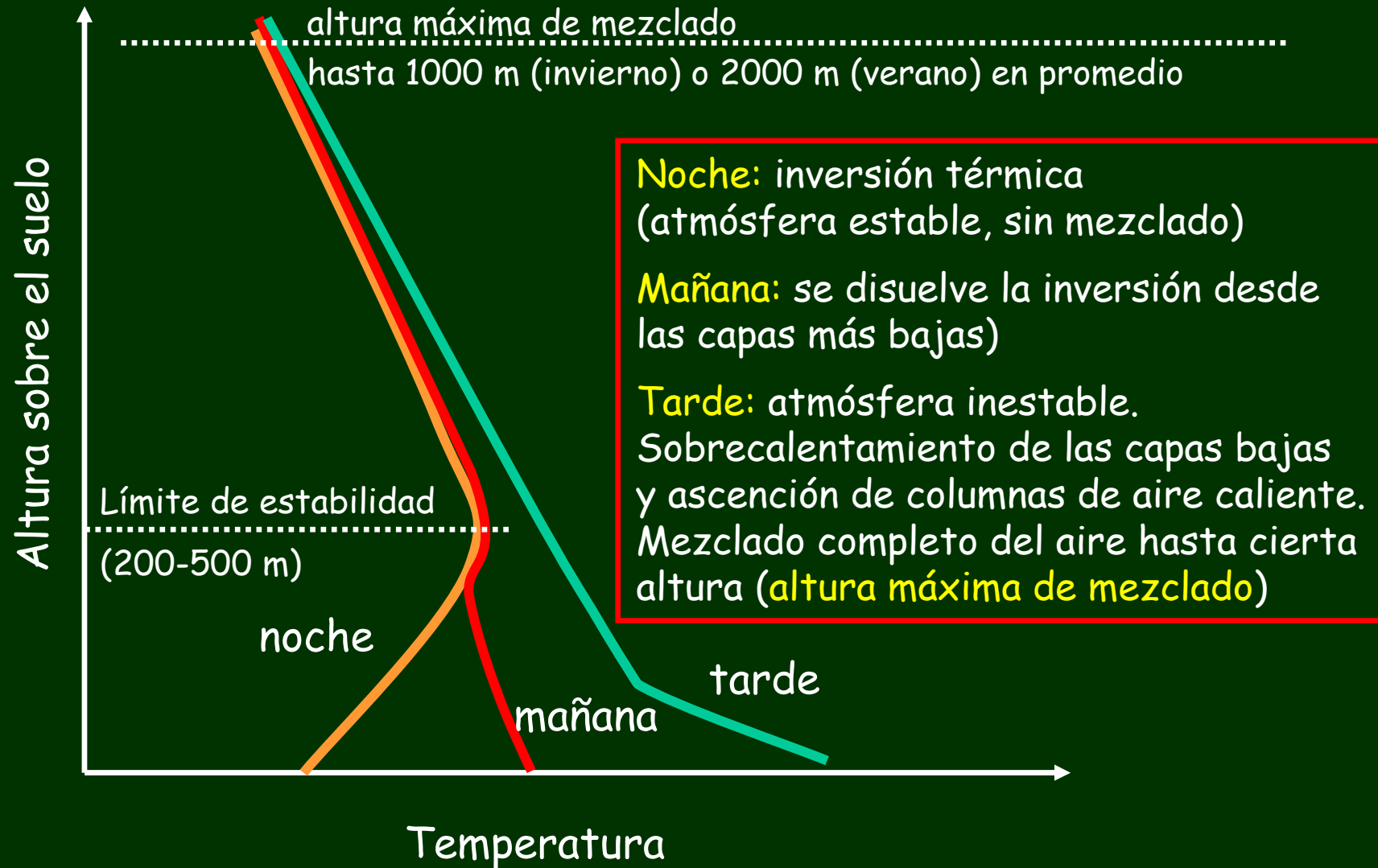
Representan la situación de máxima estabilidad, en la que el gradiente real de temperaturas es positivo (la temperatura aumenta con la altura)



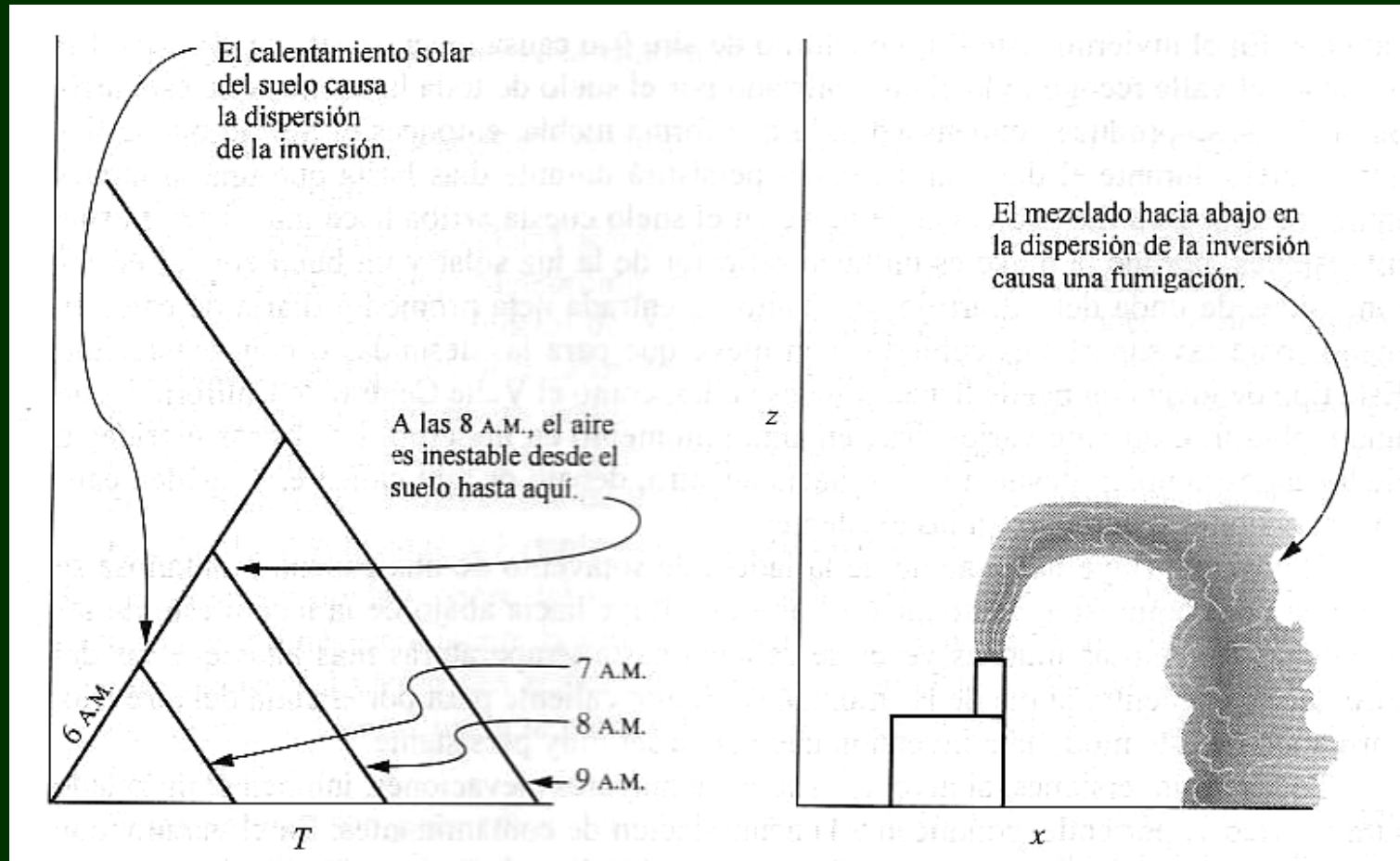
TIPOS:

- Inversión por irradiación: durante la noche el aire cercano al suelo es más frío.
- Inversión de subsidencia: zona de altas presiones (descenso de aire con dispersión lateral en la parte central de los anticiclones)
- Inversión marina: cuando llega a la costa aire frío en contacto con el agua
- Inversión topográfica: el aire frío "rellena" los valles

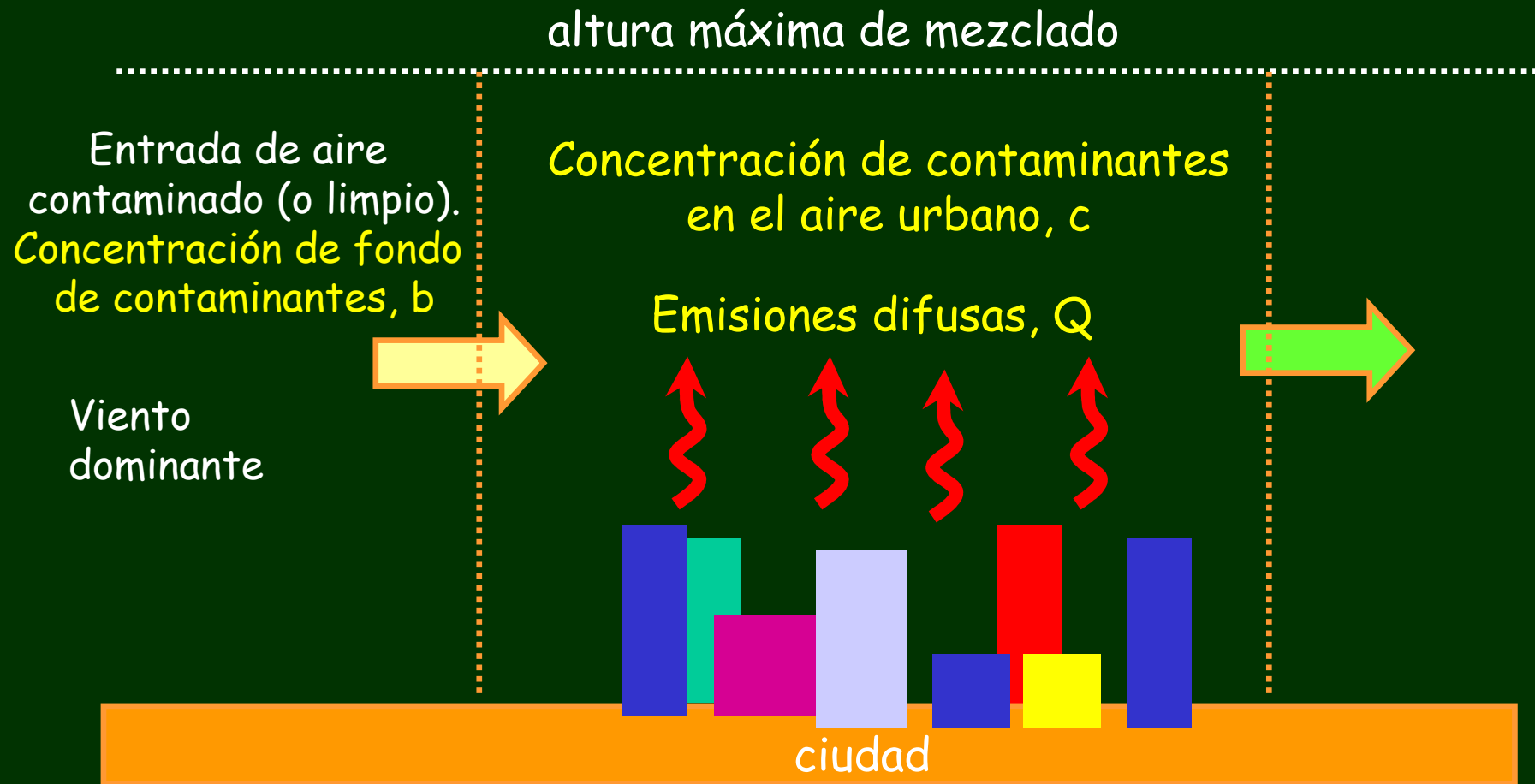
Evolución del gradiente de temperatura a la largo del día



Efecto de "Fumigación" al disolverse la inversión de temperatura a lo largo del día

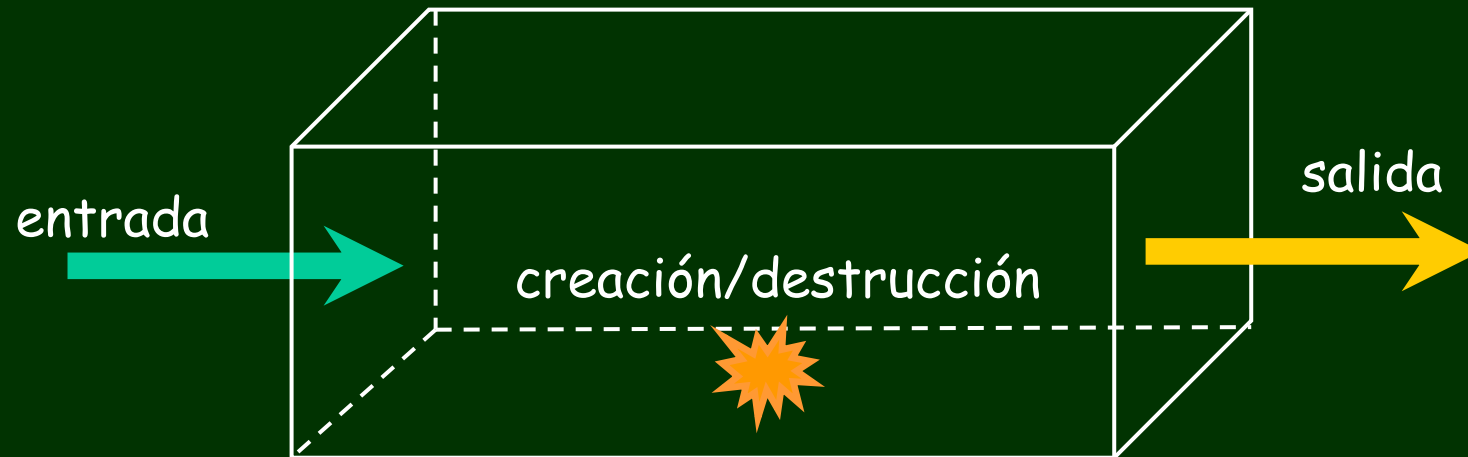


Modelos de celda fija estacionaria: Se utilizan para obtener estimaciones de concentración de contaminante para **emisiones difusas, diseminadas a lo largo de una determinada superficie, como es el caso de una ciudad**

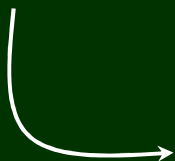


Fundamento básico

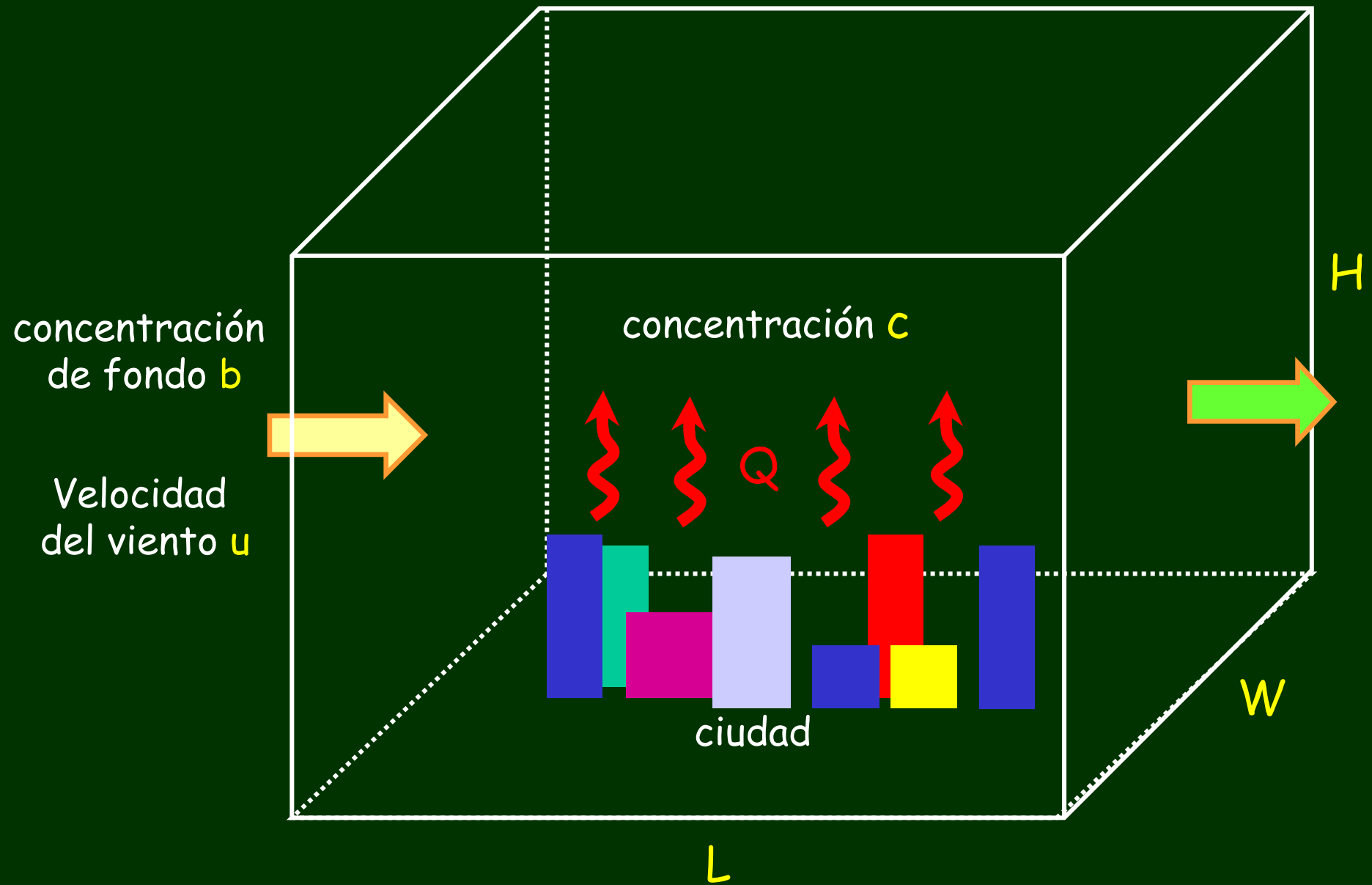
Todos los modelos de concentración están basados en balances de materia en el interior de un determinado volumen de aire:



$$\text{Velocidad de acumulación} = \text{Velocidad de entrada} - \text{Velocidad de Salida} + \text{Velocidad de creación} - \text{Velocidad de destrucción}$$

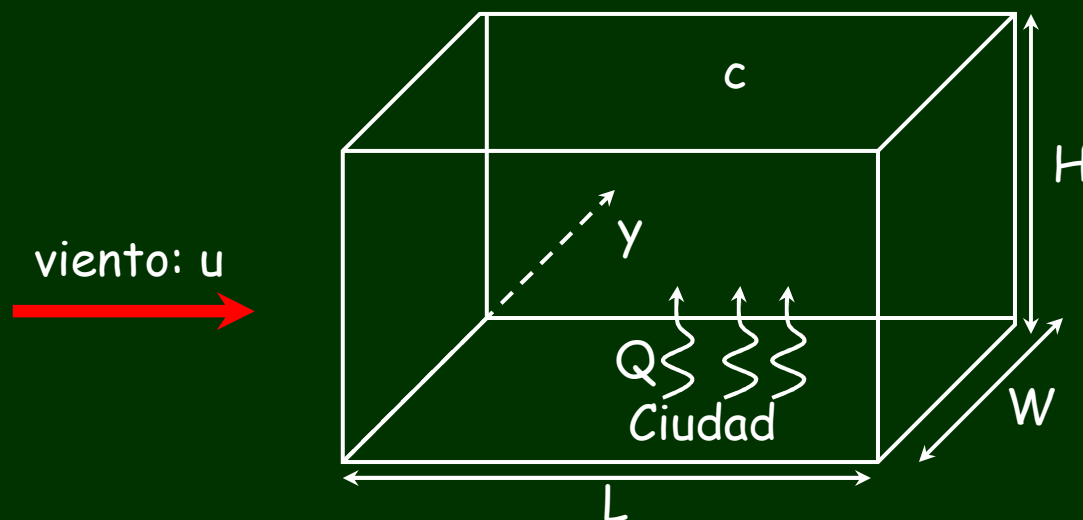


Variación (derivada) de concentración de contaminante con respecto al tiempo



Hipótesis esenciales del modelo de celda fija (1):

- 1- La ciudad es un rectángulo con dimensiones W y L , con uno de sus lados paralelo a la dirección del viento. Normalmente L se refiere a las dimensiones de la ciudad en la dirección del viento
- 2- La turbulencia atmosférica produce el mezclado completo y total de los contaminantes hasta la altura de mezclado H y no hay mezclado por encima de esa altura. El resultado es que se puede asumir que existe una concentración homogénea c , que es igual en todo el volumen de aire sobre la ciudad.



Hipótesis esenciales del modelo de celda fija (2):

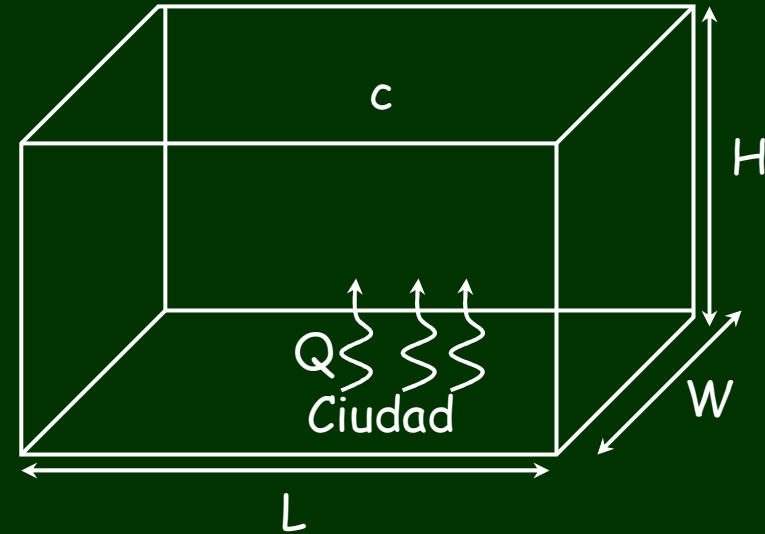
- 3- El viento sopla en la dirección x con velocidad u . Esta velocidad es constante e independiente del tiempo, lugar o elevación por encima del suelo.
- 4- La concentración de contaminantes que entra en la ciudad ($x=0$) desde el exterior con el viento es constante e igual a b (*concentración de fondo*)
- 5- El índice de emisiones de contaminantes por unidad de área es q (por ejemplo, en $g\ s^{-1}\ m^{-2}$). Este índice es constante y no varía con el viento.
- 6.- Ningún contaminante entra o sale por los lados perpendiculares a la dirección del viento, ni por el lado superior (altura de mezclado).

Celda fija estacionaria

Índice de emisiones: $Q = q W L$

masa TOTAL por
unidad de tiempo
(g s^{-1})

masa por unidad de
tiempo y unidad de
superficie ($\text{g s}^{-1} \text{m}^{-2}$)



Suponemos que se ha alcanzado equilibrio estacionario (la concentración no varía con el tiempo):

Suponemos que el contaminante es estable (no se destruye ni crea en la atmósfera, la única fuente son las emisiones)

$$\begin{array}{ccccccc} \text{Velocidad de} & & \text{Velocidad de} & & \text{Velocidad de} & & \text{Velocidad de} \\ \text{acumulación} & = & \text{entrada} & - & \text{de Salida} & + & \text{de creación} & - & \text{destrucción} \\ \downarrow 0 & & & & & & \downarrow 0 & & \downarrow 0 \end{array}$$



Cantidad que entra = cantidad que sale

Celda fija estacionaria (2)

El balance de materia se reduce a:

$$\underbrace{u b W H + q W L}_{\text{entra y se emite}} - \underbrace{u c W H}_{\text{sale}} = 0$$

$$c = b + \frac{q L}{u H}$$

Importante: la concentración es tanto más alta cuanto más larga sea la ciudad en la dirección del viento, y además, ésta es independiente de la anchura.

Promedio sobre diversas condiciones meteorológicas

$$\bar{c} = \sum_i c_i \times f_i$$

Conc. promedio

Suma para todas las condiciones meteorológicas

Frecuencia en la que se produce cada condición meteorológica

Otras mejoras importantes:

- 1) Inclusión de procesos químicos y fotoquímicos que transforman (destruyen/crean) los contaminantes
- 2) Consideración de situaciones no estacionarias (evolución temporal de la concentración de contaminantes)

Contaminante no estable (se destruye con una velocidad k_D)

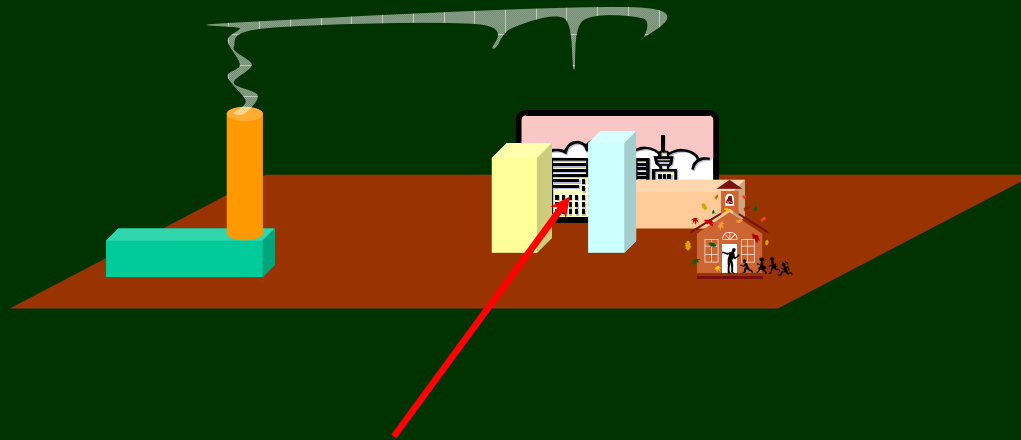
El balance de materia se expresa entonces como:

$$\underbrace{u b W H + q W L}_{\text{entra y se emite}} - \underbrace{u c W H}_{\text{sale}} - \underbrace{k_D c W H L}_{\text{Destrucción (cinética de primer orden)}} = 0$$

$$c_0 = b + \frac{q L}{u H} \quad \Rightarrow \quad c = \frac{c_0}{1 + k_D L / u}$$

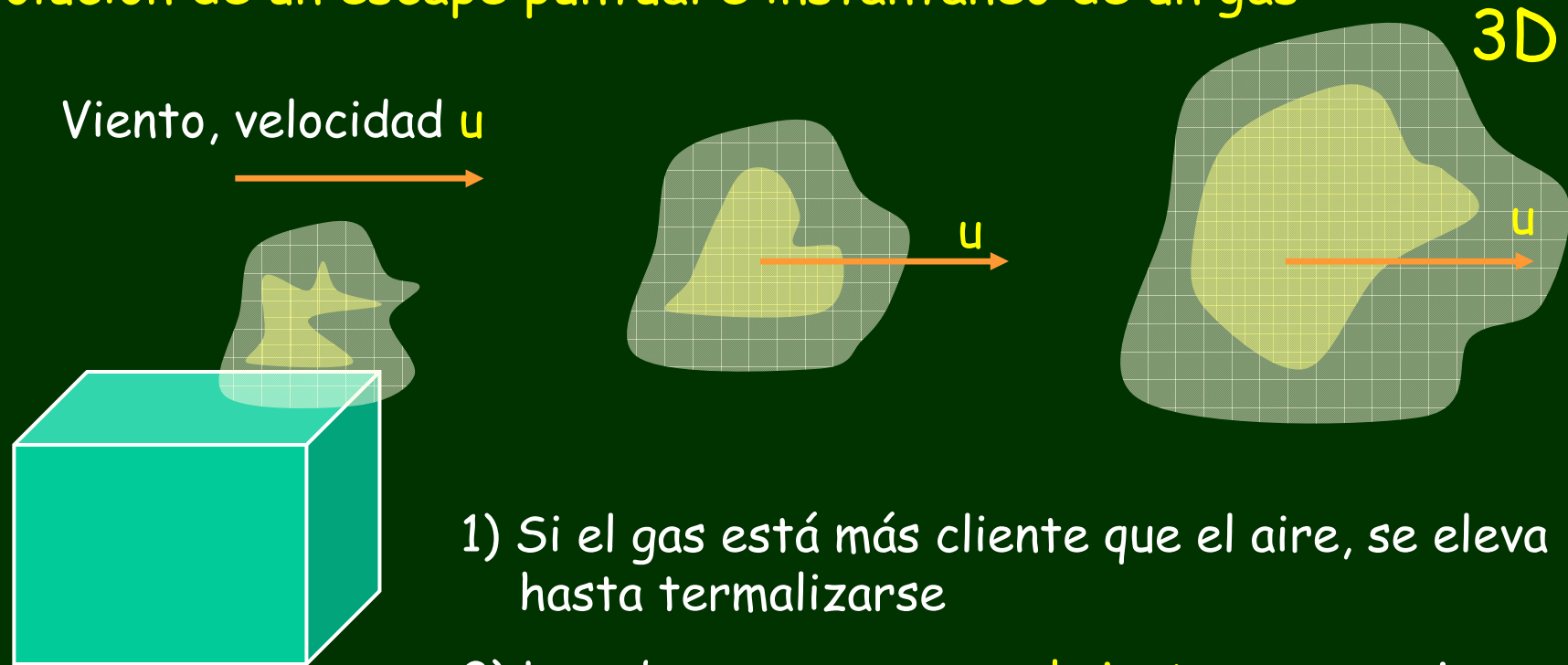
Modelos de dispersión: Modelo gaussiano

- Son los que se utilizan para estimar la concentración de contaminante producida por una fuente puntual, por ejemplo, la chimenea de una fábrica, o el escape de un depósito



Objetivo: ¿cuál es la concentración a cierta distancia de la fuente?

Evolución de un escape puntual e instantáneo de un gas



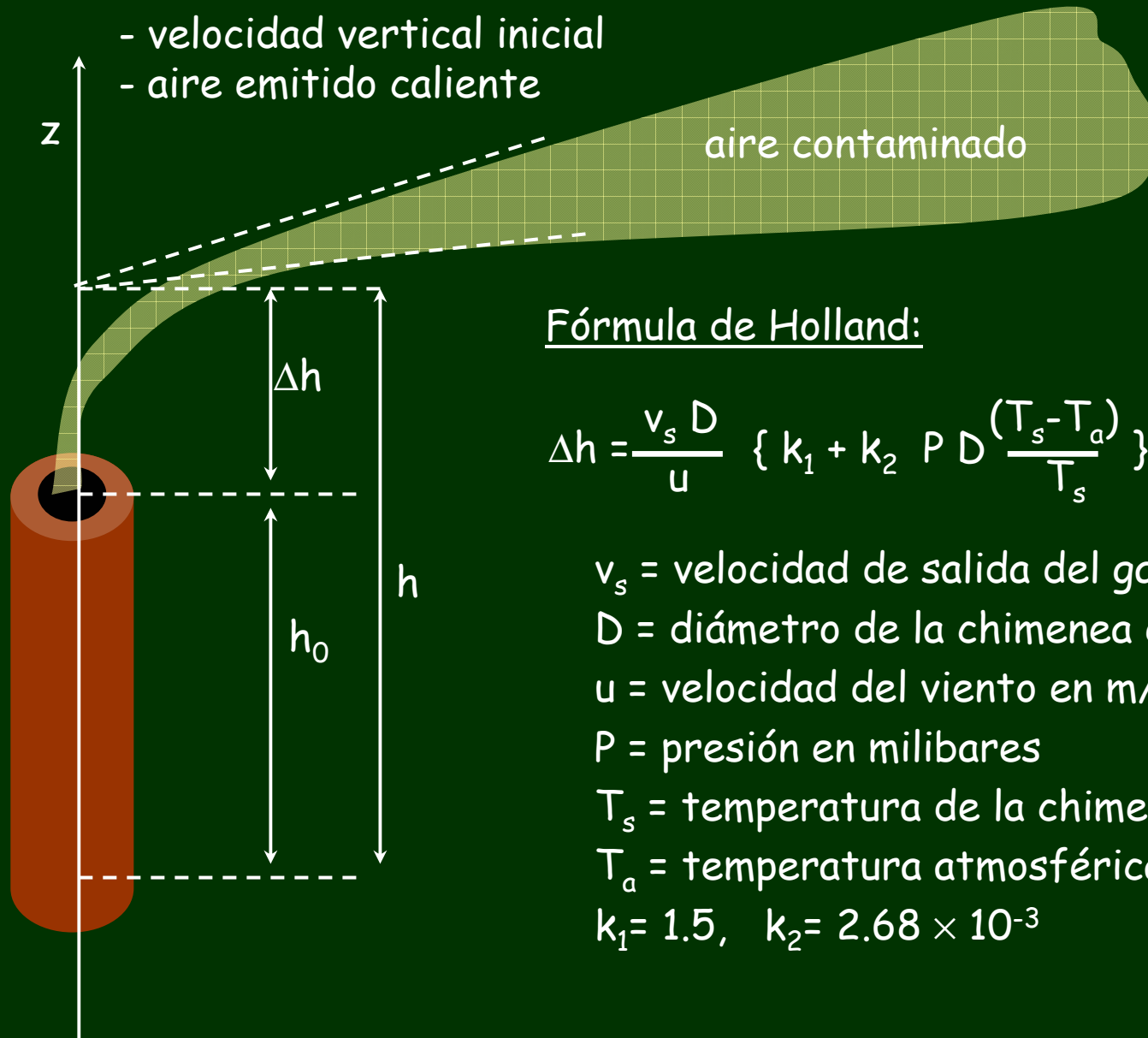
- 1) Si el gas está más caliente que el aire, se eleva hasta termalizarse
- 2) La nube **se mueve con el viento**, con su misma dirección y velocidad
- 3) Las turbulencias del aire hacen que la nube **se expanda** continuamente en las tres direcciones espaciales x, y, z (expansión 3D)

Evolución de un escape puntual y continuado por una chimenea

La combinación de la "fuerza" de emisión, la velocidad del viento y la turbulencia atmosférica da lugar a la formación de una estructura característica, que se denomina "penacho" ("plume" en inglés)



Ascensión vertical de la columna de humo (altura efectiva de emisión)



Fórmula de Holland:

$$\Delta h = \frac{v_s D}{u} \left\{ k_1 + k_2 P D \frac{(T_s - T_a)}{T_s} \right\} \text{ (en metros)}$$

v_s = velocidad de salida del gas en m/s

D = diámetro de la chimenea en m

u = velocidad del viento en m/s

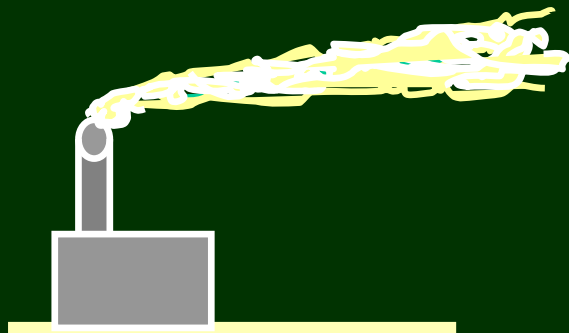
P = presión en milibares

T_s = temperatura de la chimenea en K

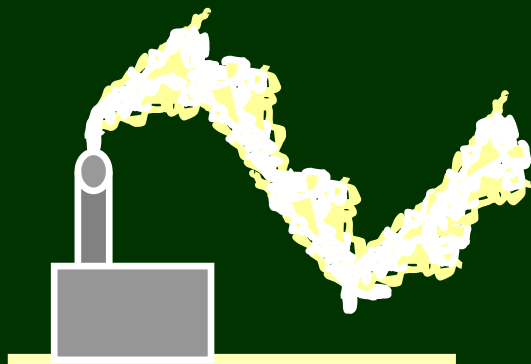
T_a = temperatura atmosférica en K

$k_1 = 1.5$, $k_2 = 2.68 \times 10^{-3}$

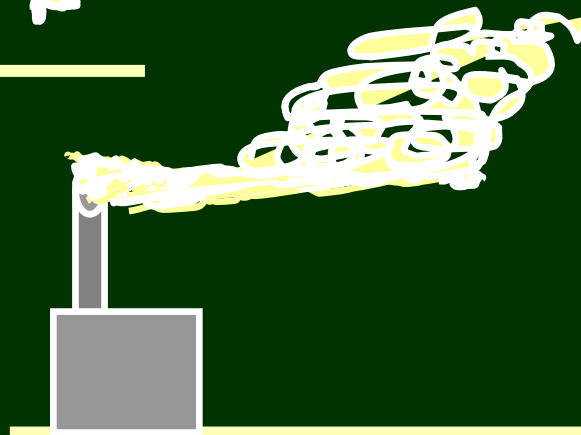
Penachos de una chimenea según estabilidad atmosférica



Atmósfera estable

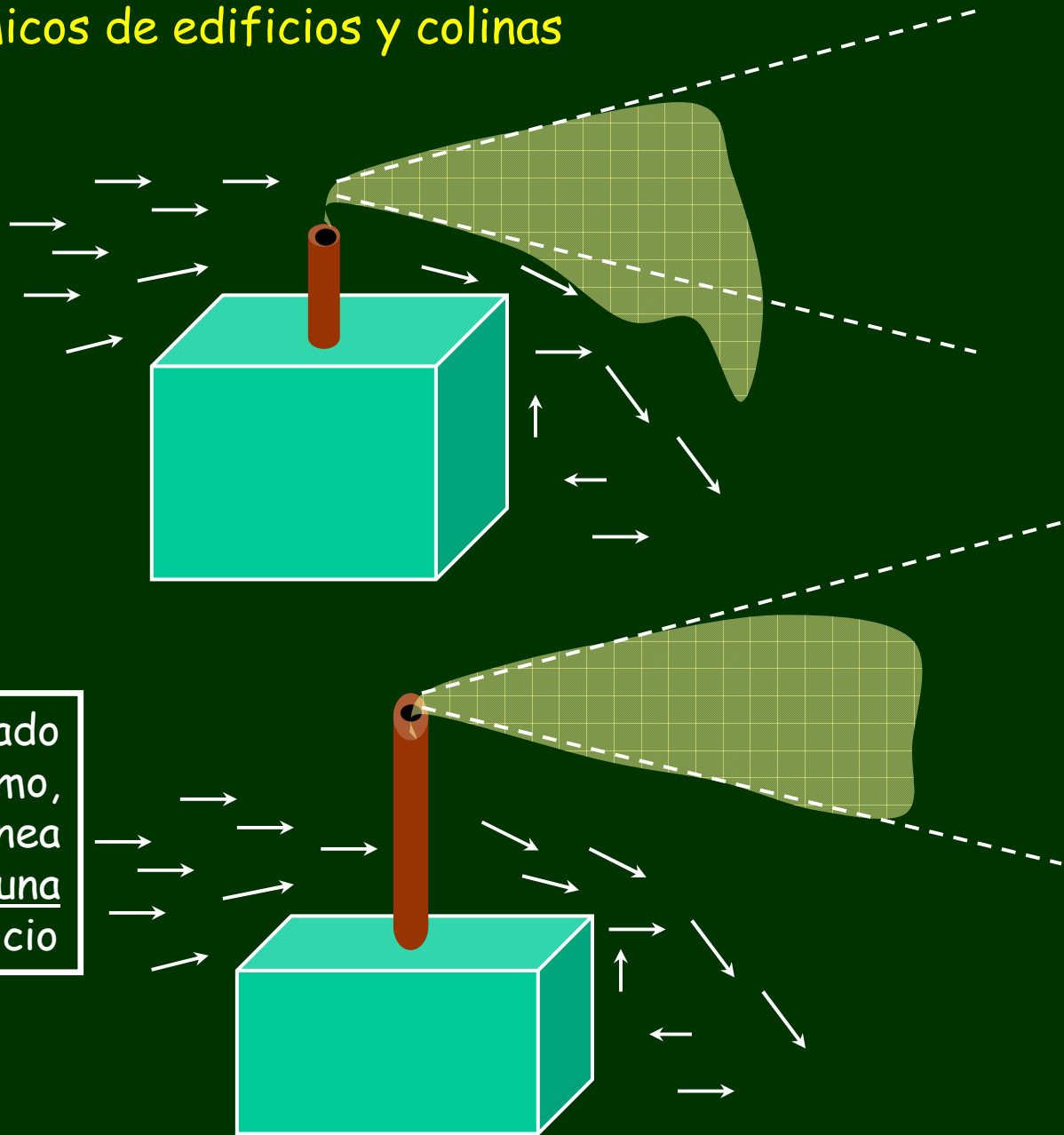


Atmósferas inestables



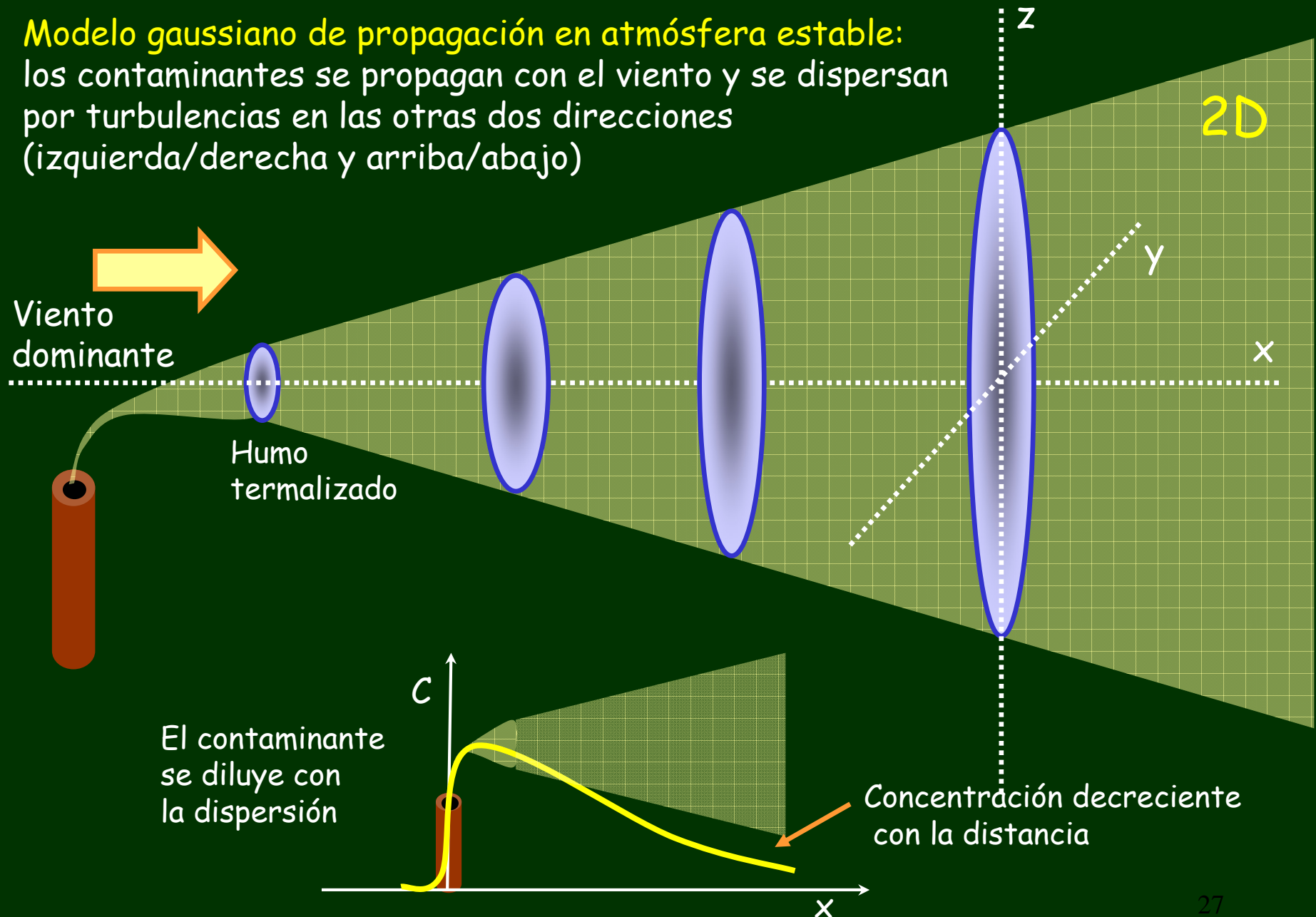
Efectos aerodinámicos de edificios y colinas

➤ Cuando la fuente se encuentra sobre un edificio, ésta debe tener una altura suficiente con respecto al tejado del edificio para evitar la dispersión del humo hacia el suelo.

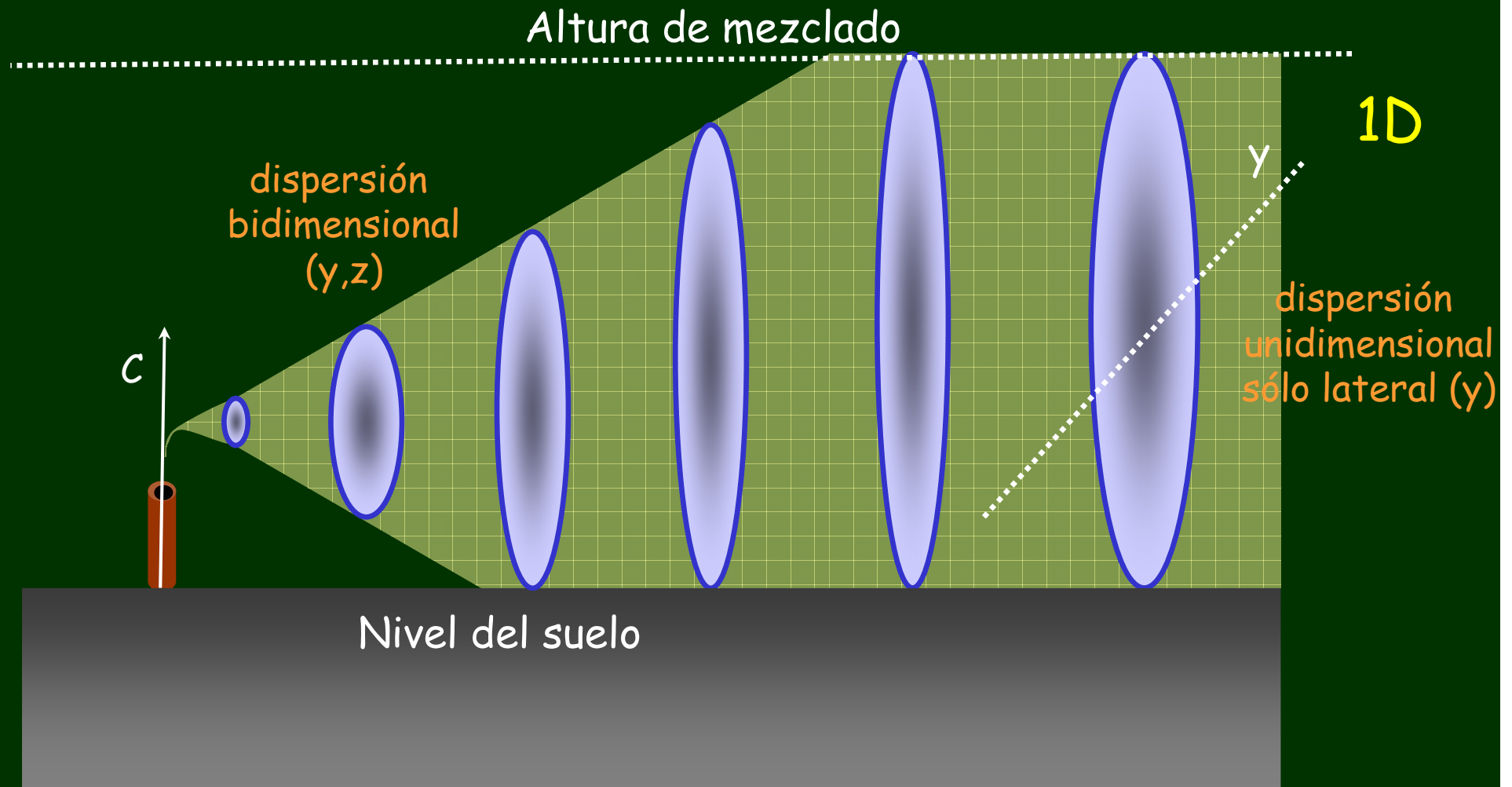


El criterio recomendado indica que, como mínimo, la altura de la chimenea ha de ser al menos una vez y media la del edificio

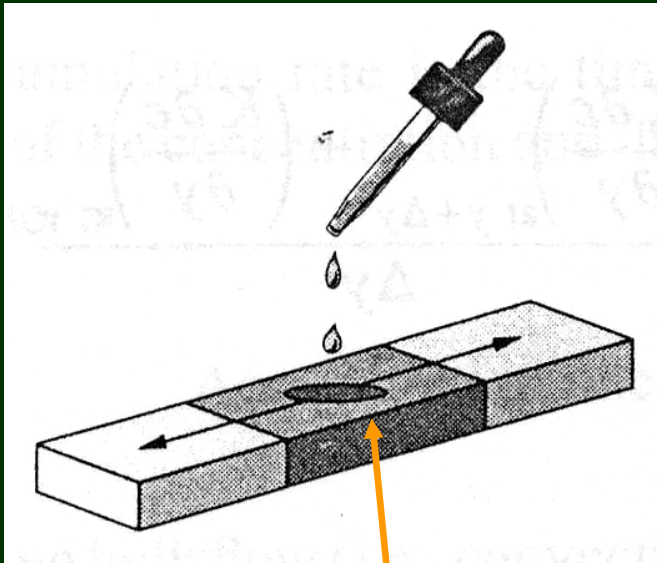
Modelo gaussiano de propagación en atmósfera estable:
los contaminantes se propagan con el viento y se dispersan por turbulencias en las otras dos direcciones (izquierda/derecha y arriba/abajo)



Saturación de la dispersión vertical por la altura de mezclado



Dispersión turbulenta: teoría de la difusión



Difusión en una dimensión (Ley de Fick):

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



K : constante de dispersión turbulenta

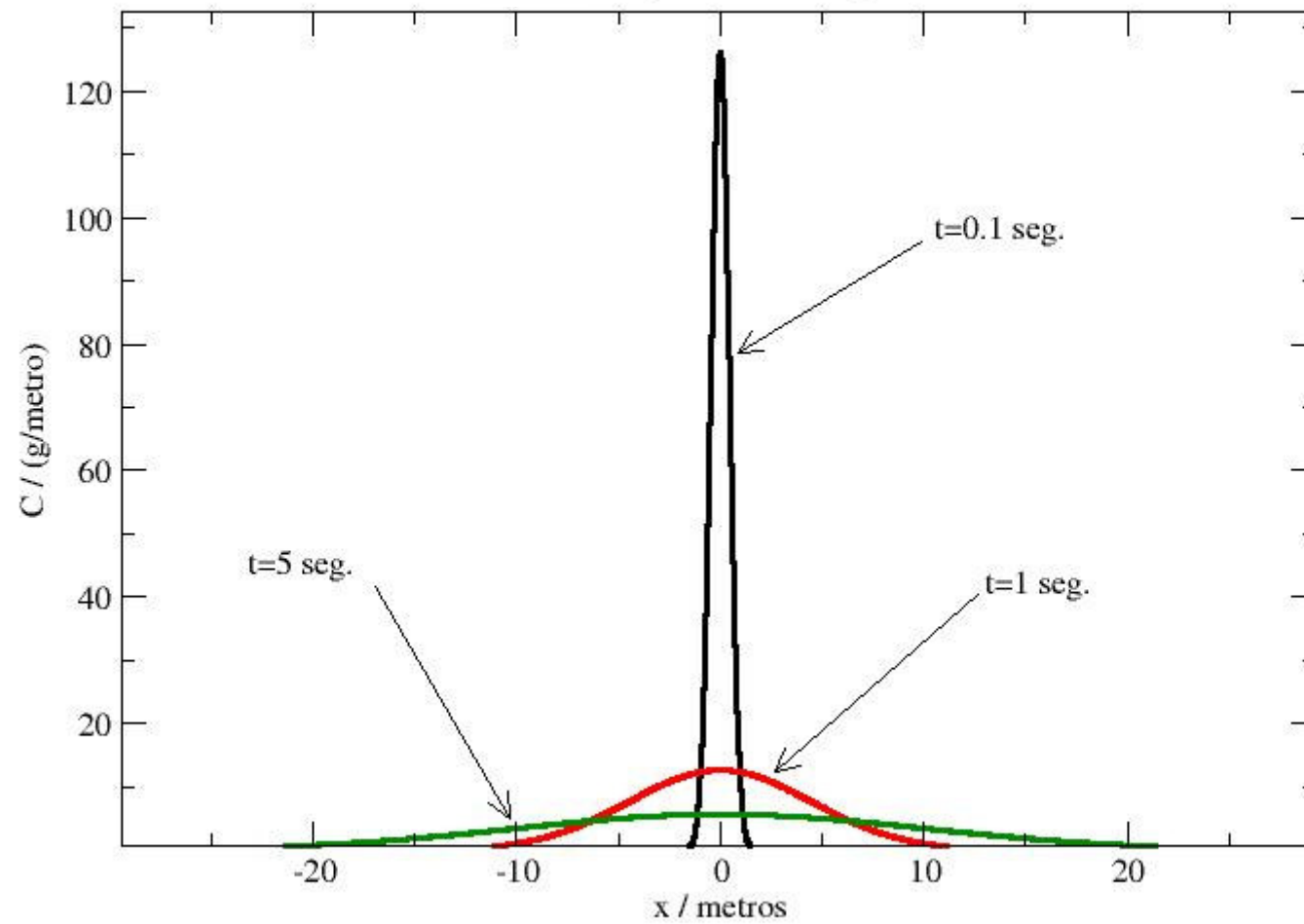
La ley de Fick implica una difusión **Gaussiana** de la concentración

Masa depositada ($t = 0$)

$$c(t) = \frac{M}{2(\pi t)^{1/2} K^{1/2}} e^{\left[-\left(\frac{1}{4t} \right) \left(\frac{x^2}{K} \right) \right]}$$

Ecuación de difusión en una dimensión

$$M = 200\text{g}, Kx = 20 \text{ m}^2 \text{ seg}^{-1}$$



¿Por qué se llama modelo gaussiano?

El modelo de dispersión se expresa en términos de un **coeficiente de dispersión turbulenta**:

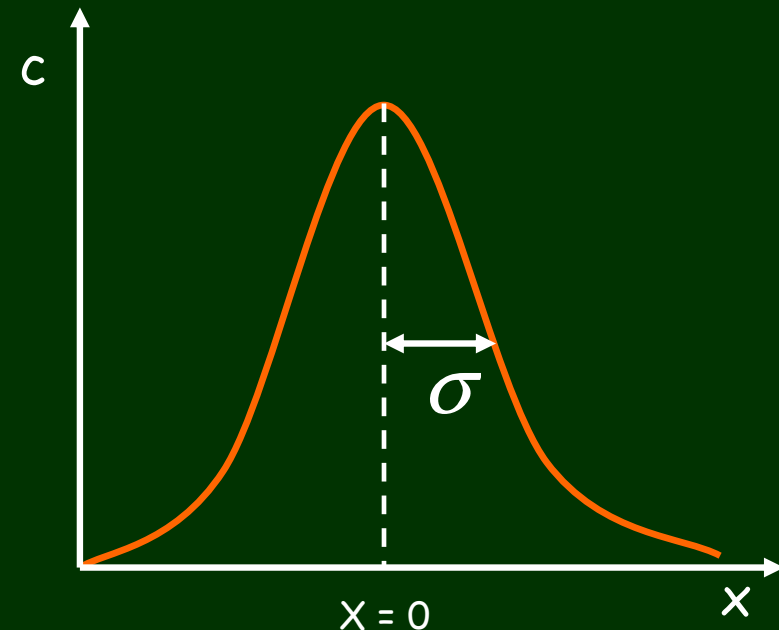
$$\sigma = (2Kt)^{1/2} = (2K \cdot x / u)^{1/2}$$

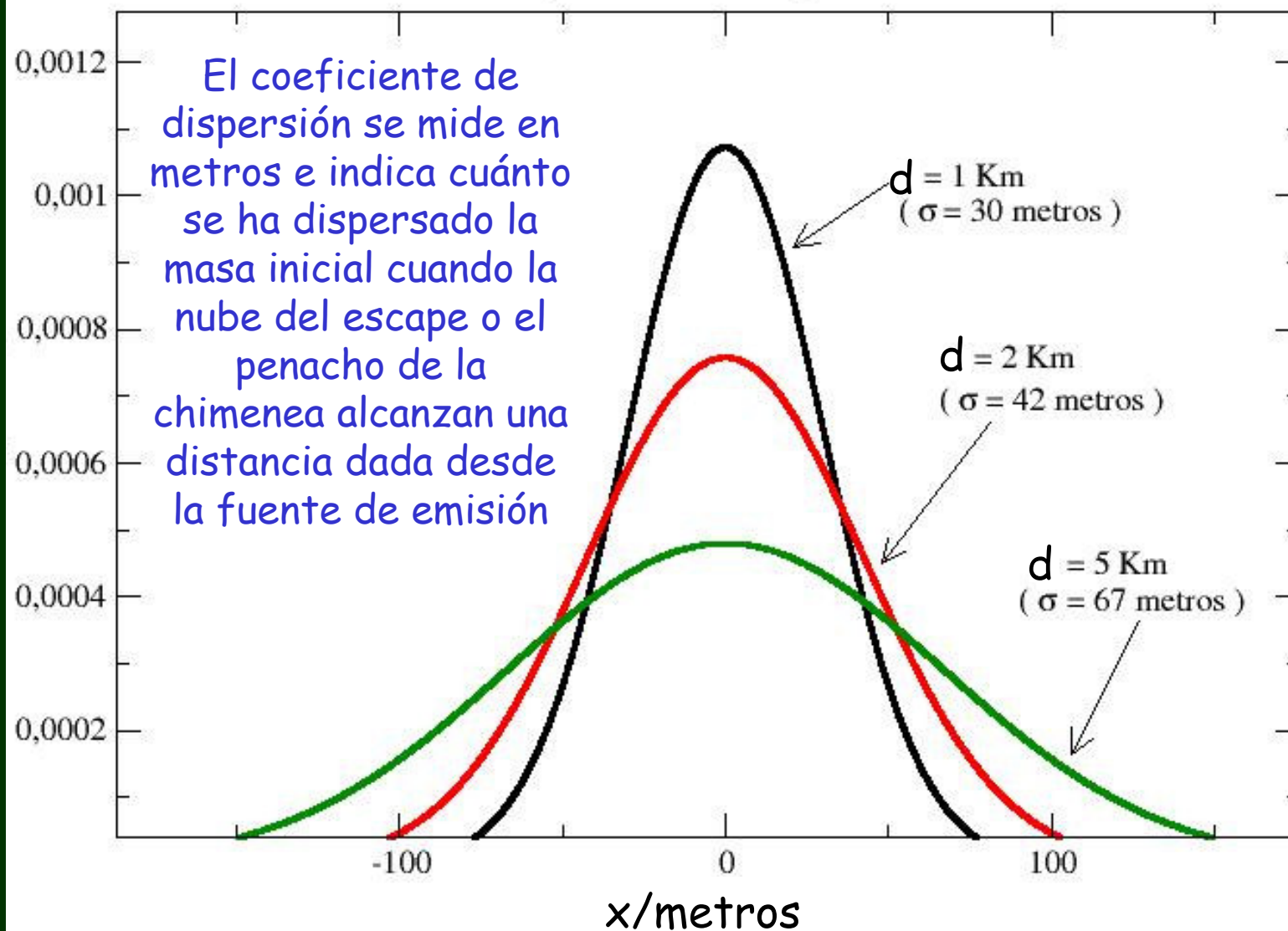
u : velocidad del viento
 x : distancia en sentido del viento



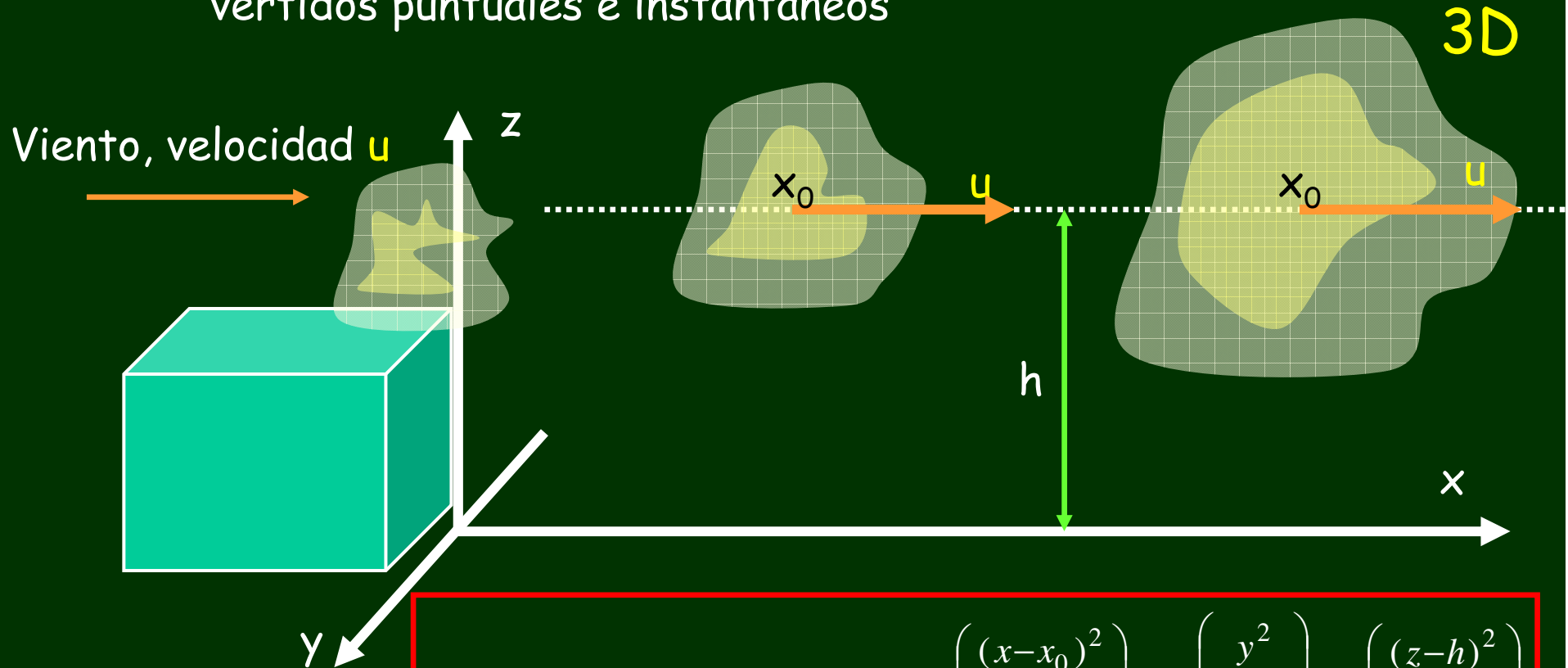
$$c = \frac{M}{(2\pi)^{1/2} \sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

(dispersión en una dimensión:
concentración en masa/longitud)





Modelo gaussiano de dispersión en TRES DIMENSIONES: vertidos puntuales e instantáneos



$$c = \frac{M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} e^{-\left(\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}\right)} e^{-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)} e^{-\left(\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right)}$$

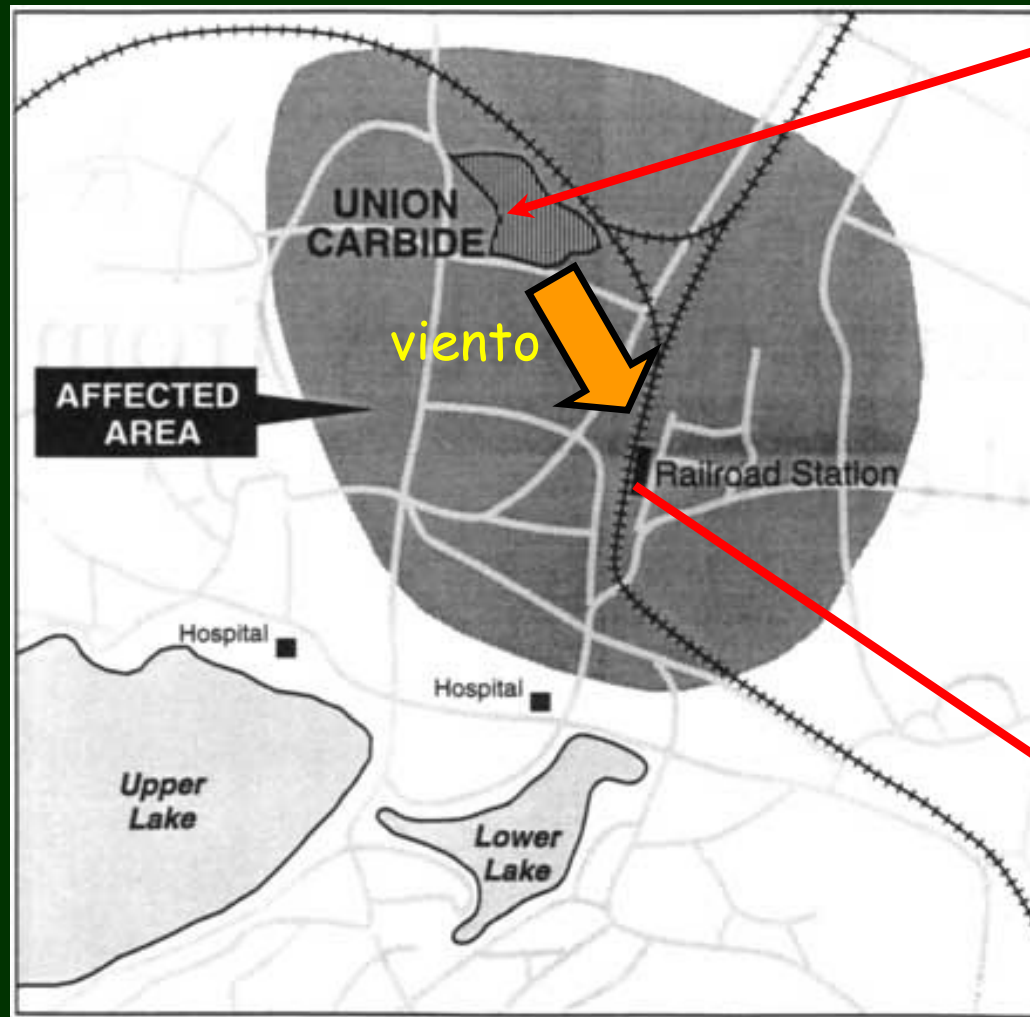
M: masa total del escape

$(x_0, 0, h)$ centro de la nube

(x, y, z) punto de impacto ambiental

Ejemplo: desastre de Bhopal (India)

3 de Diciembre de 1984



Vertido: **45 toneladas** de Isocianato de metilo en un segundo a una **altura de 50 metros**

Condiciones

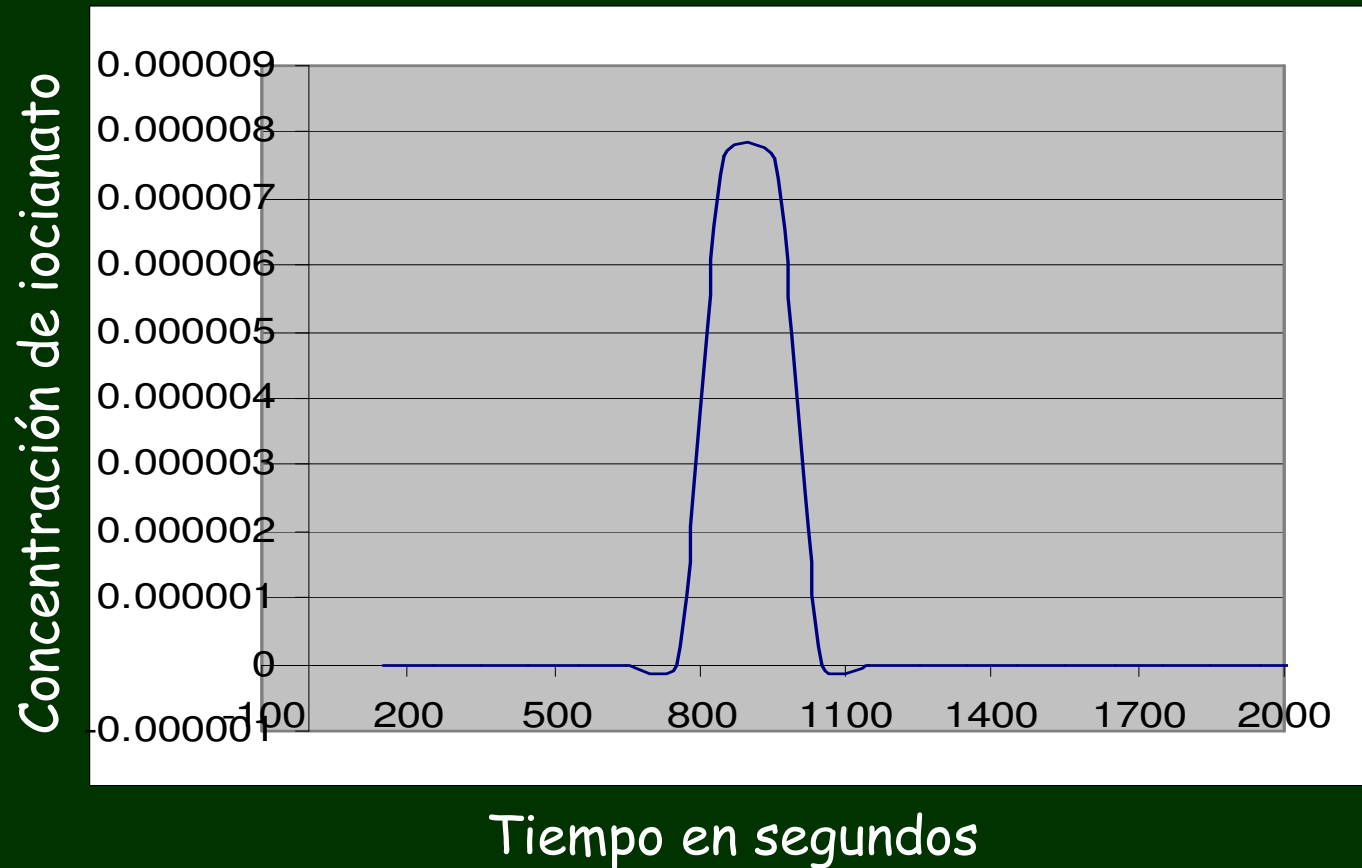
- **viento del noroeste de fuerza 1 m/s**
- noche: $K_x = K_y = 0.45 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, $K_z = 0.20 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$

$$\left(\sigma = (2Kt)^{1/2}\right)$$

¿Concentración de isocianato?

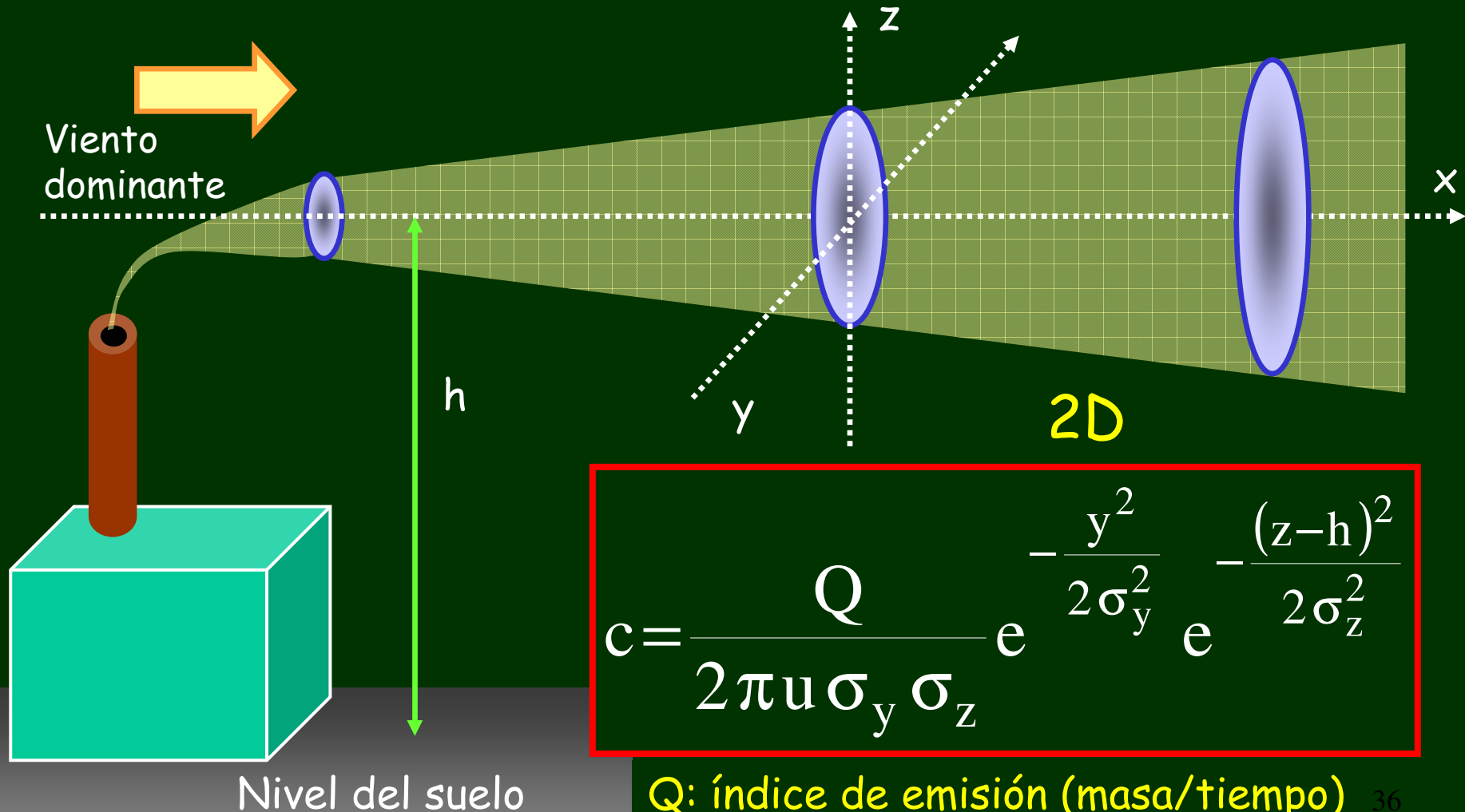
Ejemplo: desastre de Bhopal (2)

Concentración de isocianato en la estación de tren (a 1 kilómetro en la dirección noroeste-sureste) en función del tiempo:



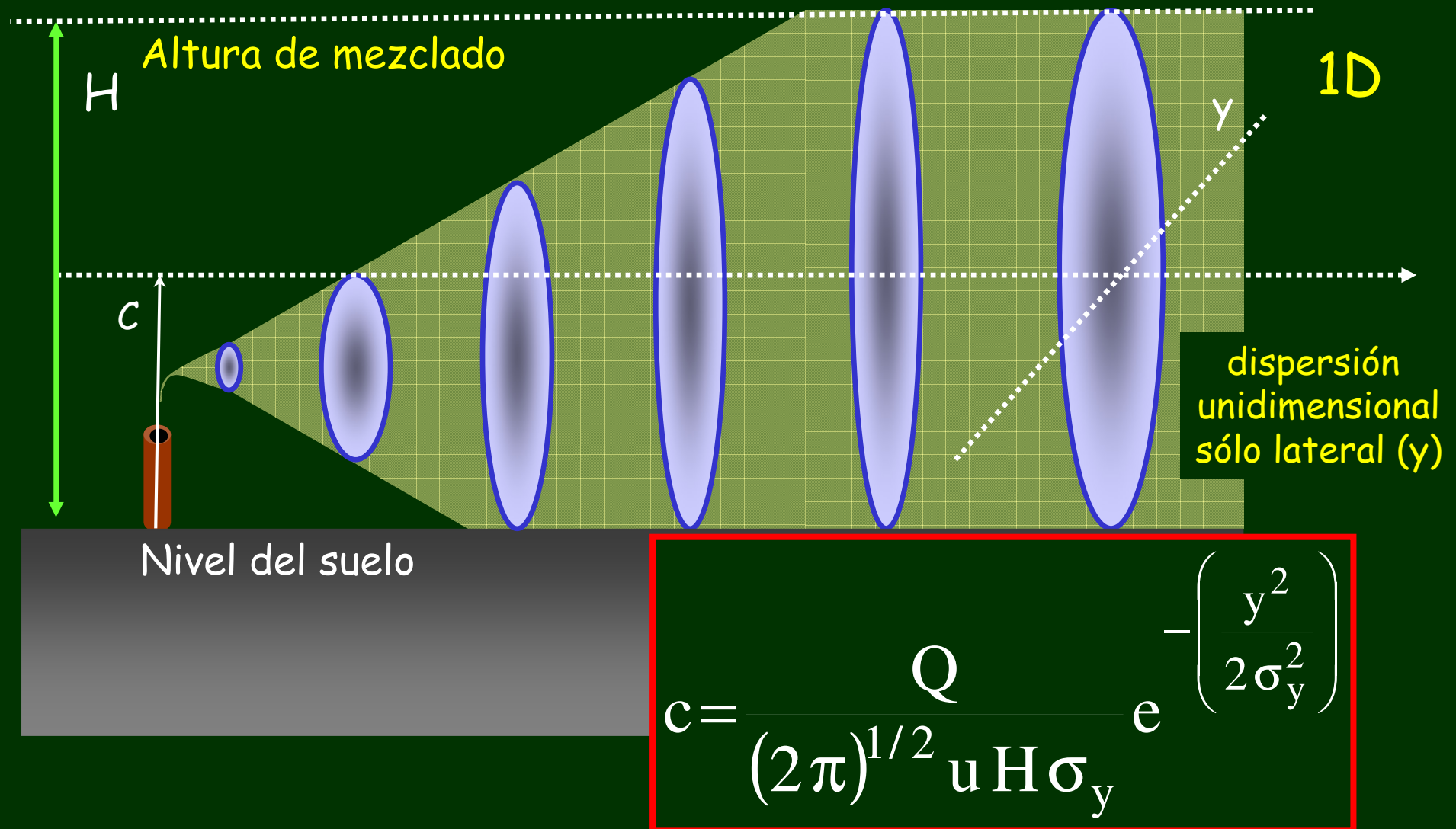
Modelo gaussiano de dispersión en DOS DIMENSIONES: vertidos puntuales continuados (chimeneas)

los contaminantes se propagan con el viento y se dispersan por turbulencias en las otras dos direcciones (izquierda/derecha y arriba/abajo)



Modelo gaussiano de dispersión en DOS DIMENSIONES:

vertidos de chimeneas con baja altura de mezclado
(mezclado total en altura, sólo expansión lateral)



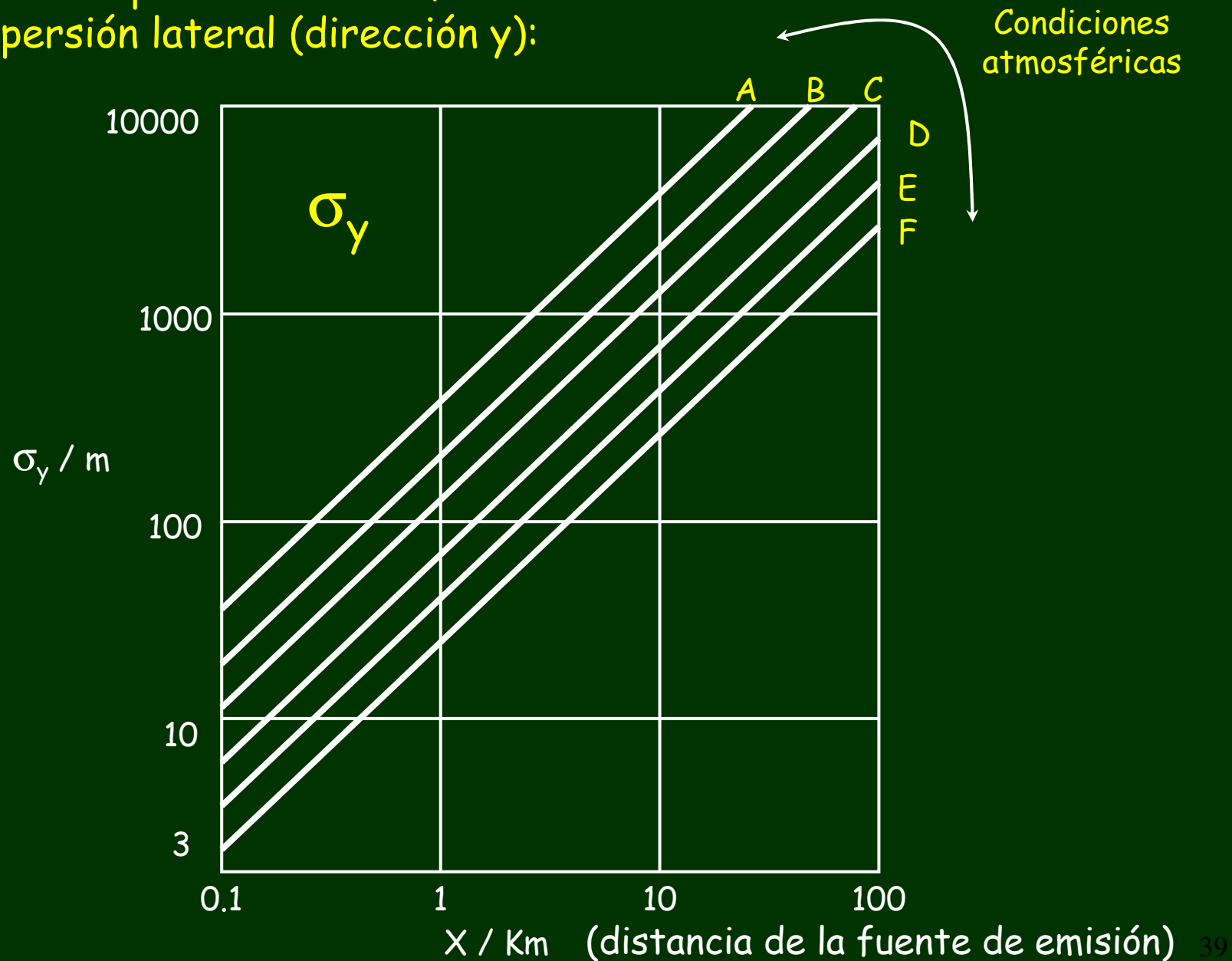
Los coeficientes de dispersión dependen de la meteorología: clases de atmósfera según su estabilidad

➤ La clase de atmósfera viene determinada por la cantidad de insolación, la humedad, las inversiones nocturnas y al viento (un fuerte viento produce estabilidad vertical)

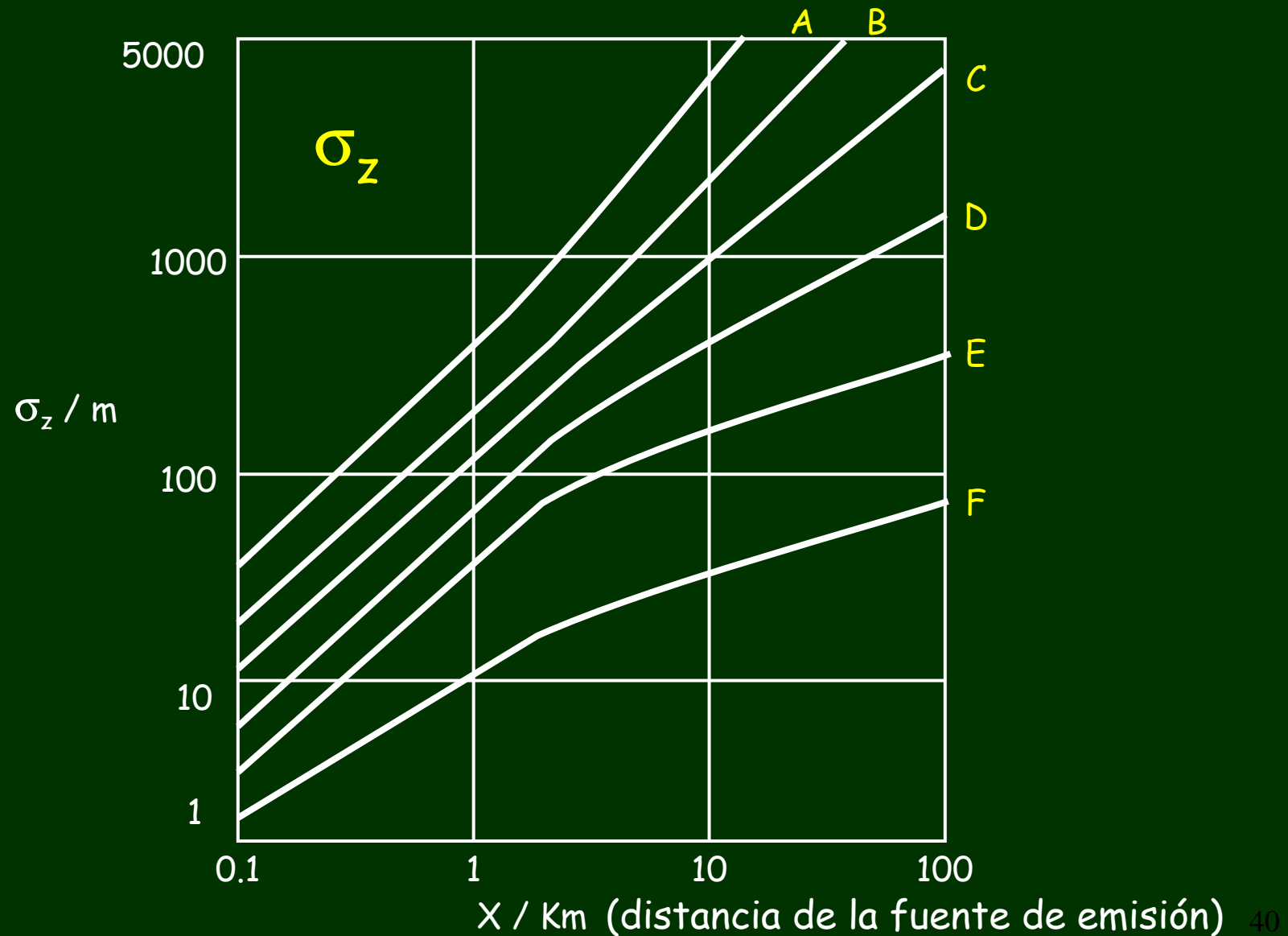
Clases de atmósfera según su estabilidad (Turner)

Viento de superficie (a 10 m) / m s^{-1}	día			Noche, o nublado	
	Radiación solar				
	Fuerte	moderada	débil	nubes $\geq 4/8$	nubes $< 3/8$
0-2	A	A-B	B	-	-
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
≥ 6	C	D	D	D	D

Valores típicos de los coeficientes de dispersión lateral (dirección y):



Valores típicos de los coeficientes de dispersión en altura (dirección z):



Valores típicos de los coeficientes de dispersión en función de la distancia a la fuente

Fórmulas para los coeficientes de dispersión para <u>suelos urbanos</u>		
Estabilidad	σ_y	σ_z
A-B	$0.32 \times (1 + 0.0004 x)^{-1/2}$	$0.24 \times (1 + 0.0001 x)^{-1/2}$
C	$0.22 \times (1 + 0.0004 x)^{-1/2}$	$0.20 \times$
D	$0.16 \times (1 + 0.0004 x)^{-1/2}$	$0.14 \times (1 + 0.0003 x)^{-1/2}$
E-F	$0.11 \times (1 + 0.0004 x)^{-1/2}$	$0.08 \times (1 + 0.0015 x)^{-1/2}$

Generalmente: $\sigma_y (\text{urbano}) > \sigma_y (\text{rural})$

$\sigma_z (\text{urbano}) > \sigma_z (\text{rural})$

Resumen de modelos gaussianos

Modelos útiles para distancias de hasta 20 Km.

- En tres dimensiones: vertidos puntuales e instantáneos

P. Ej. : escapes, emisiones discontinuas, etc...

- En dos dimensiones: vertidos puntuales y continuados en el tiempo

P. Ej. : chimeneas en industrias, escapes continuados, etc...

- En una dimensión: vertidos puntuales y continuados en el tiempo, con mezclado total en una dirección

P. Ej. : chimeneas en industrias con baja altura de mezclado

Resumen de modelos gaussianos

$$c = \frac{Q}{(2\pi)^{1/2} u H \sigma_y} e^{-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)}$$

1D

$$c = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}}$$

2D

$$c = \frac{M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} e^{-\left(\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}\right)} e^{-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)} e^{-\left(\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right)}$$

3D

⇒ Uso del modelo gaussiano para efectos a largo plazo

Cuando se necesita una estimación a largo plazo, se realiza un promedio sobre todas las condiciones atmosféricas, fuentes y direcciones del viento:

$$\bar{c}(x, y, z) = \sum_{\text{viento}} \sum_{\substack{\text{estabilidad} \\ \text{atmosférica}}} \sum_{\text{fuentes}} \text{Frecuencia}_i \times c_i(x, y, z)$$

Casos particulares del modelo gaussiano en 2D:

Contaminación a ras del suelo ($z = 0$):

$$c = \frac{Q}{\pi u \sigma_y \sigma_z} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{h^2}{2\sigma_z^2}}$$

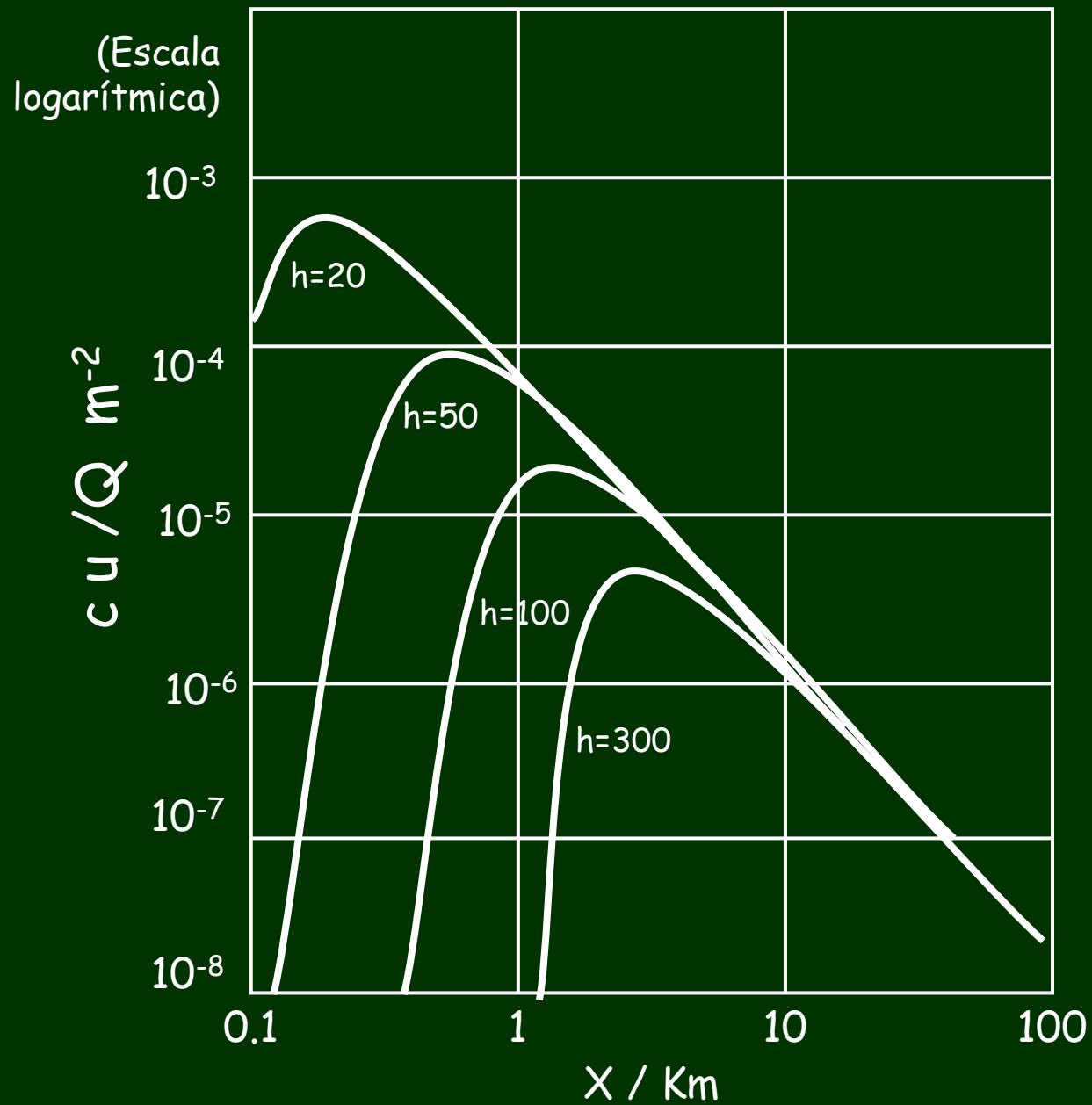
Este caso interesa por ser donde se encuentra la población

A ras de suelo y en el eje del viento ($z = 0, y = 0$):

$$c = \frac{Q}{\pi u \sigma_y \sigma_z} e^{-\frac{h^2}{2\sigma_z^2}}$$

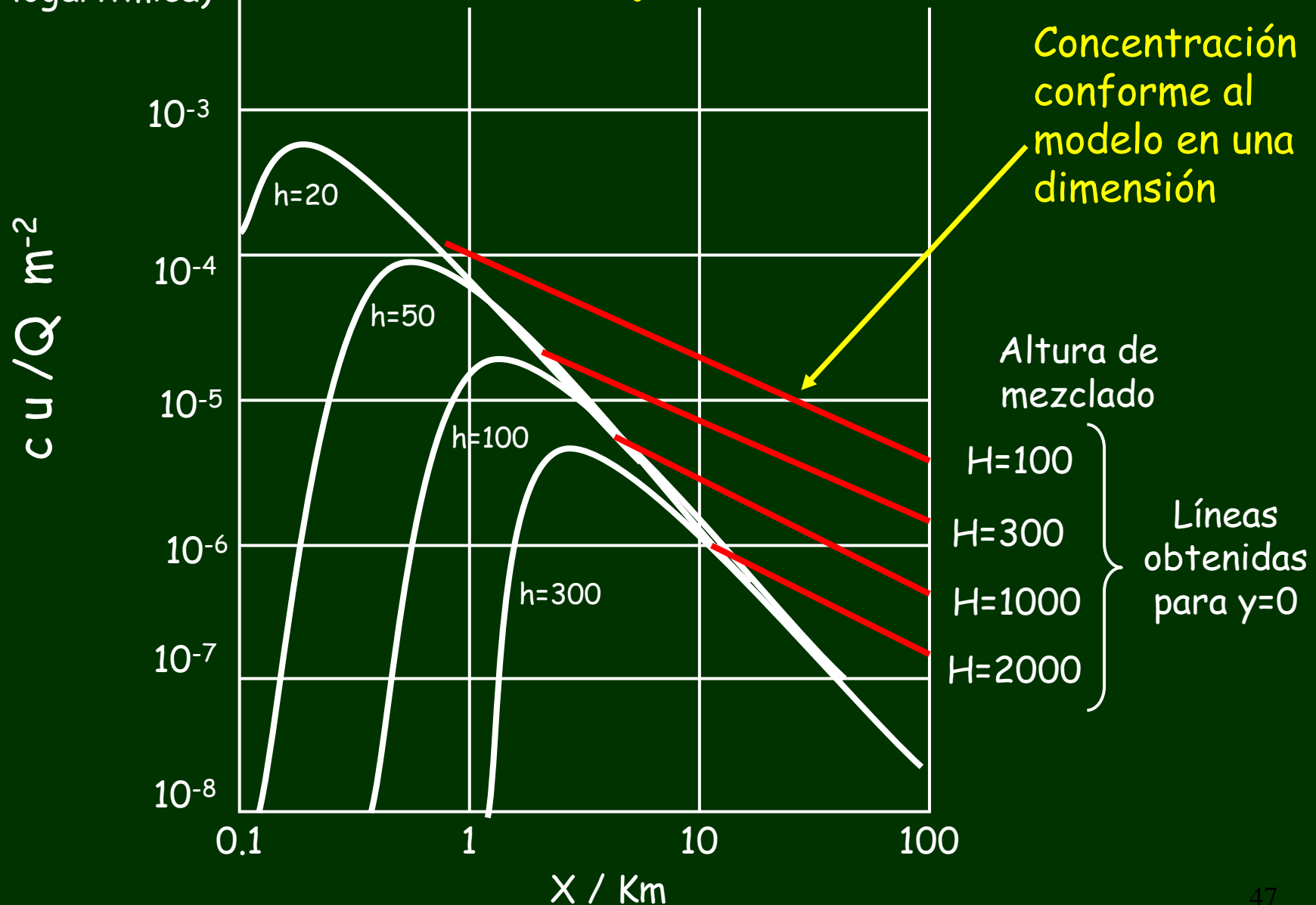
Este caso interesa por ser donde se acumula la mayor contaminación

Modelo gaussiano en 2D a ras de suelo y en el eje del viento ($z = 0, y = 0$):

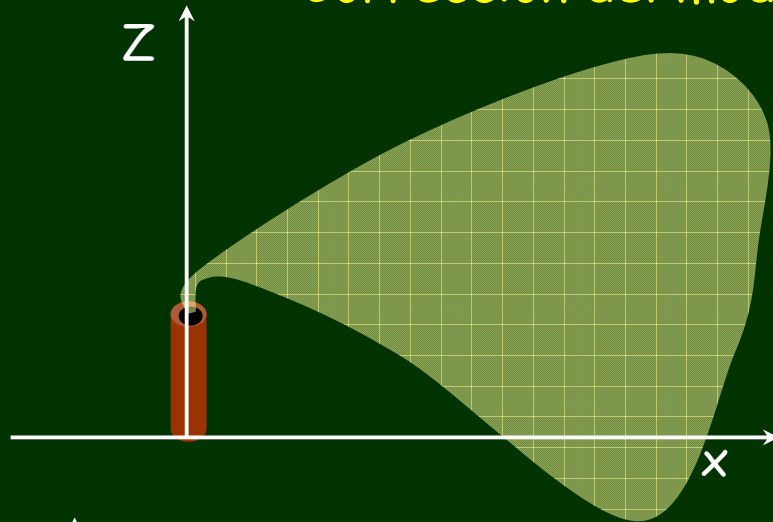


(Escala
logarítmica)

Efecto de una baja altura de mezclado



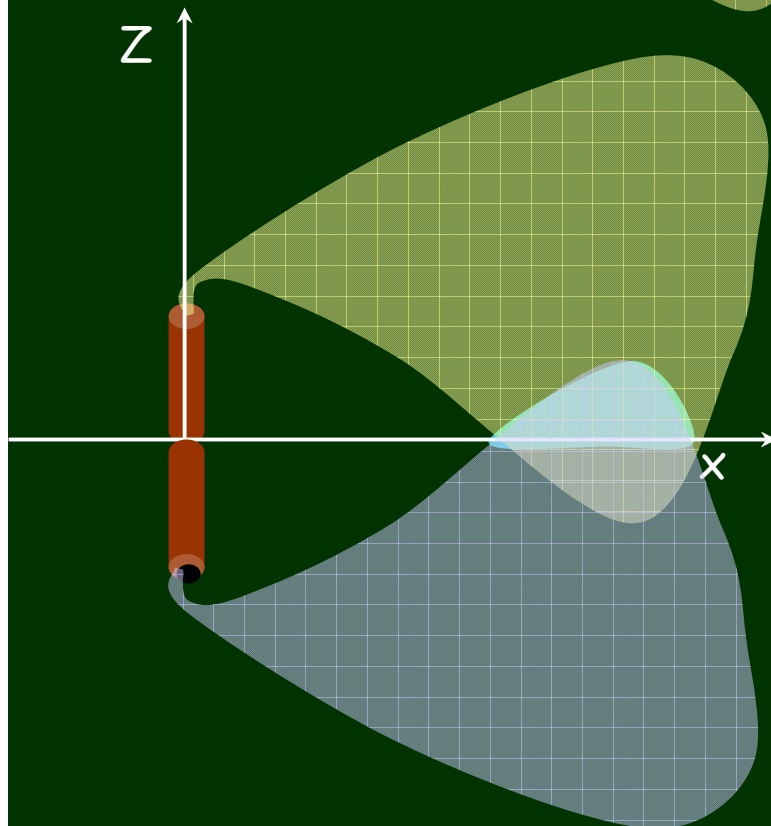
Corrección del modelo gaussiano por reflexión del suelo



Contaminante absorbido por el suelo

Ej: SO_2 , NO_x

$$c = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}}$$



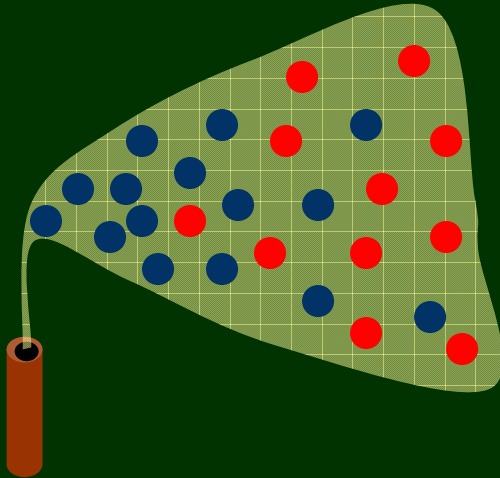
Contaminante reflejado por el suelo

Ej: CO , COVs

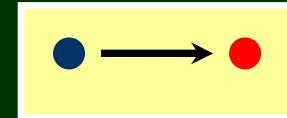
$$c = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} \left[e^{-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}} + e^{-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}} \right]$$

(emisión de la columna gaussiana especular)

Incorporación de cinética de reacción en el modelo gaussiano



En muchas ocasiones el contaminante emitido no es estable en aire y sufre una reacción química que lo hace transformarse en otra sustancia.



PROCEDIMIENTO

1. Se calcula la concentración con el modelo gaussiano en una posición dada.
2. Se establece cuánto tiempo tardará la molécula en llegar hasta dicha posición desde la fuente (velocidad del viento)
3. Se multiplica la concentración por un factor de desintegración que tiene en cuenta cómo decae la cantidad de contaminante con el tiempo

Cinética de primer orden:

$$dC/dt = -k C \rightarrow C/C_0 = e^{-kt}$$

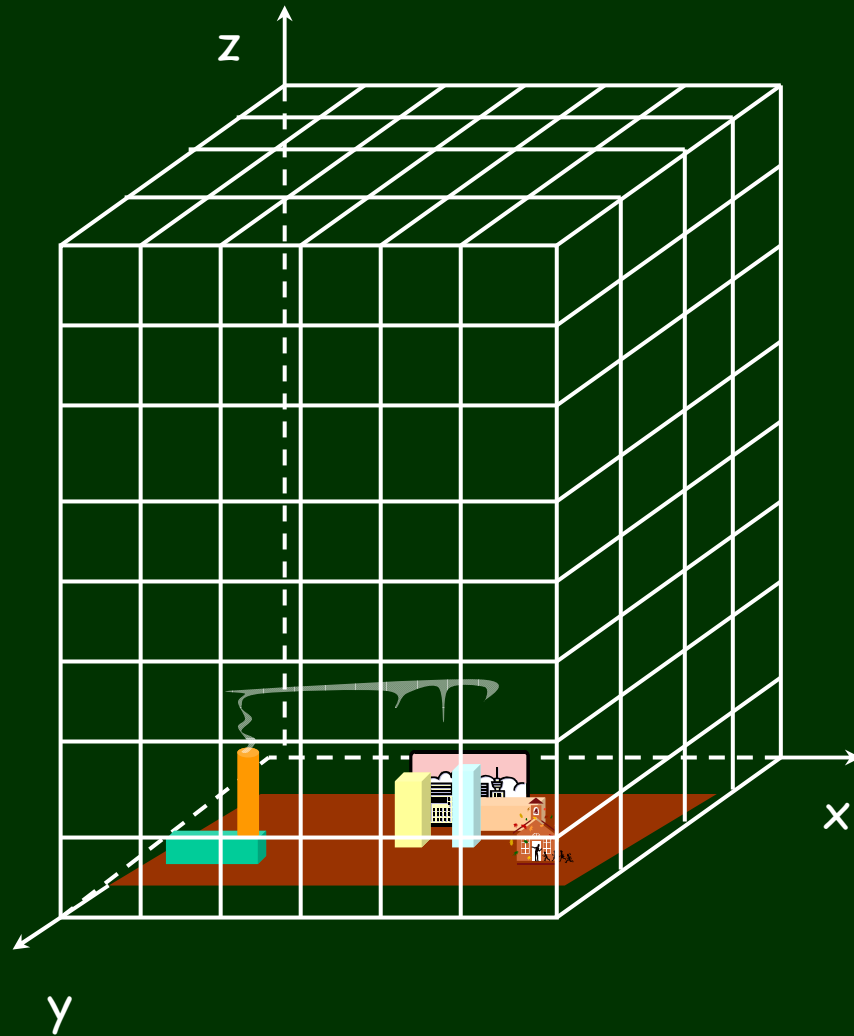
Tiempo de vida media: $t_{1/2} = \ln 2/k$

Factor de destrucción/desintegración (f):

$$C = C_{\text{gausiano}} * f$$

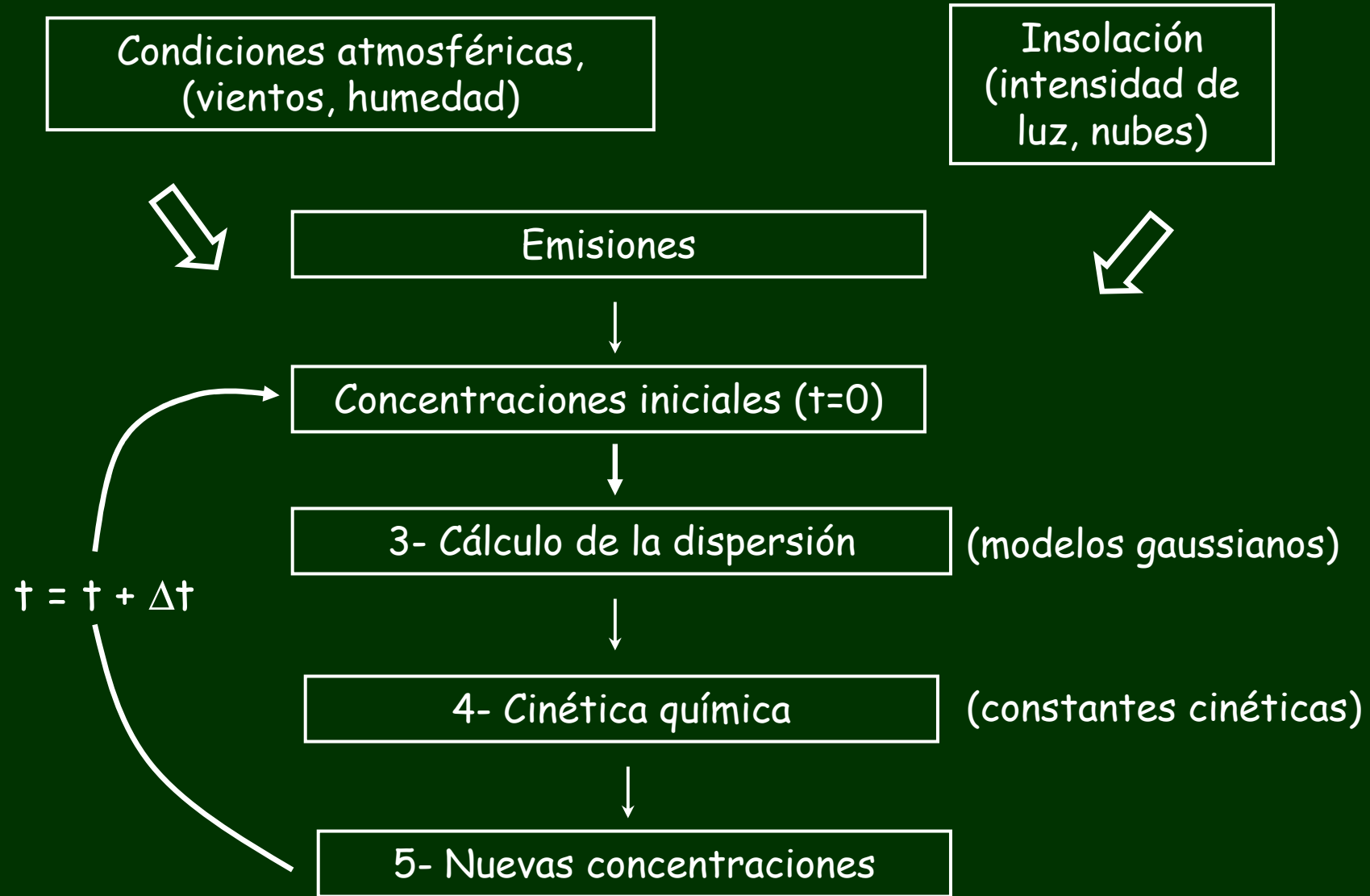
$$f = \exp(-\ln 2 \ t/t_{1/2}), \text{ donde } t = x / u$$

Modelos de celda múltiple



- Son los que se utilizan en la práctica para estimar concentraciones de contaminante en regiones definidas (ciudades, por ejemplo)
- Dividen el volumen total de aire en pequeñas celdas en las que se almacena, de manera numérica, las concentraciones de varios contaminantes
- El modelo tiene en cuenta la estabilidad de los contaminantes (vidas medias, constantes cinéticas) así como los flujos de materia que pasan de una celda a sus vecinas

Protocolo de cálculo



Obtención de modelos de dispersión

U.S. Environmental Protection Agency (EPA)

<http://www.epa.gov/ttn/scram>