

MÓDULO CALIDAD DE AIRE

GESTIÓN DE LA CALIDAD AMBIENTAL



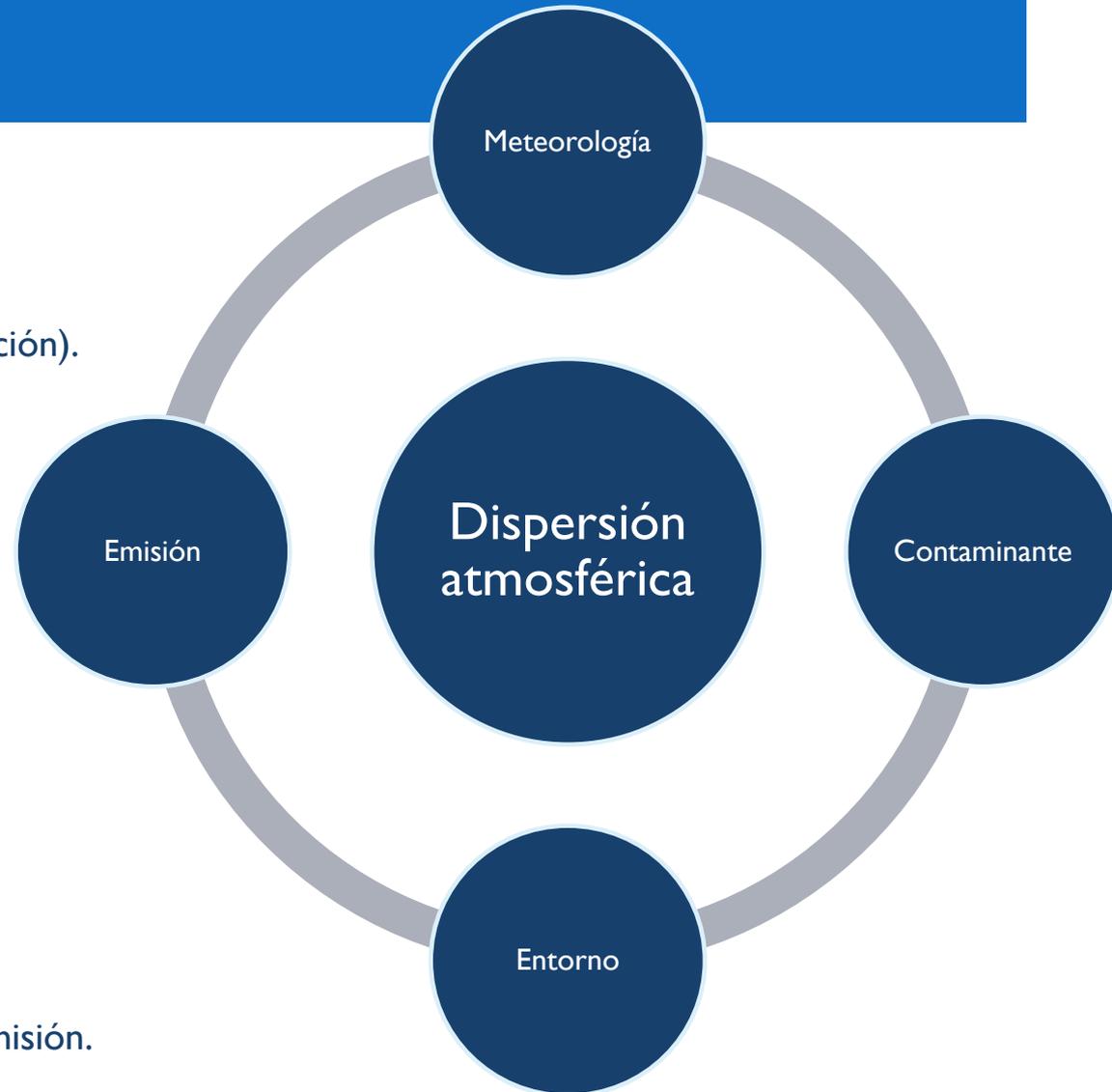
UNIVERSIDAD
DE LA REPÚBLICA
URUGUAY

CLASES N°7Y N°8

- Modelación de la dispersión atmosférica de las emisiones.
- Modelos Gaussianos.
- Penacho Gaussiano.
- CFD.
- Ejercicio.
- Trabajo final.

MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

- **Meteorología:**
 - ❖ Flujo de viento.
 - ❖ Estabilidad atmosférica.
 - ❖ Deposición húmeda (precipitación).
- **Contaminante:**
 - ❖ Difusión.
 - ❖ Sedimentación.
 - ❖ Reacciones químicas.
- **Entorno:**
 - ❖ Filtrado por vegetación.
 - ❖ Edificaciones.
 - ❖ Topografía.
- **Emisión:**
 - ❖ Altura de emisión.
 - ❖ Velocidad y temperatura de emisión.



MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

- Métodos de dispersión:
 - ❖ Difusión:
 - Mezcla de masas de diferente concentración.
 - Es el método más lento y de menor alcance.
 - Busca uniformizar las concentraciones.
 - ❖ Convección:
 - Fenómenos de transporte vertical.
 - Causada por fenómenos mecánicos o térmicos.
 - ❖ Advección:
 - Fenómenos de transporte horizontal.
 - Arrastre por acción del viento.
 - Puede alcanzar grandes distancias.
 - ❖ Reacción:
 - Procesos químicos y físicos que alteran las concentraciones de los contaminantes.

MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

- Descripción matemática de los métodos de dispersión:
- ❖ La ecuación de advección-difusión-reacción en derivadas parciales (ecuación de dispersión reactiva) describe los métodos de dispersión.

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (V(x, t) * c_i) = \nabla \cdot (K_{molec} * \nabla c_i) + X_i(c, T(x, t), t) + S_i(x, t) - \Delta_i * c_i$$

- ❖ Donde:
 - c_i : concentración del contaminante (vector).
 - x : coordenadas espaciales.
 - t : coordenadas temporales.
 - $V(x,t)$: velocidad del viento.
 - K_{molec} : matriz de difusión molecular.

MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

- Descripción matemática de los métodos de dispersión:
- ❖ La ecuación de advección-difusión-reacción en derivadas parciales (ecuación de dispersión reactiva) describe los métodos de dispersión.

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (V(x, t) * c_i) = \nabla \cdot (K_{molec} * \nabla c_i) + X_i(c, T(x, t), t) + S_i(x, t) - \Delta_i * c_i$$

- ❖ Donde:
 - $T(x, t)$: temperatura.
 - $S_i(x, t)$: término fuente (emisiones).
 - $X_i(c, T(x, t), t)$: término fuente de origen químico.
 - $\Delta_i * c_i$: representa las pérdidas de contaminante (por ejemplo las producidas por la lluvia).

MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

- Descripción matemática de los métodos de dispersión:
- ❖ Teniendo en cuenta la multiplicidad de escalas de longitudes que intervienen en los flujos turbulentos (algunos mm – 1000 m), su resolución matemática completa **no es posible** con la ecuación anterior.
- ❖ Stiffness: problema asociado a la gran amplitud de escalas existente. La resolución del flujo completo llevaría años, por eso se dice que no pueden resolverse todas las escalas.
- ❖ En función de lo anterior, se utiliza el siguiente procedimiento de promediación sobre la ecuación anterior, para posibilitar su resolución: $\varphi = \bar{\varphi} + \varphi'$
- ❖ Donde:
 - φ : variable considerada (campo de concentraciones, flujo de viento, etc.).
 - $\bar{\varphi}$: valor promedio de la variable.
 - φ' : fluctuación de la variable.

MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

- Descripción matemática de los métodos de dispersión:
- ❖ Aplicando el mencionado procedimiento de promediación a la ecuación de dispersión reactiva, se obtiene una nueva ecuación conformada por valores promedio más un término fluctuante: $\nabla \cdot (\overline{c'_i * V(x, t)'})$.
- ❖ Para finalizar la resolución de la ecuación promediada, se necesita un **esquema de clausura** capaz de representar el término fluctuante anterior en función de los valores promedio.
- ❖ Este término fluctuante puede ser visto como un flujo turbulento. En este sentido, el esquema de clausura se basa usualmente en la llamada teoría K (analogía con la difusión molecular): $\overline{c'_i * V(x, t)'} = -\bar{\rho} * K_{turb} * \nabla \left(\frac{\bar{c}_i}{\bar{\rho}} \right)$.
- ❖ En la práctica, $K_{turb} \gg K_{molec}$. Además, los valores horizontales de los coeficientes de difusión/dispersión son en general despreciables en comparación con el fenómeno de advección. En este sentido, en general se utiliza: $K_{turb} \approx K_z \hat{k}$, con $K_z \approx 10 \frac{m^2}{s}$.

MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

- Descripción matemática de los métodos de dispersión:
- ❖ Para la resolución de estas ecuaciones deben especificarse condiciones iniciales y de borde.
- ❖ Debido a los fenómenos que dominan la dispersión atmosférica de contaminantes (horizontal: flujo de viento; vertical: difusión turbulenta), las condiciones de borde horizontales se vinculan con las características del flujo de viento incidente, y las verticales con los flujos turbulentos.
- ❖ Existen diversos abordajes que pueden utilizarse para resolver la ecuación promediada.

MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

- Modelos de dispersión de emisiones atmosféricas:
 - ❖ Un modelo es la representación matemática de los procesos de transporte, transformación y remoción de los contaminantes en la atmósfera.
 - ❖ Un modelo de dispersión de contaminantes en la atmósfera permite predecir la calidad del aire (niveles de inmisión) a partir de las emisiones de contaminantes.
 - ❖ Posibles aplicaciones de la modelación de calidad del aire:
 - Evaluar concentraciones esperadas en un lugar para cierto escenario futuro.
 - Desarrollar estrategias de control.
 - Seleccionar sitios adecuados para ubicar estaciones de monitoreo.

MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

- Modelos de dispersión de emisiones atmosféricas:
 - ❖ Datos de entrada:
 - Emisiones atmosféricas.
 - Topografía y entorno construido.
 - Condiciones meteorológicas.
 - Concentraciones de base.
 - ❖ Factores que afectan los resultados obtenidos:
 - Exactitud en el cálculo de las emisiones y en la representación del entorno.
 - Precisión de la representación matemática de los fenómenos físico-químicos de dispersión.
 - Calidad y representatividad de la información meteorológica disponible.
 - Existencia de información de campo que permita la calibración del modelo.

MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

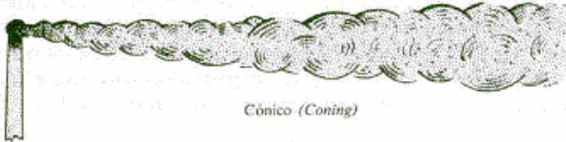
- **Dispersión atmosférica de emisiones de fuentes puntuales:**
 - ❖ Se efectúa usualmente a través de chimeneas.
 - ❖ Su altura debe diseñarse de modo de minimizar los niveles de inmisión.
 - ❖ Emisión + estela: pluma o penacho.
 - ❖ La forma del penacho depende de la relación entre las características de la emisión, la situación meteorológica reinante (estabilidad atmosférica, flujo de viento) y el ambiente construido.



Chimenea de la Refinería de la Teja (Municipio A, Montevideo).

MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

- Dispersión atmosférica de emisiones de fuentes puntuales:

<p>PENACHO CÓNICO</p>  <p>Cónico (Coning)</p>	<p>Atmósfera neutra. Baja turbulencia en la atmósfera, menor incidencia de efectos térmicos. Vientos moderados a fuertes. La mayor parte del material se deposita lejos de la fuente emisora. El ángulo de apertura de la generatriz del cono es del orden de 10°.</p>
<p>PENACHO TUBULAR O DE CINTA</p>  <p>Tubular (Fanning)</p>	<p>Fuerte estabilidad atmosférica (emisión en una capa de inversión) Ausencia de vientos y turbulencia mecánica muy escasa. Por debajo hay aire más denso, que impide que la emisión baje, y por encima hay aire menos denso, que actúa como un “techo” para la dispersión vertical.</p>
<p>PENACHO ONDEADO O SERPENTEANTE</p>  <p>Serpenteante (Looping)</p>	<p>Atmósfera inestable. Capa bien mezclada, con gran desarrollo de procesos <u>convectivos</u>. Vientos ligeros, asociados con el calentamiento de la superficie terrestre. Si bien hay tendencia a dispersar los contaminantes, pueden registrarse altas concentraciones cerca del foco emisor.</p>

MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE LAS EMISIONES

- Dispersión atmosférica de emisiones de fuentes puntuales:

<p>PENACHO HORIZONTAL DESCENDENTE O APRISIONADO</p>  <p>Aprisionado (<i>Trapping</i>)</p>	<p>Emisión por debajo de una capa de inversión. La capa en que se emite tiene escasa turbulencia. Los valores de inmisión resultantes son elevados.</p>
<p>PENACHO HORIZONTAL ASCENDENTE O ANTIFUMIGANTE</p>  <p>Antifumigante (<i>Lifting</i>)</p>	<p>Emisión por encima de una capa de inversión. El contaminante no regresa a la tierra. Característico del atardecer, con atmósfera despejada. Es el penacho más favorable en cuanto a valores de inmisión esperados.</p>
<p>PENACHO FUMIGANTE</p>  <p>Fumigante (<i>Fumigating</i>)</p>	<p>Emisión por debajo de una capa de inversión (caso particular de penacho horizontal descendente en condiciones de inestabilidad). La capa en que se emite tiene gran turbulencia. Los movimientos <u>vorticosos resuspenden</u> el material ya depositado. Es la situación más desfavorable en cuanto a inmisión.</p>

MODELOS GAUSSIANOS

- Son los modelos más simples: válidos en las cercanías de las fuentes (algunos kilómetros) y para contaminantes pasivos.
- Si consideramos al contaminante como un trazador pasivo, emitido por una fuente puntual, y que la velocidad del viento (u) es constante según el eje \vec{x} , y también que la densidad del aire (ρ) es constante, la ecuación de dispersión para el cociente de mezcla (mixing ratio; $C_i = \frac{c_i}{\rho}$) queda de la siguiente manera:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u * \frac{\partial C}{\partial x} = K_x * \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y * \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z * \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$$

- Características de la emisión analizada:
 - ❖ Punto de emisión: $(x,y,z) = (0,0,0)$.
 - ❖ Momento de emisión: $t = 0$.
 - ❖ Condición inicial: $C(x, y, z, 0) = S * \delta(x) * \delta(y) * \delta(z)$, con S la concentración de emisión y δ la función Delta de Dirac en $(0,0,0)$.

MODELOS GAUSSIANOS

- Si no tenemos condiciones de borde (dominio infinito), la solución exacta está dada por la función Gaussiana:

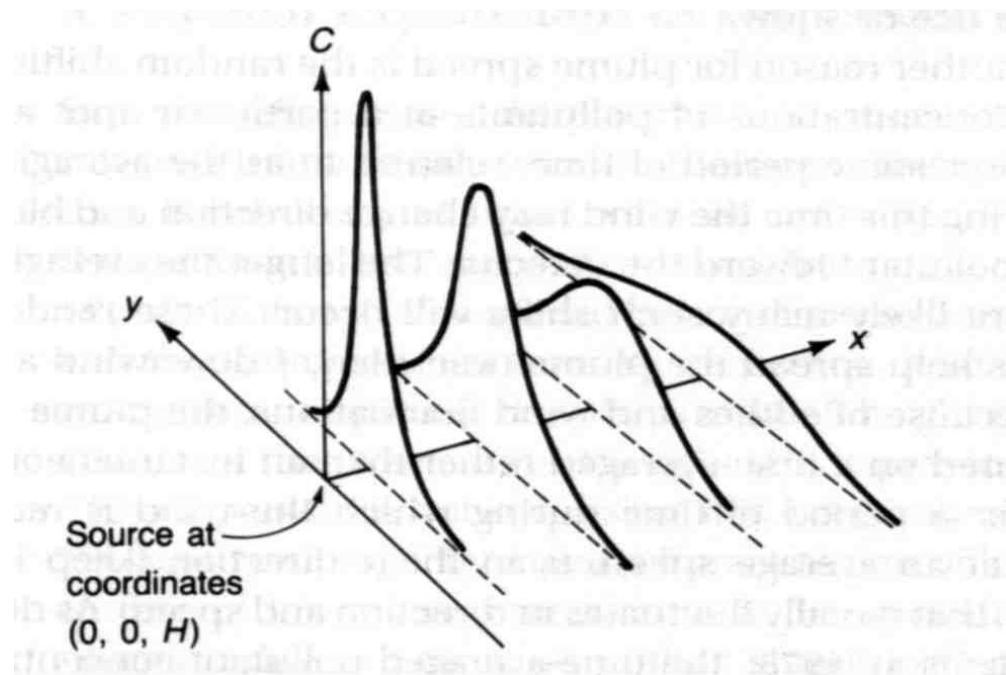
$$C(x, y, z, t) = \frac{S}{(2 * \pi * t)^{3/2} * \sqrt{K_x * K_y * K_z}} * e\left(-\frac{(x-u*t)^2}{4*K_x*t} - \frac{y^2}{4*K_y*t} - \frac{z^2}{4*K_z*t}\right)$$

PENACHO GAUSSIANO

- Este modelo se utiliza para estimar las concentraciones viento abajo de contaminantes atmosféricos inertes emitidos por fuentes puntuales (no se considera la sedimentación).
- Este es un modelo estacionario que puede utilizarse en el caso de fuentes continuas (con respecto al tiempo).
- Permite calcular los niveles de inmisión a cierta distancia de una fuente puntual, cuando se conocen la emisión de contaminantes, la posición del receptor de interés, la altura geométrica de la chimenea (su altura física), la altura efectiva de la emisión (suma de la altura geométrica y de la sobreelevación del penacho $H = H_g + \Delta h$), la velocidad y la dirección del viento, y la estabilidad atmosférica (representada numéricamente por los coeficientes de dispersión de Pasquill-Gifford σ_y y σ_z).
- La concentración que se obtiene es directamente proporcional a la emisión, e inversamente proporcional a la velocidad del viento.

PENACHO GAUSSIANO

- El modelo gaussiano supone que las concentraciones de la emisión decaen según una doble campana de Gauss a medida que nos alejamos de la fuente en la dirección del viento.



PENACHO GAUSSIANO

- Para una fuente emisora situada a una altura efectiva $z = H$, la ecuación del penacho gaussiano es:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2 * \pi * u * \sigma_y * \sigma_z} * e^{-\frac{1}{2} * \left(\frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{\sigma_z^2} \right)}$$

Donde:

$C(x,y,z)$: concentración de contaminante en el punto x, y, z ($\mu\text{g}/\text{m}^3$).

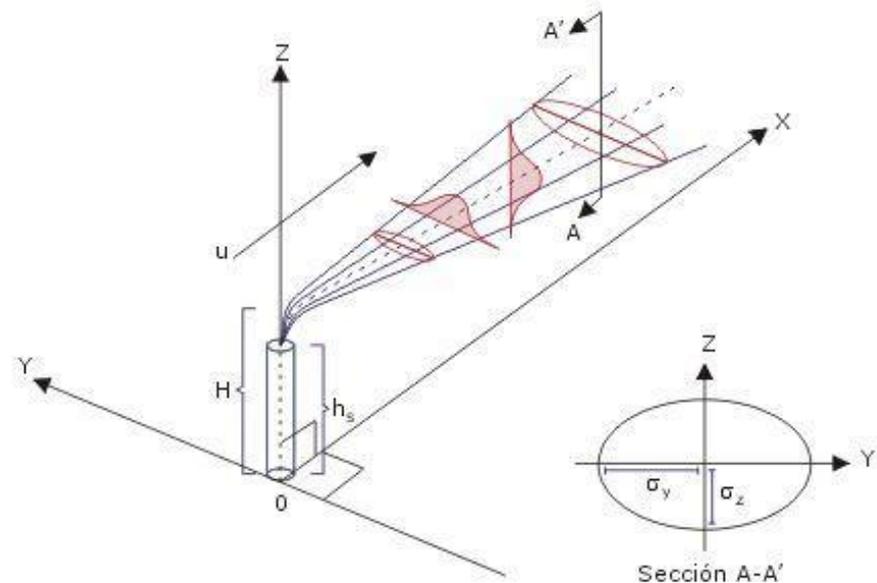
Q : emisión del contaminante ($\mu\text{g}/\text{s}$).

σ_y, σ_z : coeficientes de dispersión horizontal y vertical (m).

H : altura efectiva de emisión (m).

u : velocidad del viento a la altura efectiva (m/s).

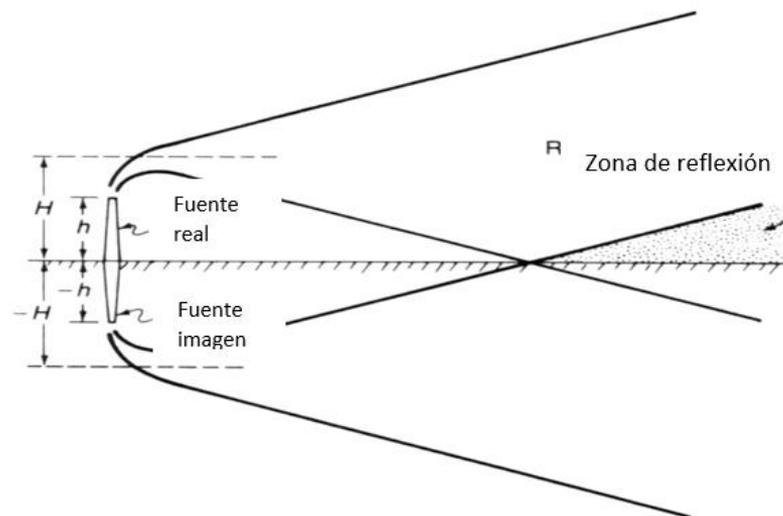
x, y, z : coordenadas (m).



PENACHO GAUSSIANO

- En el caso en que se considere que ocurre reflexión en $z = 0$, se suele aplicar el “método de las imágenes” e introducir una fuente virtual situada a altura $z = -H$. En este caso, la ecuación resulta ser:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2 * \pi * u * \sigma_y * \sigma_z} * e^{-\frac{1}{2} * \left(\frac{y^2}{\sigma_y^2}\right)} * \left(e^{-\frac{(z-H)^2}{2 * \sigma_z^2}} + e^{-\frac{(z+H)^2}{2 * \sigma_z^2}} \right)$$



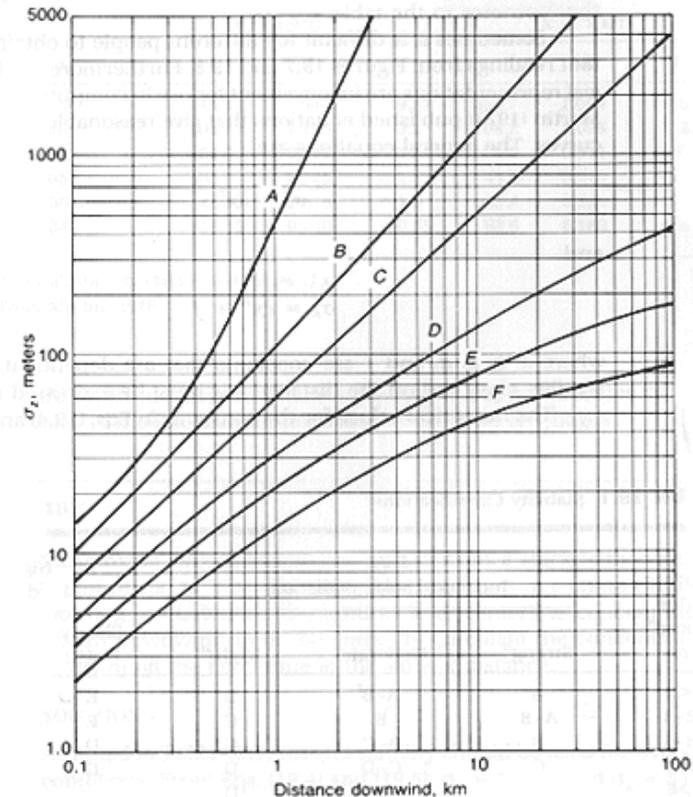
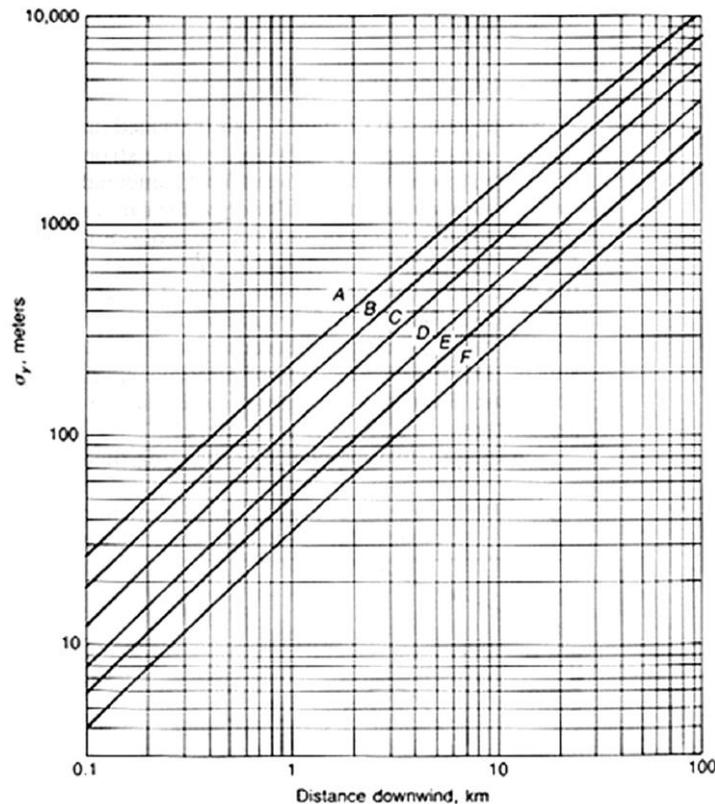
PENACHO GAUSSIANO

- Las condiciones de estabilidad de Pasquill-Gifford deducen el estado de la atmósfera en función de parámetros meteorológicos de observación directa: la velocidad del viento, la insolación diurna y la nubosidad nocturna:

Categoría	Descripción
A	Fuerte inestabilidad
B	Moderada inestabilidad
C	Ligera inestabilidad
D	Neutralidad
E	Ligera estabilidad
F	Fuerte estabilidad
G	Inversión

PENACHO GAUSSIANO

- Coeficientes de dispersión (σ_y , σ_z) (funciones Matlab en EVA desarrolladas por estudiantes):



PENACHO GAUSSIANO

- Cálculo de velocidades de viento a diferentes alturas:

$$U_2 = U_1 * \left(\frac{H_2}{H_1}\right)^n$$

- Donde:
- ❖ U_1 : velocidad del viento a la altura de referencia en m/s.
- ❖ U_2 : velocidad del viento a la altura objetivo en m/s.
- ❖ H_1 : altura de referencia en m.
- ❖ H_2 : altura objetivo en m.
- ❖ n : coeficiente que depende del tipo de terreno y de la estabilidad atmosférica.

Estabilidad atmosférica	Superficie rural	Superficie urbana
	<i>n</i>	<i>n</i>
<i>A</i>	0.10	0.15
<i>B</i>	0.15	0.15
<i>C</i>	0.20	0.20
<i>D</i>	0.25	0.25
<i>E</i>	0.25	0.40
<i>F</i>	0.30	0.60

PENACHO GAUSSIANO

- Cálculo de la sobre-elevación de la emisión:

$$\Delta h(m) = \frac{v_s * D}{u} * \left(1,5 + 2,68x10^{-3} * p * D * \left(\frac{T_s - T_a}{T_s} \right) \right)$$

- Donde:
 - ❖ v_s : velocidad de salida del gas en m/s.
 - ❖ D : diámetro de la chimenea en m.
 - ❖ u : velocidad del viento a la altura de la boca de la chimenea en m/s.
 - ❖ p : presión atmosférica en mb.
 - ❖ T_s : temperatura de salida de los gases de la chimenea en K.
 - ❖ T_a : temperatura atmosférica en K.

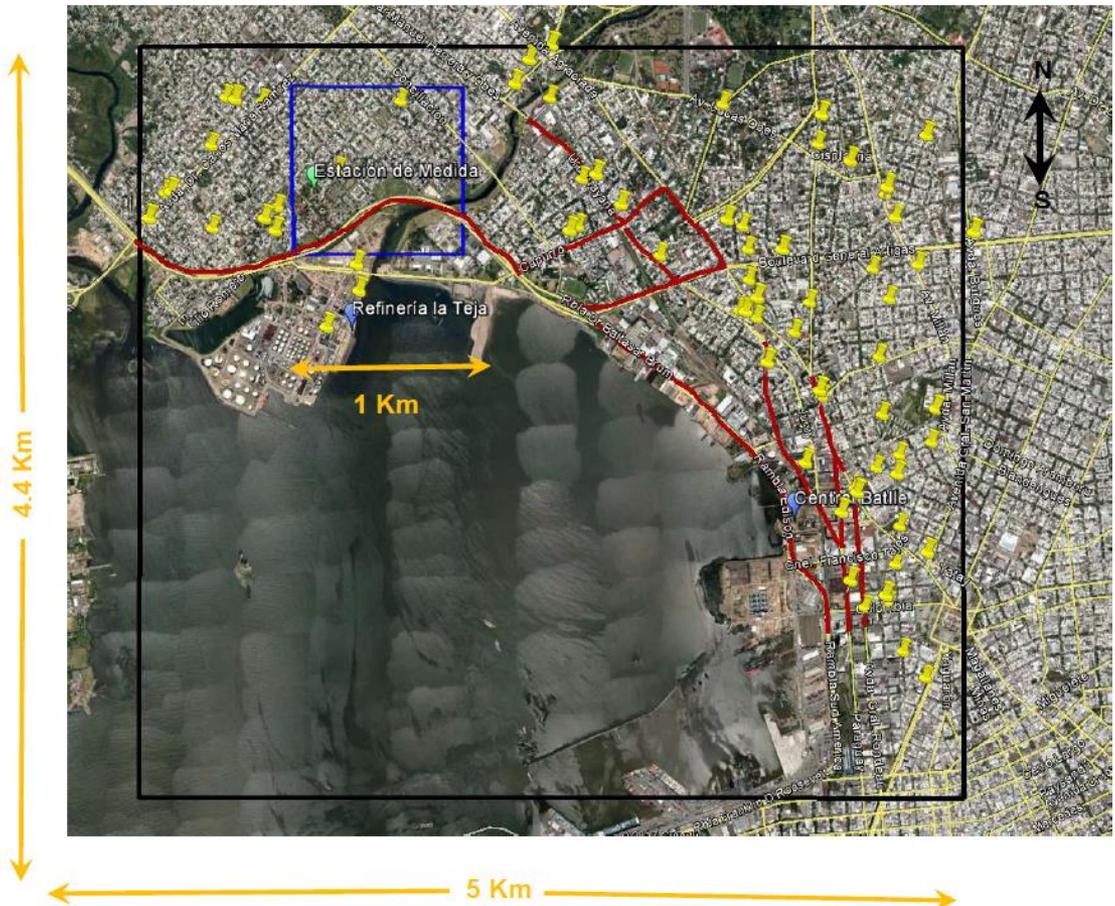
CFD

- CFD: Computational Fluid Dynamics.
- ❖ Representación más realista de la dinámica del flujo (difiere del modelo de penacho gaussiano).
- ❖ Se resuelve la ecuación de dispersión reactiva promediada utilizando algoritmos numéricos.
- ❖ Se realiza una representación explícita de la geometría de las edificaciones presentes.
- ❖ Requieren una alta capacidad de cómputo: puede ser una limitante.

CFD

- Ejemplo de aplicación:

Esquema del dominio utilizado para las simulaciones numéricas: Dominio de modelación Gauss-IMFIA: recuadro negro; Dominio de modelación caffa3d.MBRi (CFD): recuadro azul. Emisiones puntuales: indicadores amarillos y azules; Emisiones lineales: rutas y calles señaladas en rojo; Emisiones superficiales: sector residencial; Ubicación de estación de calidad del aire: indicador verde (ANII-FSE “Modelo integral de emisiones gaseosas y particuladas a la atmósfera: Análisis de una zona industrial y residencial de Montevideo”, IMFIA).

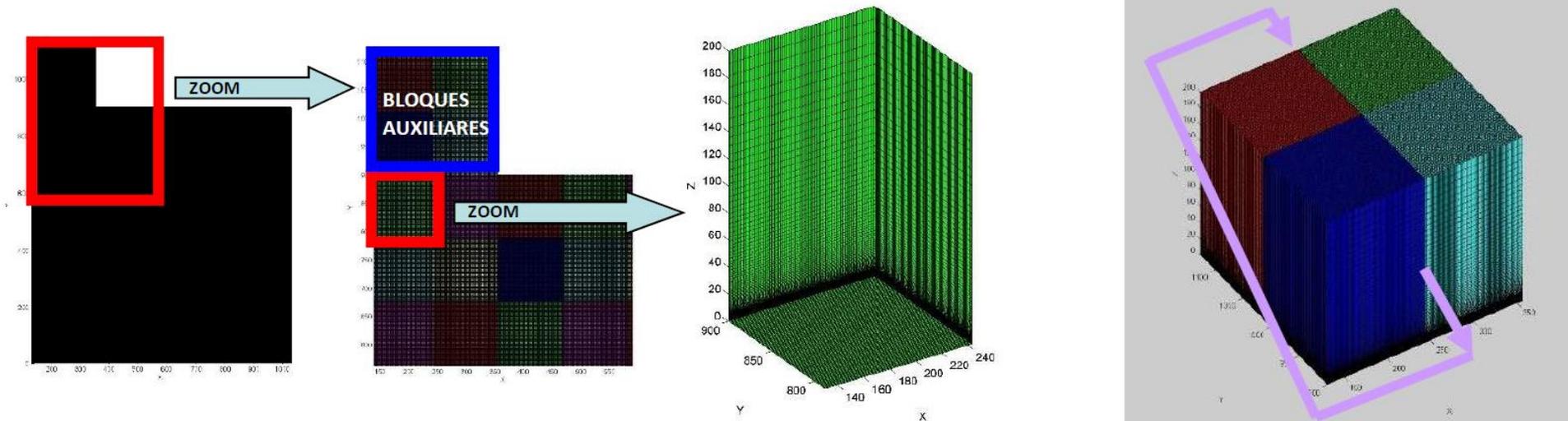


CFD

- Ejemplo de aplicación:
 - ❖ Se abordó la simulación numérica de grandes vórtices (LES: Large Eddy Simulation) de la dinámica del flujo turbulento en el dominio considerado.
 - ❖ Para esto se utilizó el modelo `caffa3d.MBRi`, desarrollado en FIng.
 - ❖ Para estas simulaciones se recurrió al Cluster FIng, debido a la alta capacidad computacional requerida: se utilizaron más de 60 millones de celdas de cómputo. Este aspecto resultó ser uno de los puntos limitantes en cuanto a la cantidad de escenarios a simular, y por este motivo se seleccionó la condición de viento más representativa de acuerdo a la campaña de monitoreo realizada.
 - ❖ Finalmente, se compuso la inmisión total en cada punto del dominio detallado como la suma de las inmisiones obtenidas por el modelo CFD y el modelo de penacho gaussiano (aportes externos).
 - ❖ Se consideró a los contaminantes como trazadores pasivos.

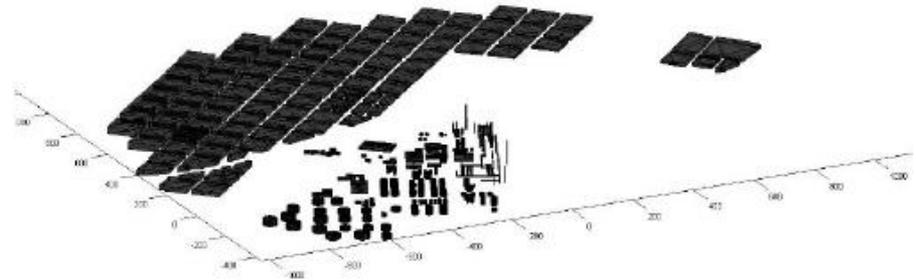
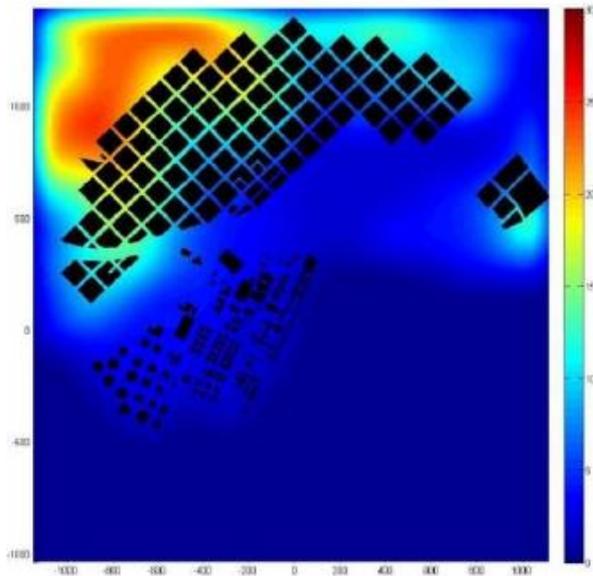
CFD

- Ejemplo de aplicación:
- ❖ Generación del dominio de cálculo:
 - Se diseñó utilizando 68 bloques de cálculo en total: 64 para el dominio de interés (bloques principales), y 4 bloques auxiliares para generar la condición de borde de entrada al modelo (condiciones de borde periódicas).
 - Cada bloque tiene dimensiones horizontales de 125 m x 125 m y una altura máxima de 200 m, con un total de 96x96x96 celdas, lo que implica un total de 60 millones de celdas de cálculo aproximadamente.



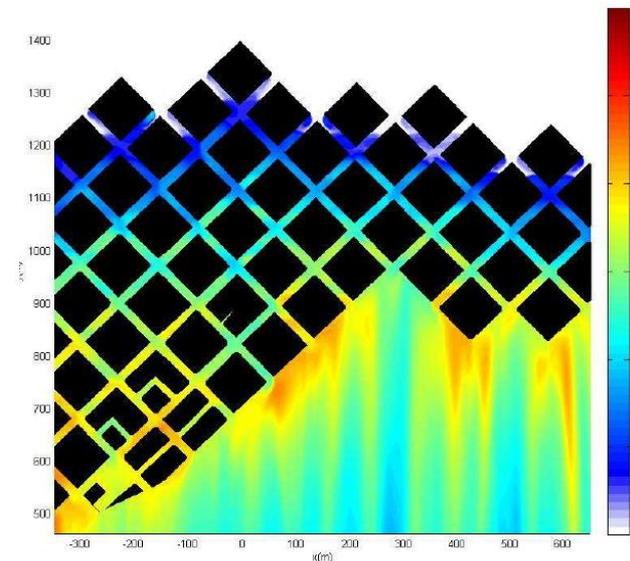
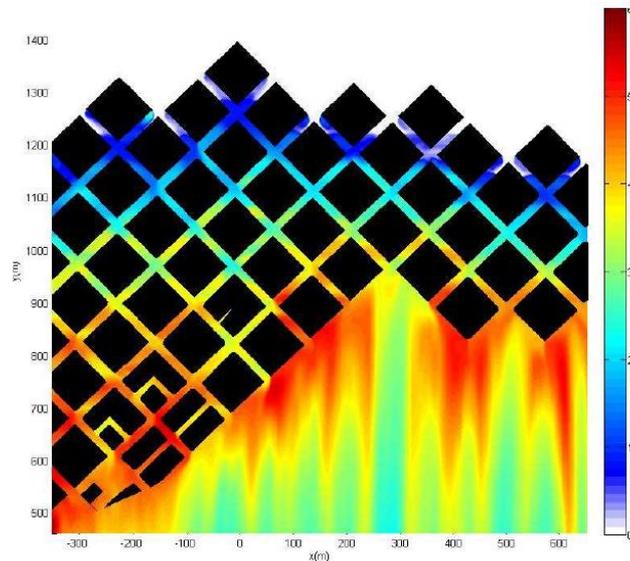
CFD

- Ejemplo de aplicación:
- ❖ Representación de topografía (con escala de colores) y edificaciones en el dominio:



CFD

- Ejemplo de aplicación:
- ❖ Resultados:
 - Se observó que las emisiones puntuales existentes en el dominio no son de gran impacto pues sólo existen dos dentro del mismo y se observa que son opacadas por las emisiones superficiales correspondientes a las residencias.
 - Análisis de escenarios: concentración media de PM_{10} ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) a nivel de suelo, para 10 minutos de simulación en el escenario base (izquierda), y con el uso de estufas eficientes (derecha):



EJERCICIO

- En función de la información proporcionada, calcular la concentración en inmisión de CO generada por una industria que descarga sus emisiones a través de una chimenea de 20 m de altura.
- Considerar condiciones atmosféricas inestables (A) y estables (F).
- El sitio de interés para el cálculo de las concentraciones se ubica a 500 m de la fuente emisora, en la dirección del viento y a nivel de suelo.
- Para el cálculo de los valores de σ_y y σ_z pueden utilizarse los ábacos o las funciones de Matlab disponibles en EVA.

TRABAJO FINAL

- Evaluación del cumplimiento de normativa:
 - ❖ Estándar diario: concentración de base máxima diaria + concentración adicional máxima diaria.
 - ❖ La concentración máxima diaria es igual al máximo de la serie de concentraciones medias diarias.
 - ❖ Estándar anual: concentración de base media diaria + concentración adicional media diaria.
 - ❖ La concentración media diaria es igual al promedio de la serie de concentraciones medias diarias.
- Repaso de propuesta y datos.

TRABAJO FINAL

- Procedimiento de corrección:

Escala de valor	Correcto (3 puntos)	Errores menores (2 puntos)	Errores mayores (1 punto)
Criterio			
Alcance	Completo	Levemente incompleto	Incompleto
Procedimiento	Claro	Algo confuso	Confuso
Resultados	Correctos	Errores de cálculo	Errores conceptuales
Presentación	Correcta	Algo desprolija	Desprolija
Puntaje mínimo para aprobar el curso			6

TRABAJO FINAL

- Calendario:
- ❖ Clase de consulta: ¿?
- ❖ Entrega: ¿?