



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

---

---

**PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA**

**INSTITUTO DE INGENIERÍA**

**ESTUDIO COMPARATIVO DE LA SIMULACIÓN  
DE DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES EN LA ATMÓSFERA  
PARA ESTUDIOS DE IMPACTO AMBIENTAL**

**T E S I S**

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

**MAESTRO EN INGENIERÍA**

MECÁNICA-TERMOFLUIDOS  
P R E S E N T A :

**ING. JUAN ÁNGEL SERRANO GUTIÉRREZ**

TUTOR:

**DR. ALEJANDRO RODRÍGUEZ VALDÉS**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**JURADO ASIGNADO:**

Presidente: DR. FRANCISCO JAVIER SOLORIO ORDAZ

Secretario: DR. ALEJANDRO RODRÍGUEZ VALDÉS

Vocal: DR. FEDERICO MÉNDEZ LAVIELLE

1<sup>er</sup>. Suplente: DR. MARTÍN SALINAS VÁZQUEZ

2<sup>do</sup>. Suplente: DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

Lugar donde se realizó la tesis:

INSTITUTO DE INGENIERÍA, UNAM.

**TUTOR DE TESIS:**

---

DR. ALEJANDRO RODRÍGUEZ VALDÉS

# Agradecimientos

Quiero agradecer a todas aquellas personas que de una u otra forma me ayudaron y fueron parte de mi vida durante estos tres años.

Gracias a mis padres por brindarme siempre su apoyo incondicional, cuidados, paciencia y sobre todo cariño. Gracias a mi hermano y a su esposa por su apoyo y convivencia. A mis tíos y primos más cercanos por formar parte de esta familia de la que me siento orgulloso.

A la Universidad Nacional Autónoma de México por toda la formación y educación que he recibido de esta gran casa de estudios. Al Instituto de Ingeniería de la UNAM y especialmente a mi tutor Dr. Alejandro Rodríguez Valdés por todos los consejos, guía, paciencia y la confianza que depositó en mi. A mis compañeros becarios del Instituto de Ingeniería de la Coordinación de Procesos Industriales y Ambientales y a mis compañeros y profesores de termofluidos por todas esas horas de convivencia y estudio. Gracias a todas aquellas personas que he conocido a lo largo de mi vida y que me han brindado su más sincera amistad.

# Índice general

<b>1. Contaminación atmosférica</b>	<b>5</b>
1.1. Clasificación de las fuentes de emisión de contaminantes . . . . .	6
1.2. Clasificación de la contaminación por sus dimensiones . . . . .	6
1.3. Clasificación de los contaminantes de la atmósfera . . . . .	7
<b>2. Meteorología</b>	<b>13</b>
2.1. Características de la atmósfera . . . . .	13
2.2. Estratos de la atmósfera . . . . .	13
2.3. Variables de estado y Termodinámica de la atmósfera . . . . .	14
2.4. Modelos meteorológicos . . . . .	20
2.4.1. Sistemas de macroescala . . . . .	20
2.4.2. Sistemas mesoescala . . . . .	21
2.4.3. Sistemas de microescala . . . . .	21
<b>3. Modelos de dispersión de contaminantes</b>	<b>23</b>
3.1. Breve compendio de los distintos tipos de modelos . . . . .	23
3.2. TAPM . . . . .	25
3.2.1. Módulo de meteorología . . . . .	26
3.2.2. Módulo de dispersión . . . . .	29
3.3. ISC . . . . .	30
3.3.1. Modelo Gaussiano . . . . .	31
<b>4. Resultados</b>	<b>33</b>
4.1. Breve descripción de la CTPPEC . . . . .	33
4.2. Breve resumen de las normas relevantes para este estudio . . . . .	35
4.3. Resultados de la simulación en TAPM . . . . .	36
4.4. Resultados de la simulación en ISCST . . . . .	48
4.5. Resultados del estudio PUMA-CFE . . . . .	55
<b>5. Conclusiones</b>	<b>63</b>

# Resumen

En esta tesis se llevó a cabo una comparación entre dos programas de cómputo para simular la dispersión de contaminantes en la atmósfera en torno de una planta termoeléctrica. El primero de ellos fue el programa *The Air Pollution Model 2.0* (TAPM) y el segundo *Industrial Source Complex Short Term 3.0* (ISCST3).

El ISC representa a los modelos convencionales de dispersión de contaminantes que usan aproximaciones semi-empíricas o teóricas de nubes o plumas Gaussianas con datos meteorológicos obtenidos previamente en el lugar de interés. Estos modelos son computacionalmente eficientes, pero tienen la desventaja de necesitar dichos datos meteorológicos del sitio recopilados para todas las horas de por lo menos un año; y no son aplicables sobre terrenos complejos o en situaciones en las que se presentan condiciones complejas en el flujo del aire (e.g. fumigación en zonas costeras). Aunque algunos de esos modelos tienen parametrizaciones para manejar estas situaciones, sus resultados no son del todo precisos ya que en el mejor de los casos están en un factor de dos.

Por otra parte el TAPM es un programa, que tanto en capacidad de procesa como en costo de los equipos de cómputo, ha sido posible aplicar como medio alternativo en la simulación de dispersión de contaminantes. Está basado en los modelos de pronóstico que resuelven las ecuaciones fundamentales de la mecánica de fluidos y ecuaciones de transporte para predecir la meteorología y dispersión de contaminantes, y se han convertido cada vez más en un método viable para aplicaciones de contaminación atmosférica. La principal ventaja de este método es que elimina la necesidad de disponer datos meteorológicos del sitio particular para correr el modelo.

La comparación giró en torno a un estudio previo realizado por el Programa Universitario del Medio Ambiente (PUMA) en el Instituto de Ingeniería de la UNAM. Dicho estudio fue realizado en el año 2000 para la Comisión Federal de Electricidad (CFE). Tuvo el nombre de “Diagnóstico Ambiental en la Zona de Influencia de la Central Termoeléctrica Plutarco Elías Calles” y en este se incluyó el monitoreo intensivo de la calidad del aire en cinco puntos aledaños a la central y el monitoreo de las fuentes de emisión (chimeneas).

Con los datos de las fuentes de emisión para la CTPPEC se realiza la simulación en TAPM, de la base de datos sinópticos de meteorología se procesa el archivo de meteorología local que requiere el ISC correspondientes a la localidad en cuestión (Petacalco) para finalmente introducirlos en ISC ; y finalmente, se comparan los resultados, tanto entre los dos modelos como con los datos de campo medidos.

# Abstract

In this thesis a comparison between two programs for air pollution modeling was carried out to calculate the dispersion of polluting agents near a thermoelectrical plant. The first of them was the program *The Air Pollution Model 2.0* (TAPM) and the second was *Industrial Source Complex Short Term 3.0* (ISCST).

The ISC represents the conventional models based on Gaussian puffs or plumes. These models are efficient, but they have the disadvantage to need meteorological data and they are not applicable on complex lands or in situations in which appear complex conditions in the air flow (e.g. fumigation in coastal zones); although some of those models have parametrizations to handle these situations, their results are not absolutely precise and in the best case they predict values with factor of two.

On the other hand, the TAPM is a program that with the improvement in speed of processing has been possible to apply like an alternative mean in the simulation of air pollution. Is a prognostic air pollution model which solve the fundamental fluid dynamics and transport equations to predict the meteorology and dispersion of pollutants. The main advantage of this method is that it eliminates the necessity to have site-specific meteorological data to run the model.

The comparison was based on a previous study made by the Institute of Engineering of the UNAM. This study was made in 2000 for the Federal Commission of Electricity (CFE). With the data of this previous study the simulation in TAPM was carried out and then the meteorological data was sent to the program ISC to make the comparison.

# Capítulo 1

## Contaminación atmosférica

Usualmente nos referimos a la contaminación atmosférica como una condición en la que algunas sustancias se encuentran en concentraciones mayores a las que existen en condiciones “normales” (atmósfera limpia) para producir efectos nocivos significativos tanto en seres humanos, animales, plantas o materiales. Las sustancias pueden ser productos de procesos naturales o hechas por el hombre. Estas sustancias pueden ser sólidas (partículas), líquidas (aerosoles) o gaseosas (e.g.  $\text{CO}_2$ ). Principalmente son de interés las sustancias que pueden causar efectos indeseables tales como olores desagradables, irritación, enfermedades o incluso muertes de los individuos, daño a la vegetación, daño en los materiales, disminución de la visibilidad y cambios en el clima. Estos efectos indeseables pueden ser producidos por una larga o corta exposición a dichos elementos[6].

Desafortunadamente la contaminación siempre ha estado ligada a la actividad humana desde sus remotos principios. El problema de la contaminación se ha agravado en los últimos 200 años debido al rápido crecimiento de la población y la industria. Por ejemplo, a nivel mundial se emiten alrededor de 2 mil millones de toneladas por año de  $\text{CO}_2$  y partículas suspendidas producto de la quema de combustibles fósiles. Debido a esto, en la actualidad se elaboran gran cantidad de estudios y proyectos para minimizar la emisión de este tipo sustancias contaminantes al ambiente mediante un mejor aprovechamiento de los recursos. Paralelamente se llevan a cabo estudios para predecir los efectos que una futura fuente de emisión de contaminantes tendrá sobre un área específica, de manera que no se rebasen los límites de la calidad del aire para dicha región.

En el problema de la contaminación del aire existen tres elementos importantes a considerar: (1) la o las fuentes de emisión (2) la dinámica atmosférica, que es la encargada de transportar los elementos emitidos por las fuentes y en la que se lleva a cabo la advección, difusión, transformaciones químicas, deposición, etc. (3) los receptores que se encuentran cerca del nivel del suelo y que tienen distintas respuestas al contaminante dependiendo del tipo y tiempo de exposición al mismo[21].

El entendimiento completo del fenómeno de la contaminación abarca muchas disciplinas. Para estimar o medir las emisiones de las especies de los contaminantes de interés de una variedad de fuentes se requiere un conocimiento de la química de la combustión y aspectos ingenieriles del diseño de equipos y técnicas en el control de la contaminación atmosférica. Entender las características de los diversos contaminantes atmosféricos requiere de conocimientos de la química atmosférica, física



de aerosoles y radiación. Entender el transporte y difusión de los contaminantes requiere conocimientos de meteorología y mecánica de fluidos. El entendimiento de las transformaciones químicas y procesos de remoción requiere del conocimiento de química atmosférica, procesos físicos relacionados con la formación de nubes y la precipitación. Finalmente, el entendimiento de las diversas respuestas que los receptores (e.g. seres humanos, plantas, animales, materiales, instrumentos, etc.) tienen a cada uno de los contaminantes requiere conocimientos de monitoreo de la calidad del aire, fisiología, medicina, biología y ciencia de materiales. Así, la contaminación es un problema cuyo estudio y solución requiere de esfuerzos interdisciplinarios por científicos, ingenieros, agencias de protección ambiental, legisladores y de la población en general [19][7].

## 1.1. Clasificación de las fuentes de emisión de contaminantes

Las diversas fuentes de contaminantes pueden ser divididas en tres grandes categorías. Cada una de esas categorías pueden, a su vez, ser divididas en varias subcategorías[20].

- Fuentes industriales y urbanas. Estas son emisiones relacionadas con la generación eléctrica, industria, transporte, basureros, industria de construcción, etc.
- Agrícolas y fuentes rurales. Lo son el levantamiento de polvo por actividades propias de la agricultura, quema de pastizales, emisiones provenientes de los fertilizantes presentes en el suelo, pesticidas, desperdicios en descomposición, etc.
- Fuentes naturales. Algunos ejemplos son la erosión eólica, incendios forestales, erupciones volcánicas, emisiones biogénicas, evaporación y brisa marina, procesos microbianos en el suelo, descomposición de materia orgánica, rayos, etc.

## 1.2. Clasificación de la contaminación por sus dimensiones

En general, la calidad del aire tiende a empeorar en aquellos lugares donde los contaminantes son emitidos, como por ejemplo en zonas urbanas y zonas con un alto nivel de congestionamiento vehicular. Pero muchas veces el problema de la contaminación no solo está presente en esas zonas aledañas, inclusive, dependiendo de las condiciones, esta puede abarcar zonas más grandes. En la tabla 1.1 se resume este tipo de clasificación[6].

- Tipo I. Problemas que incluyen contaminación en lugares cerrados, contaminación local alrededor de zonas industriales, termoeléctricas, basureros, etc.

Cuadro 1.1: Tipos y escalas de la contaminación atmosférica.

	Tipo de problema	Escala horizontal	Escala vertical	Escala Temporal	Organización
	Interiores	$10^{-2} - 10^{-1}$ km	hasta $10^{-1}$ km	$10^{-1} - 1$ hr	Familia/Negocios
I	Local	$10^{-1} - 10$ km	hasta 3 km	$10^{-1} - 10$ hr	Municipio/País
	Urbano	$10 - 10^2$ km	hasta 3 km	$1 - 10^2$ hr	Municipio/País
II	Regional	$10^2 - 10^3$ km	hasta 15 km	$10 - 10^3$ hr	Estado/País
	Continental	$10^3 - 10^4$ km	hasta 30 km	$10^2 - 10^4$ hr	País/Mundo
III	Hemisférico	$10^4 - 2 \times 10^4$ km	hasta 50 km	$10^3 - 10^5$ hr	Mundo
	Global	$4 \times 10^4$ km	hasta 50 km	$10^3 - 10^6$ hr	Mundo

- Tipo II. Problemas a nivel regional y continental. Como por ejemplo la lluvia ácida producida por la emisión de  $\text{SO}_2$  en zonas industriales con efectos de lluvia ácida en zonas lejanas, incluso transfrontera; también el transporte regional de ozono y el de partículas causadas por los incendios forestales.
- Tipo III. Problemas que incluyen contaminación a nivel global y hemisférico con sus posibles consecuencias en cambios climáticos en periodos de años, décadas o siglos. El ejemplo más conocido es el del efecto invernadero debido a la emisión de  $\text{CO}_2$  y la eliminación del ozono estratosférico que trae como consecuencia la formación de hoyos en la capa de ozono que permite el ingreso de los rayos ultravioleta a la superficie terrestre.

### 1.3. Clasificación de los contaminantes de la atmósfera

Debido a que existe una gran variedad de contaminantes en la atmósfera, actualmente no existe una manera clara de clasificarlos a todos ellos. En lo general los contaminantes se pueden dividir en dos amplias categorías[21][20]:

- Contaminantes primarios. Son aquellos que se emiten directamente a la atmósfera y que no sufren ninguna transformación física ni química.
- Contaminantes secundarios. Son los que se forman en la atmósfera como resultado de las reacciones químicas y fotoquímicas entre los contaminantes primarios con el oxígeno y nitrógeno del aire. Distintos tipos de reacciones químicas se llevan a cabo, tales como las que son propiciadas por las partículas de sal en los ambientes costeros, gotas ácidas, nitratos, sulfatos,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{O}_3$  y una gran variedad de hidrocarburos oxigenados.

Otra forma para su clasificación es por su estado físico. Los contaminantes gaseosos incluye a todos los gases que son encontrados en la atmósfera en niveles superiores a los que normalmente se encuentran en esta, mientras que los contaminantes en partículas incluyen tanto a las partículas sólidas como líquidas que son capaces de ser transportadas por la atmósfera.

La atmósfera seca está compuesta principalmente por nitrógeno ( $\text{N}_2$ ), oxígeno ( $\text{O}_2$ ) y varios gases inertes—argón( $\text{Ar}$ ), neón( $\text{Ne}$ ), kriptón ( $\text{Kr}$ ) y xenón ( $\text{Xe}$ ). Estas concentraciones han permanecido prácticamente constantes en el tiempo. La concentración del vapor de agua es muy variable tanto en espacio como en tiempo y es

Cuadro 1.2: Composición típica de la atmósfera y sus contaminantes.

Gas	Concentración promedio [ppm]	Contaminante	Concentración promedio [ppm]	Tiempo de residencia
N <sub>2</sub>	780,840	CO <sub>2</sub>	355	15 años
O <sub>2</sub>	209,460	CH <sub>4</sub>	1.7	7 años
Ar	9,340	N <sub>2</sub> O	0.3	10 años
Ne	18.2	CO	0.05–0.2	65 días
Kr	1.1	SO <sub>2</sub>	10 <sup>-5</sup> – 10 <sup>-4</sup>	40 días
Xe	0.09	NH <sub>3</sub>	10 <sup>-4</sup> – 10 <sup>-2</sup>	20 días
He	5.2	NO <sub>x</sub>	10 <sup>-6</sup> – 10 <sup>-2</sup>	1 día
H <sub>2</sub>	0.58	HNO <sub>3</sub>	10 <sup>-5</sup> – 10 <sup>-3</sup>	1 día
H <sub>2</sub> O	Variable	O <sub>3</sub>	10 <sup>-2</sup> – 10 <sup>-1</sup>	

uno de los ingredientes más importantes del clima en la tropósfera y por lo general no se le considera un contaminante. El CO<sub>2</sub> es un gas que se encuentra en niveles relativamente altos en la atmósfera y es parte del ciclo natural de CO<sub>2</sub> en los seres vivos, pero el incremento en las concentraciones del mismo a una tasa de 0.5 % por año es debido claramente a la quema de combustibles fósiles, pastizales y deforestación. En la tabla 1.2 se muestran las concentraciones para los componentes de la atmósfera así como de algunos de sus contaminantes.

Una clasificación comúnmente utilizada para los contaminantes gaseosos de la atmósfera es dada en la tabla 1.3, la cual está basada en sus propiedades químicas.

- Compuestos de azufre. Las mayores fuentes de compuestos de azufre presentes en la atmósfera son aquellas que están relacionadas con la quema de combustibles fósiles y materia orgánica, descomposición biológica, tiraderos de basura, manufactura de pulpa y papel, procesos de fundición, brisa marina y evaporación marina. Los compuestos de azufre principales son el SO<sub>2</sub> y el SO<sub>3</sub>. Este último reacciona rápidamente con la humedad del aire para formar ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>). El SO<sub>2</sub> es un gas incoloro con un olor irritante y picante. Este gas reacciona al contacto con superficies, sufre transformaciones gas-partícula y mediante catálisis. El SO<sub>2</sub> reacciona con el agua para formar ácido sulfúrico y los sulfatos que genera son considerados como contaminantes secundarios y pueden reaccionar con el agua aumentando su acidez.
- Compuestos de nitrógeno. El nitrógeno forma un compuesto muy estable, el N<sub>2</sub>, el cuál se encuentra en abundancia en la atmósfera y reduce el poder oxidante del oxígeno que en esta existe. Se produce por la combustión a elevadas temperaturas, incendios forestales, en las tormentas eléctricas, etc. De los óxidos que se forman, solo tres: óxido nitroso (N<sub>2</sub>O), óxido nítrico (NO) y dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>), son encontrados en concentraciones considerables. Los últimos dos a menudo se les llama óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>). El óxido nitroso es un gas incoloro y no tóxico que esta presente en la atmósfera en concentraciones relativamente altas. Comúnmente es llamado gas hilarante y que produce risa a la persona que lo inhala. Debido a su baja reactividad con

la atmósfera no es un gas que sea de preocupación en lo que a contaminación se refiere; además no existen fuentes antropogénicas para dicho gas aparte de los suelos fertilizados.

Los óxidos de nitrógeno,  $\text{NO}_x$ , son contaminantes de gran importancia ya que estos son los gases principales en las reacciones fotoquímicas que producen ozono ( $\text{O}_3$ ) y el llamado smog fotoquímico. El NO principalmente es producto de la combustión ya que a elevadas temperaturas el nitrógeno atmosférico reacciona con el oxígeno para formar NO y el 0.5-10 % de este se transforma en  $\text{NO}_2$ . En una atmósfera contaminada, el NO se oxida en  $\text{NO}_2$  debido principalmente a las reacciones fotoquímicas secundarias. El dióxido de nitrógeno es un gas de rojizo-café con un olor picante y penetrante. Absorbe la luz del sol en el espectro amarillo-azul y muy cercano al ultravioleta y forma, mediante esa energía absorbida, NO y oxígeno monoatómico O que reacciona fácilmente con el oxígeno de la atmósfera  $\text{O}_2$  y forma ozono  $\text{O}_3$ . Otro compuesto del nitrógeno es el amoníaco  $\text{NH}_3$ , que a pesar de su toxicidad, no se le considera un contaminante de gran interés ya que aún se encuentra en concentraciones muy bajas. Se emite principalmente por procesos biológico-bacterianos en desechos biológicos. De las fuentes industriales están las refinerías, fábricas de amoníaco, plantas de fertilizantes y grandes establos. Las emisiones de estos gases en los Estados Unidos se han incrementado en una tasa del 10 al 15 % anual.

- Compuestos inorgánicos de carbono. Los compuestos inorgánicos primarios presentes en la atmósfera son monóxido de carbono (CO) y bióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) y son producidos principalmente por combustión completa e incompleta de combustibles que contienen carbono tales como el carbón mineral, petróleo, carbón vegetal, gas, etc. También se produce por la descomposición del material orgánico, procesos de respiración en plantas y animales y procesos de descomposición anaeróbicos. El incremento en los niveles de estos gases se asocia más a las actividades antropogénicas.

El monóxido de carbono es un gas incoloro, inodoro, no irritante, pero altamente tóxico considerado un peligroso asfixiante. Se combina con la hemoglobina de la sangre y reduce su capacidad de llevar oxígeno a los tejidos del cuerpo. En lo que a emisiones antropogénicas se refiere, este se genera primordialmente en procesos de combustión. En la naturaleza se emite en los incendios (forestales, de pastizales, etc.), erupciones volcánicas y en varias ocasiones estas fuentes de emisión rebasan las fuentes antropogénicas. La emisión de CO en los vehículos se ha reducido gracias al empleo de convertidores catalíticos.

El bióxido de carbono  $\text{CO}_2$  generalmente no es considerado como un contaminante de la atmósfera. No es tóxico y es un elemento principal en el ciclo de vida de plantas y animales. Una gran cantidad del  $\text{CO}_2$  presente en la atmósfera es debido a fuentes naturales, pero el hombre ha incrementado los niveles de este gas mediante la quema excesiva de combustibles fósiles. El  $\text{CO}_2$  se asocia con el efecto invernadero. Se ha observado que el incremento de este gas es del 0.5 % anual.

- Compuestos orgánicos de carbono. Algunos de estos contaminantes son emiti-

dos directamente a la atmósfera y otros son producto de las reacciones fotoquímicas secundarias. Comprenden todos los hidrocarburos y los hidrocarburos oxigenados. Muchos hidrocarburos son emitidos a la atmósfera por fuentes naturales como volcanes, incendios forestales, filtraciones naturales de gas y procesos biológicos. En áreas urbanas e industriales muchos hidrocarburos incluyendo compuestos volátiles orgánicos son emitidos por fuentes antropogénicas tales como transporte, termoeléctricas, plantas químicas, refinerías, ciertas actividades en la construcción, quemado de pasto, etc.

El metano  $\text{CH}_4$  es probablemente el compuesto orgánico más abundante. Naturalmente se produce en zonas pantanosas, en los sembradío de arroz, por la putrefacción de la materia orgánica, fisuras en los yacimientos de gas, por los procesos de digestión de los animales, etc. Tiene una reactividad relativamente baja y no es considerado en reacciones fotoquímicas. El principal interés en esta sustancia se debe a su papel como un gas invernadero.

- Hidrocarburos distintos al metano. Su principal importancia se debe a que son agentes precursores del smog fotoquímico bajo la presencia de los rayos solares y que trae como consecuencia la formación de ozono. Dependiendo de sus tipos de enlaces, estos se pueden clasificar en cuatro grupos: *alcanos o parafinas, alquenos u olefinas, acetilenos y aromáticos*. Existen muchos compuestos en cada grupo. Los principales compuestos ligados a las actividades humanas son el benceno, tolueno, formaldehído, cloruro de vinil, fenoles, cloroformo y tricloroetileno. Adicional a los compuestos volátiles orgánicos existen varios hidrocarburos que se producen naturalmente. El más abundante es el isopreno, que es emitido en zonas boscosas por los pinos, también el  $\alpha$ -pineno,  $\beta$ -pineno y limoneno. En zonas boscosas estas emisiones rebasan por mucho a las emisiones antropogénicas produciéndose ozono. El compuesto más reactivo de todos los anteriores es el pineno.

Los hidrocarburos por si solos existen en concentraciones relativamente bajas y son de baja toxicidad. El principal interés en estos es que reaccionan con el ozono,  $\text{NO}_2$  y los radicales de hidroxil. Los hidrocarburos oxigenados se clasifican en alcoholes, fenoles, éteres, aldehídos, ketones, peróxidos y ácidos orgánicos. Muchos hidrocarburos son formados como productos secundarios por las reacciones fotoquímicas.

- Ozono y oxidantes. El ozono ( $\text{O}_3$ ) es un gas altamente reactivo de color azul que se forma naturalmente a grandes alturas en el interior de la estratósfera por reacciones fotoquímicas que involucran al oxígeno diatómico y oxígeno monoatómico en la presencia de radiación ultravioleta. Su concentración a esas alturas depende de la latitud y longitud. La mayoría del ozono se encuentra entre 10 y 40 km con su máxima concentración a los 20 km sobre la superficie de la tierra. Es bien sabido que a esas alturas el ozono juega un papel benéfico filtrando la radiación ultra-violeta y protegiendo a la vida terrestre de sus efectos destructivos. En la actualidad esta capa se ha venido deteriorando por sustancias como los clorofluorocarbonos o CFC's que atacan al ozono mediante reacciones químicas complicadas.

Cuadro 1.3: Clasificación de contaminantes gaseosos basada en sus propiedades químicas[6].

Clase	Contaminantes primarios	Contaminantes secundarios
Compuestos de azufre	Dióxido de azufre (SO <sub>2</sub> ), trióxido de azufre (SO <sub>3</sub> ), sulfuro de hidrógeno (H <sub>2</sub> S), disulfuro de carbono (CS <sub>2</sub> ), sulfuro de carbonilo (COS), disulfuro de dimetilo ((CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> S)	Trióxido de azufre (SO <sub>3</sub> ), ácido sulfúrico (H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ), ion sulfato (SO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ), sulfato amónico ((NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> )
Compuestos de nitrógeno	Oxido nítrico (NO), óxido nitroso (N <sub>2</sub> O), dióxido de nitrógeno (NO <sub>2</sub> ), amoníaco (NH <sub>3</sub> )	Oxido nítrico (NO), dióxido de nitrógeno (NO <sub>2</sub> ), ácido nítrico (HNO <sub>3</sub> ), ion nitrato (NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ), ion amonio (NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> )
Compuestos inorgánicos de carbono	Monóxido de carbono (CO), bióxido de carbono (CO <sub>2</sub> )	Bióxido de carbono (CO <sub>2</sub> ), compuestos inorgánicos de carbono oxigenados
Compuestos orgánicos de carbono	Metano (CH <sub>4</sub> ), terpenos, isoprenos, parafinas, olefinas y aromáticos	Nitratos orgánicos, peróxidos, hidrocarburos oxigenados clasificados como aldehídos, cetonas y ácidos
Compuestos halogenados	Fluoruro de hidrógeno (HF, ácido clorhídrico (HCl), tetracloruro de carbono (CCl <sub>4</sub> ), clorofluorocarbonos (CFCs), metil cloroformo (CH <sub>3</sub> CCl <sub>3</sub> )	
Sustancias radioactivas	Estroicio ( <sup>90</sup> Sr), Cesio ( <sup>137</sup> Cs), yodo ( <sup>131</sup> I), tritio ( <sup>3</sup> H)	

El ozono que se encuentra en la tropósfera es conocido como ozono malo ya que este tiene un gran poder corrosivo y daña a las plantas, materiales y es peligroso para la salud humana. Como se ha comentado anteriormente el ozono es producto en las atmósferas contaminadas con compuestos orgánicos volátiles, por lo que es un indicador del smog foto-químico.

- Compuestos halogenados. Estos compuestos incluyen los elementos y compuestos de fluor, cloro, bromo y yodo. De estos el cloro (Cl<sub>2</sub>), ácido fluorhídrico (HF), ácido clorhídrico (HCl), CFC's, los freónes y los pesticidas halogenados son encontrados frecuentemente. Actualmente existe gran interés en estos contaminantes debido a que los CFC's provocan la destrucción de la capa de ozono y el ácido clorhídrico contribuye a la lluvia ácida.
- Partículas suspendidas. Las partículas suspendidas o aerosoles incluyen aquellas partículas en estado sólido o líquido, excepto el agua pura que existe bajo condiciones normales. Muchas de estas son producto de emisiones antropogénicas o naturales, mientras otras son producto de la condensación de algunos gases y vapores que son emitidos a la atmósfera o son resultado de reacciones químicas. De esta forma, al igual que los gases contaminantes, las partículas pueden ser clasificadas en partículas primarias o secundarias. Para clasificar a las partículas se requiere de una descripción completa tal como su composición, tamaño, concentración, fase, morfología y actividad biológica. Respecto a su tamaño existe límite ampliamente aceptado de 10 μm. Partículas con diámetro menor a esa cantidad son conocidas como PM<sub>10</sub>.

# Capítulo 2

## Meteorología

Un componente fundamental en la descripción de la contaminación, es la dinámica atmosférica, ya que es en la atmósfera local donde se llevan a cabo los procesos de transporte, difusión, reacción y sedimentación (remoción) de los contaminantes.

### 2.1. Características de la atmósfera

La atmósfera está compuesta por 78.1% en volumen de nitrógeno, 20.9% de oxígeno, 0.93% de argón y otras pequeñas cantidades de gases nobles, bióxido de carbono y contaminantes. La humedad es un constituyente principal de la atmósfera y juega un papel muy importante desde el punto de vista termodinámico, esta se encuentra concentrada principalmente en la parte baja de la atmósfera (tropósfera).

La atmósfera es capaz de rechazar luz proveniente del sol por debajo de los  $0.4 \mu\text{m}$  (luz ultravioleta) y es capaz de absorber espectros por arriba de los  $0.7 \mu\text{m}$  (luz infrarroja), manteniendo así la variación de temperatura en un rango aceptable y evitando la entrada de rayos nocivos para la vida en la tierra. Los gases responsables del primer efecto (rechazo de la luz ultravioleta) son principalmente el  $\text{O}_2$  y el  $\text{O}_3$ , los gases responsables de atrapar la energía proveniente del sol son principalmente el  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$  y el vapor de agua.

### 2.2. Estratos de la atmósfera

La estructura estratificada de la atmósfera puede ser clasificada de varias formas (ver figura 2.1), por su distribución de temperatura en sentido vertical se obtienen los siguientes segmentos[6]:

- Tropósfera. Es la capa inferior de la atmósfera y en ella ocurren los fenómenos meteorológicos. Contiene el 80% de toda la masa de gases de la atmósfera y el 99% del vapor de agua. En los polos tiene una altitud de 11 km y sobre el ecuador 16 km. La tasa de variación de la temperatura con respecto a la altitud es de  $-6.5 \text{ }^\circ\text{C}/\text{km}$  para la atmósfera estándar. La capa superior de la tropósfera es llamada tropopausa y varía tanto su altura como su espesor dependiendo de la longitud, latitud y época del año. La temperatura promedio de la tropopausa es de 220 K. La mayoría de los fenómenos meteorológicos son desarrollados en

esta capa, al igual que la dispersión, convección, transformación y remoción de los contaminantes que son emitidos cerca del suelo.

- **Estratósfera.** Esta se extiende hasta los 50 km de altitud. En su parte más baja mantiene un perfil de temperatura constante (más o menos los primeros 10 km) después su temperatura asciende hasta los 270 K a una tasa de 1.8 °C/km debido a la presencia del ozono estratosférico; a esta altitud se encuentra la estratopausa. La estratósfera carece casi por completo de nubes u otras formaciones meteorológicas.
- **Mesósfera.** Se extiende de los 50 hasta los 85 km de altitud. En este estrato la temperatura nuevamente comienza a decrecer a una tasa de -2.6 °C/km aproximadamente. El mínimo valor encontrado es de más o menos 170 K, el cual marca el límite superior de la mesósfera también llamada mesopausa. La mesósfera junto con la estratósfera son conocidas también como atmósfera media. Los componentes menores de la atmósfera media, incluidos los compuestos químicos naturales y antropogénicos se transportan desde las regiones de penetración en esta región atmosférica (por lo general, la estratósfera ecuatorial inferior) hasta la mesósfera, desde donde pueden desplazarse rápidamente (en menos de seis meses) hasta cualquier latitud. Debido a los rápidos movimientos y a las bajas densidades naturales de la mesósfera, éste es el primer lugar en que se dejan sentir los efectos de cantidades pequeñas de algunos compuestos antropogénicos.
- **Termósfera.** Es la capa superior de la atmósfera que va desde los 80 km a altitudes de 1 000 km o más. En este estrato la temperatura vuelve a incrementarse con rapidez alcanzando temperaturas en su parte superior de hasta 1 500 K. La baja densidad de los gases presentes en ella hacen que cualquier objeto presente en esta no aumente su temperatura. El incremento en su temperatura se debe a la conversión de la energía solar incidente en calor sensible como resultado de la fotodisociación del O<sub>2</sub> y fotoionización del N<sub>2</sub> y el oxígeno atómico. La parte baja de la termósfera que llega hasta los 400 km es conocida como la ionósfera debido a que en esa zona los átomos de oxígeno y moléculas de nitrógeno se fotoionizan. La ionósfera juega un papel muy importante en la reflexión de ondas de radio; en ella ocurren también fenómenos como las auroras boreales y australes.

### 2.3. Variables de estado y Termodinámica de la atmósfera

Las variables de estado básicas involucradas en la termodinámica de la atmósfera son la presión, temperatura, densidad y humedad específica. Todas estas variables mencionadas anteriormente no son totalmente independientes unas de otras. Están relacionadas a través de la ecuación de estado, ecuación hidrostática, la primera ley de la termodinámica y otras relaciones termodinámicas.



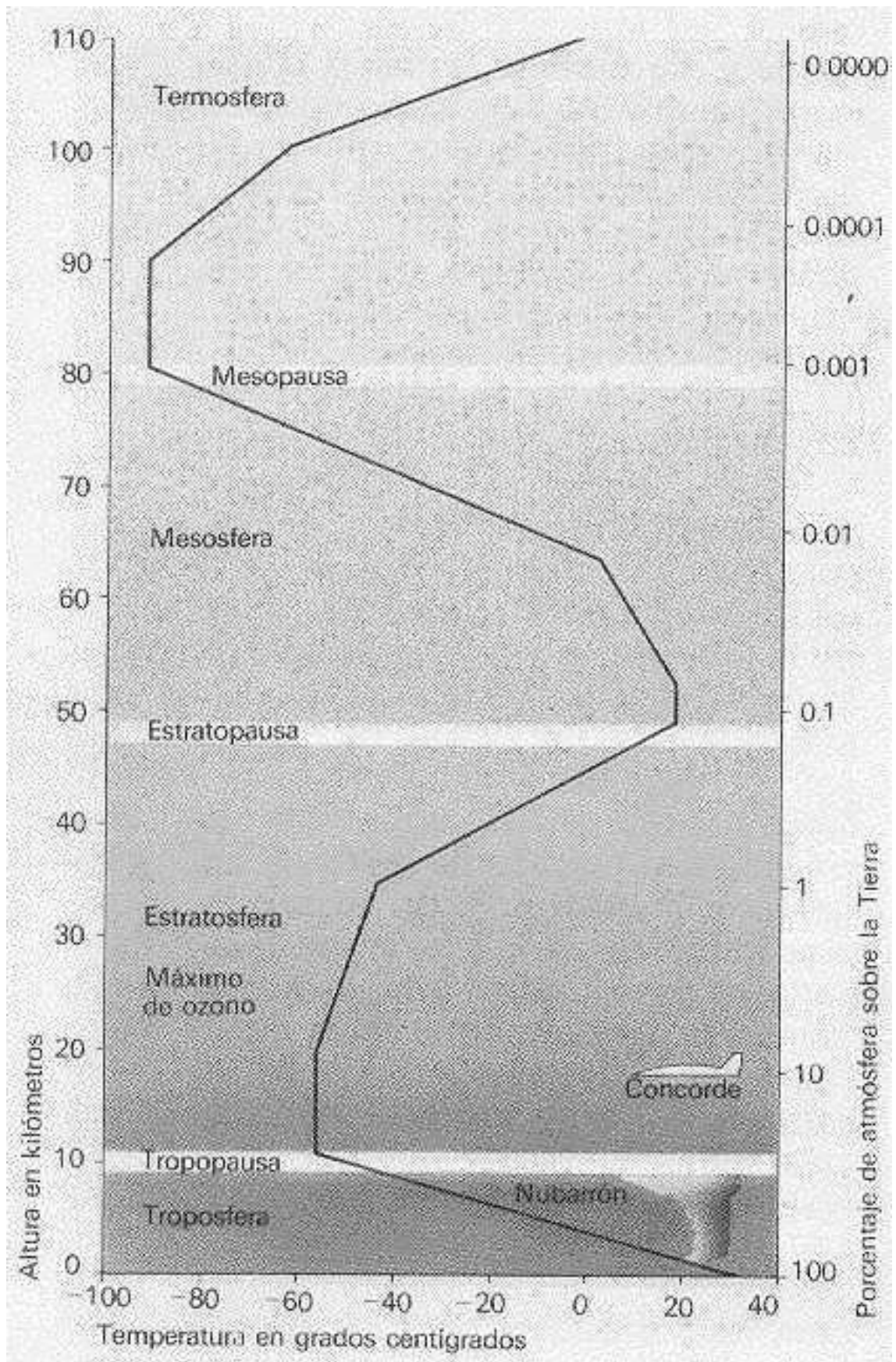


Figura 2.1: Variación de la temperatura en la atmósfera en función de la altura.

- Ecuación de estado. La ecuación de estado para los gases ideales es:

$$pV = nR^*T \quad (2.1)$$

en la que  $R^*$  es la constante universal de los gases ( $R^*=8.314 \text{ J/molK}$ ),  $n$  es el número de moles. La constante particular de un gas está dada por

$$R = \frac{R^*}{M} \quad (2.2)$$

sustituyendo la ecuación 2.2 en 2.1 se obtiene

$$pV = mRT \quad (2.3)$$

- Ecuación hidrostática. Dentro de un fluido la presión que este ejerce en un cuerpo sumergido en él es

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \quad (2.4)$$

la ecuación 2.4 es válida únicamente con la atmósfera en reposo, o bien cuando las variaciones topográficas no generan aceleraciones en los campos de viento tal que la presión dinámica se torne importante en su magnitud. De las ecuaciones de movimiento, que serán dadas más adelante, se verá que esta es una buena aproximación para flujos atmosféricos a gran escala.

- Primer ley de la termodinámica. La primer ley de la termodinámica es esencialmente la ley de la conservación de la energía.

$$dU = dH + dW \quad (2.5)$$

La energía interna para un gas ideal es función de la temperatura. Para un proceso a presión constante se tiene:

$$dU = c_p dT \quad (2.6)$$

y para un proceso a volumen constante

$$dU = c_v dT \quad (2.7)$$

en donde

$$c_p - c_v = R \quad (2.8)$$

Expresando el trabajo hecho en una porción de aire en términos de presión y volumen se puede obtener la siguiente expresión para la entalpía, que establece que la adición de calor a una porción de aire producirá un cambio en su temperatura y/o presión.

$$dH = c_p dT - v dp \quad (2.9)$$

- Procesos adiabáticos. Es un proceso en el que el calor no atraviesa las fronteras de un sistema. Una porción de aire que se mueve hacia arriba o abajo prácticamente no intercambia calor sensible con su entorno. Es decir, al subir o bajar en la atmósfera una porción de aire cambiará su presión y por consiguiente cambiará su temperatura de acuerdo con la ecuación 2.9 y haciendo  $dH=0$  se tiene

$$\left(\frac{dT}{dz}\right)_{ad} = -\frac{g}{c_p} = \Gamma \quad (2.10)$$

esa tasa de variación tiene un valor de 0.0098 [K/m] (i.e. 9.8 K/km). Utilizando las ecuaciones 2.4 y 2.10 se obtiene

$$\frac{dT}{T} = \left(\frac{R}{C_p}\right) \frac{dp}{p} \quad (2.11)$$

que integrando

$$T = T_0 \left(\frac{p}{p_0}\right)^k \quad (2.12)$$

en donde  $T_0$  es la temperatura correspondiente a la presión de referencia  $p_0$  y  $k \simeq \frac{R}{c_p} \simeq 0,286$ .

- Temperatura potencial. La temperatura potencial es aquella que se espera alcance una porción de aire al ser desplazado a una presión de referencia de 1 atm en un proceso adiabático desde su posición inicial.

$$\theta = T \left(\frac{1}{p}\right)^k \quad (2.13)$$

en donde  $p$  está expresada en atm. Esta ecuación es útil para relacionar el gradiente de la temperatura potencial con el gradiente existente de temperatura en un lugar dado mediante la siguiente aproximación

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{\theta}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial z} + \Gamma\right) \simeq \frac{\partial T}{\partial z} + \Gamma \quad (2.14)$$

esta aproximación es especialmente útil en la parte baja de la tropósfera en donde  $\theta$  y  $T$  no difieren en más de 10%.

Con base en el gradiente de temperatura existente en un sitio y el gradiente adiabático  $\Gamma$  se puede clasificar la estabilidad de la atmósfera:

1. Superadiabática, cuando  $-\partial T/\partial z > \Gamma$

2. Adiabática, cuando  $-\partial T/\partial z = \Gamma$
  3. Subadiabática, cuando  $-\partial T/\partial z < \Gamma$
  4. Isotérmica, cuando  $\partial T/\partial z = 0$
  5. Inversión, cuando  $\partial T/\partial z > 0$
- Humedad relativa del aire. La humedad en forma de vapor en el aire se puede considerar que ejerce una presión de vapor  $p_v$  que es una pequeña fracción de la presión total. De las ecuaciones de estado para el aire húmedo y del vapor de agua se puede demostrar que

$$\phi \simeq \frac{M_w p_v}{M_d p} = 0,622 \frac{p_v}{p} \quad (2.15)$$

en donde  $M_w$  y  $M_d$  son las masas moleculares del vapor de agua y el aire seco, respectivamente. Para una temperatura dada, la presión de vapor de agua siempre será menor a la presión de saturación; esta última está relacionada con la temperatura mediante la ecuación de Clausius-Clapeyron

$$\frac{dp_{vs}}{p_{vs}} = \frac{M_w L_{pv}}{R^*} \frac{dT}{T^2} \quad (2.16)$$

en donde  $L_{pv}$  es el calor latente de vaporización o condensación. Integrando 2.16 con la condición empírica que en el punto de congelación ( $T=273.15$  K) la  $p_{vs} = 6.11$  [mb], da como resultado

$$\ln \frac{p_{vs}}{6,11} = \frac{M_w L_{pv}}{R^*} \left( \frac{1}{273,15} - \frac{1}{T} \right) \quad (2.17)$$

en la que  $p_{vs}$  está en mb.

Utilizando la ley de Dalton de las presiones parciales, la ecuación de estado para el aire húmedo puede ser escrita de la forma

$$pV = mRT_v \quad (2.18)$$

en la que  $T_v$  es la temperatura virtual definida en términos de la temperatura actual y humedad específica como

$$T_v = T(1 + 0,61\omega) \quad (2.19)$$

que es la temperatura que el aire seco tendría si su presión y densidad fueran iguales a las del aire húmedo. En algunos casos, la humedad específica no significa cambios muy relevantes en las variables de estado, por lo que la temperatura potencial virtual puede ser definida como

$$\theta_v = T_v \left( \frac{1}{p} \right)^k \quad (2.20)$$

es más apropiada que la temperatura potencial  $\theta$  (ecuación 2.13). Una aproximación que relaciona a la temperatura potencial virtual y la temperatura virtual es

$$\frac{\partial \theta_v}{\partial z} \simeq \frac{\partial T_v}{\partial z} + \Gamma \quad (2.21)$$

Una porción de aire húmedo que se eleva se saturará eventualmente conforme se expande y se enfría. Una parte del vapor de agua se condensará y el calor latente de condensación se liberará. Durante la condición de saturación, la temperatura de la porción de aire cambia de acuerdo a la tasa del lapso de saturación dado por

$$\Gamma_s = - \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{sat} = \frac{g}{c_p + L_{p_v} d\phi_s/dT} \quad (2.22)$$

en donde  $d\phi_s/dT$  es la pendiente de la curva  $\phi_s$  vs.  $T$ . Nótese que  $\Gamma_s$  es ligeramente menor a  $\Gamma$ . A diferencia de  $\Gamma$ ,  $\Gamma_s$  es muy sensible a la temperatura debido a que  $d\phi_s/dT$  es una función creciente con respecto a  $T$ . Se debe observar que  $\left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{ad}$  siempre esta entre  $\Gamma$  y  $\Gamma_s$ .

- Estabilidad atmosférica. Las variaciones de temperatura y humedad específica con respecto a la altura en la atmósfera dan como resultado variaciones en la densidad en sentido vertical, esto es, estratificación de la atmósfera. Así, al existir una porción de aire que sube o baja en una atmósfera estratificada, esta porción experimentará una fuerza de flotación cuyo sentido y magnitud dependerá de la diferencia en densidades en el aire circundante. Esta aceleración puede calcularse utilizando el principio de Arquímedes y la ecuación de estado para el aire húmedo

$$a_b = g \left( \frac{\rho - \rho_p}{\rho_p} \right) = g \left( \frac{T_{vp} - T_v}{T_v} \right) \quad (2.23)$$

considerando un pequeño desplazamiento  $\Delta z$  de la porción de aire desde su posición inicial, en donde su densidad es igual al aire que la rodea, la aceleración debida a la flotación puede ser expresada como

$$a_b \simeq - \frac{g}{T_v} \left( \frac{\partial T_v}{\partial z} + \Gamma \right) \Delta z = - \frac{g}{T_v} \frac{\partial \theta_v}{\partial z} \Delta z \quad (2.24)$$

Cualitativamente, un medio estratificado es llamado estable si la fuerza de flotación tiende a regresar a la porción de aire a su posición inicial; por el contrario, se llama inestable cuando la fuerza de flotación tiende a alejar a dicha porción de aire de su posición inicial. Cuando la fuerza de flotación es nula se dice que el medio es neutral.

## 2.4. Modelos meteorológicos

Los modelos meteorológicos se pueden clasificar en modelos de diagnóstico y de pronósticos. Los primeros obtienen el campo de vientos a través de una interpolación de las observaciones disponibles, mientras que el segundo trata de llevar a cabo una simulación de la dinámica de la capa límite atmosférica a través de la solución de las ecuaciones fundamentales de la mecánica de fluidos.

Como es sabido, en la dispersión de contaminantes existen tres fenómenos principales que contribuyen a la misma: la difusión molecular, turbulencia y advección. Dependiendo de la escala meteorológica a estudiar, se pueden llegar a desprestigiar ciertos términos. Esta separación natural de fenómenos define las escalas meteorológicas. Estas son la macroescala, mesoescala y microescala[9].

### 2.4.1. Sistemas de macroescala

También llamado sistema de circulación global. Los movimientos, procesos y fenómenos que ocurren son del orden de miles de kilómetros pero, por supuesto, limitado por la circunferencia de la tierra. Su escala de tiempo es de días o semanas. Verticalmente abarca toda la tropósfera ya que en las demás capas no ocurren fenómenos de gran importancia en lo que a difusión de contaminantes se refiere. La fuerza motriz de estos sistemas se debe principalmente al gradiente de temperatura ocasionado por la cantidad de energía solar en función de la latitud y, por supuesto por la rotación y traslación terrestres. Debido a las distancias que abarcan y al tiempo que un contaminante puede permanecer en estos sistemas, solo los contaminantes más estables e inertes permanecen en estos ya que la mayoría terminan siendo depositados o sufren transformaciones sucesivas que los convierten en contaminantes más estables o contaminantes susceptibles a ser depositados.

### Sistemas sinópticos

Dentro de los sistemas de macroescala, cuando son vistos en escalas de tiempo del orden de semanas, se encuentran las grandes masas de aire más o menos homogéneas formadas sobre diferentes regiones, obteniendo así sus propias características. Estas masas de aire son separadas unas de otras por franjas estrechas llamadas frentes. A lo largo de estos frentes a menudo se forman ciclones de latitudes medias y otros sistemas de bajas presiones. También se encuentran los ciclones y anticiclones tropicales y subtropicales. Todos esos sistemas tienen gran influencia en el estado del tiempo, por lo que son llamados sistemas sinópticos.

Dichos sistemas sinópticos afectan a la dispersión de contaminantes emitidos en la parte baja de la tropósfera en escalas de tiempo del orden de días. En este tiempo los contaminantes se distribuyen a todo lo largo de la capa límite planetaria gracias a la turbulencia y alcanzan grandes extensiones. La ventilación de los contaminantes existentes en la capa límite planetaria es llevada a cabo gracias a los movimientos verticales ascendentes o descendentes. Al mismo tiempo, los contaminantes son también depositados gracias a las nubes que traen consigo estos sistemas. Así, estos sistemas, con sus vientos intensos, nubes y precipitaciones contribuyen más a la limpieza de la atmósfera.

Aunque, por otra parte, los sistemas estacionarios o semiestacionarios de alta presión son de gran interés para estudios de dispersión de contaminantes ya que crean movimientos en la atmósfera que tienden a estancar a los contaminantes en una capa delgada cercana a la superficie.

### 2.4.2. Sistemas mesoescala

El clima y los sistemas de circulación atmosférica para extensiones de 5 a 1,000 km son llamados sistemas de mesoescala. Estos son el resultado de la topografía y la localización geográfica del lugar tales como costas, montañas y valles, islas, etc.

Estos sistemas de mesoescala se subdividen en dos grupos principales:

1. Circulaciones inducidas térmicamente. Se producen por la diferencia de densidades producto de una diferencia de temperatura. Estas abarcan las circulaciones térmicas básica, brisas marinas y terrestres, monzones, islas térmicas, vientos de montaña y valle, y vientos katabáticos.
2. Circulaciones inducidas mecánicamente. Son vientos producidos por inclinaciones y accidentes en el terreno. Los más conocidos son las estelas de montañas y valles, y ondas de Lee<sup>1</sup>. Obviamente las dimensiones de estas circulaciones están relacionadas íntimamente con la forma, pendiente y dimensiones de los obstáculos.

Los sistemas de mesoescala tienen un gran impacto en la convección y difusión de contaminantes. En general, las circulaciones térmicas tales como las brisas marinas o terrestres y los vientos de montaña o valle se encargan de transportar los contaminantes atrapados en ellos. Pero es importante recalcar que los contaminantes pueden acumularse en circulaciones térmicas cerradas. A menudo este tipo de circulaciones representan las peores condiciones que resultan en altas concentraciones a nivel del suelo.

Para representar correctamente el transporte de contaminantes en uno de estos sistemas uno debe conocer la naturaleza de todo el flujo asociado al sistema. Debido a que la dispersión es causada por la heterogeneidad espacial de la turbulencia en estos sistemas, esta última debe ser conocida también. Tal descripción detallada del flujo medio y turbulencia y la dispersión asociada es posible solo mediante modelos numéricos de mesoescala; para los cuales solo es necesario saber los datos meteorológicos en un punto muy apropiado para describir la dispersión cuando esta se encuentra fuertemente influenciada por un sistema de circulación a mesoescala.

### 2.4.3. Sistemas de microescala

Sus dimensiones son de 5 km o menos y la escala de tiempo es de una hora o menos. La escala vertical está limitada por la capa límite planetaria, capa de mezclado o cualquier sistema al que esté asociado. La microescala más pequeña

---

<sup>1</sup>Se refiere a un fenómeno que sucede en flujos estables estratificados. Cuando una corriente de aire se encuentra con la cima de una montaña, esta provoca una perturbación en dicha corriente que la hace describir una onda senoidal que termina por regresar a su nivel de equilibrio.

está determinada por el tamaño del vórtice turbulento más pequeño que subsiste al mecanismo de disipación viscosa; este es del orden de milímetros. La escala más pequeña de tiempo son los milisegundos. En estos tipos de sistemas el efecto de la aceleración de Coriolis y la estratificación de la atmósfera pueden ser despreciados con facilidad.

Para estos sistemas, la importancia de la capa límite planetaria es de gran importancia. En esta capa límite la turbulencia es formada por dos mecanismos principales, el primero es el esfuerzo cortante en la superficie y el segundo la convección por flotación. El primero es dominante cuando existen fuertes vientos sobre una superficie irregular y las condiciones de estabilidad son cercanas a la estable. El segundo domina cuando existen calmas y la superficie está siendo calentada por los rayos del sol. La turbulencia generada por el cortante sobre una superficie tiene su máximo cerca a la misma superficie y va disminuyendo con la altura. La turbulencia convectiva está distribuida uniformemente a lo largo de la capa límite planetaria, pero tiene un valor ligeramente superior en la mitad de la CLP. La parte superior de la CLP se define como la parte en donde prácticamente la turbulencia desaparece o es insignificante. Debido a que los contaminantes emitidos dentro de la CLP son dispersados a todo lo alto de esta, la CLP también es llamada altura o profundidad de mezclado. Es de esperar que la altura de mezclado varíe en función de las condiciones climáticas. Por lo general la altura de mezclado es mayor durante el día que durante la noche, debido al calentamiento solar. Debido a que el flujo promedio y la turbulencia dentro de la capa límite están influenciados por las características del terreno en donde estos existen, es natural que en los cambios de superficie (mar, costa, bosques, plantíos, desiertos, ciudades, etc.), temperatura y humedad esta varíe. A estas modificaciones se les conoce como capa límite interna. También en las construcciones tales como edificios, bardas, fábricas se modifica la estructura original de la capa límite formándose zonas de recirculación, estelas, etc.

La gran mayoría de contaminantes de la atmósfera son emitidos en la CLP, por lo que su dispersión está en función del flujo promedio y la turbulencia existente en esta. La turbulencia es el principal mecanismo de dispersión dentro de la CLP. Los contaminantes emitidos en forma de pluma o nube en el aire, eventualmente se mezclarán a lo largo de la CLP conforme son transportados a mayores distancias y serán dispersados finalmente por sistemas de mayores escalas. Para modelar la dispersión en una capa límite idealizada horizontalmente, se debe conocer a priori las distribuciones verticales del flujo promedio y su turbulencia al igual que la altura de mezclado. En los modelos de simulación más simples, solo la velocidad y dirección del viento a la altura efectiva de liberación del contaminante es requerida; también un estimado de la altura de mezclado y mediciones indirectas de la turbulencia y estabilidad son requeridas. En otras aplicaciones de simulación, la dirección del viento, velocidad, turbulencia y altura de mezclado son parametrizadas utilizando relaciones empíricas y teóricas de la teoría de capa límite. En modelos más sofisticados, los campos de velocidad y turbulencia son calculados.



# Capítulo 3

## Modelos de dispersión de contaminantes

Los modelos de difusión atmosférica se manifiestan como necesarios, si se considera que la previsión y cuantificación del impacto ambiental atmosférico sólo es posible con un análisis idóneo, cuando se ha conseguido la modelación de las características básicas de los medios emisor, difusor y receptor así como en su interrelación[8].

La aplicación de un modelo de difusión tiene como objeto la integración de los elementos que inciden en la calidad del aire, como son los condicionantes atmosféricos, localización de los focos e intensidad de los mismos, situación de los receptores, influencia de la topografía, orografía, etc., a fin de adecuar las medidas correctoras económicamente y técnicamente más viables.

Los modelos de difusión atmosférica aparecen como instrumentos de gran utilidad y en muchas ocasiones como prioritarios en los programas de evaluaciones de impacto ambiental, planificación urbana e industrial, diseño de redes de calidad del aire, etc. A continuación se muestra una breve clasificación de los distintos tipos de modelos de dispersión de contaminantes[11].

### 3.1. Breve compendio de los distintos tipos de modelos

1. Modelos de caja. Están basados en la ecuación de conservación de masa. El sitio de interés es tratado como una caja dentro de la cual se emiten contaminantes y sufren transformaciones químicas. Requieren de la entrada de datos simples de la meteorología del lugar y emisiones, el movimiento dentro y fuera de contaminantes en las fronteras de la caja es permitido. Dentro de la caja se hace la suposición de que todos los contaminantes están perfectamente mezclados. Una de las ventajas de este modelo es que la meteorología simplificada del mismo permite calcular complejas reacciones químicas, al igual que la dinámica de aerosoles. Su mayor desventaja es que no pueden determinar concentraciones locales.
2. Modelos Gaussianos. Este tipo de modelos son ampliamente utilizados en el modelado de dispersión de contaminantes y en particular con fines regulati-

vos y a menudo son anidados dentro de modelos Euleriano y Lagrangianos. El principio de funcionamiento de los modelos Gaussianos está basado en distribuciones Gaussianas de plumas tanto en dirección vertical como horizontal bajo condiciones de estado permanente. La distribución normal de la pluma es modificada a distancias mayores debido a los efectos de reflexión por la turbulencia provenientes de la superficie de la tierra y en la capa límite cuando la altura de esta es muy baja. El ancho de la pluma es determinado mediante los parámetros de dispersión  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  los cuales son definidos por los tipos de estabilidad de Pasquill y Gifford[15] o por la distancia recorrida desde su origen. Una limitación importante de los modelos de pluma es que no toman en cuenta el tiempo que tardan en llegar las partículas al lugar del receptor, ya que son aproximaciones en estado permanente. Por lo tanto, la dinámica de los aerosoles debe ser calculada posteriormente mediante un modelo Lagrangiano. Además, el modelado regional generalmente requiere de la incorporación de modelos químicos para predecir con precisión la formación de partículas provenientes de formaciones secundarias de aerosoles orgánicos. Incluso la química de  $\text{NO}_x$  y  $\text{SO}_x$ , que es fundamental para determinar concentraciones de partículas y ozono, es a menudo calculada con simples modelos exponenciales. Modelos más avanzados pueden simular algunas transformaciones químicas utilizando un post-procesamiento químico. Aunque la mayoría de los modelos Gaussianos solo consideran la difusión y advección de los contaminantes, recientemente se han desarrollado modelos Gaussianos más avanzados que incluyen procesos físicos como la deposición y reacciones químicas rápidas. Aunado a todo esto, los modelos Gaussianos no consideran la interacción de varias plumas, lo que puede ser significativo para ambientes urbanos.

Estos modelos también incluyen algoritmos que sirven para modelar los procesos físicos y químicos que ocurren en flujos alrededor de edificaciones. El efecto de las estelas en los edificios puede ser aproximada mediante la modificación de los coeficientes  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$ . De todas formas, las ecuaciones Gaussianas no son capaces de calcular los efectos de recirculación causados por edificios múltiples. Algunas de las restricciones inherentes a los modelos de pluma Gaussianas pueden ser superados mediante la aproximación de la pluma con una serie de nubes, con lo cual es posible variar la velocidad del viento. En esta aproximación cada nube se comporta de acuerdo a la ecuación Gaussianas de dispersión y la contribución total de la fuente es calculada integrando respecto al tiempo la contribución en cada uno de los receptores de cada una de las plumas. Otra limitante de dichos modelos es que no pueden calcular la dispersión de contaminantes en la ausencia de viento o en lugares cercanos a las fuentes, i.e. distancias menores a 100m. Estos modelos tienden a sobrestimar las concentraciones bajo condiciones de poco viento. Debido a que los modelos Gaussianos asumen vientos homogéneos no se recomienda utilizarlos para calcular concentraciones en lugares muy alejados de las fuentes debido a que se espera que la meteorología cambie a dichas distancias. La distancia no debe ser mayor del orden de decenas de kilómetros de la fuente.

3. Modelos eulerianos y lagrangianos. Los modelos Lagrangianos son similares a los modelos de caja ya que definen una región de aire como una caja que

contiene una concentración inicial de contaminantes. Estos modelos siguen la trayectoria de estas cajas conforme estos se mueven en el flujo. La concentración es un producto de un término fuente y una función de densidad de probabilidad conforme el contaminante se mueve de  $x$  a  $x'$ . Los modelos incluyen cambios en la concentración debidos al flujo promedio del fluido, turbulencia y difusión molecular. Los modelos Lagrangianos trabajan bien tanto para condiciones homogéneas y estables sobre terrenos planos, como para condiciones inestables y heterogéneas sobre terrenos complejos. Es posible modelar química no lineal usando la superposición de una malla de concentraciones en el dominio, seguida por el cálculo de las concentraciones en cada malla o la partícula puede ser tratada como una caja expandida y el módulo foto-químico del modelo aplicado a cada caja. Con los datos meteorológicos se calculan la varianza de las fluctuaciones del viento y la función de correlación Lagrangiana. Debido a que los modelos Lagrangianos calculan las características de la difusión mediante la generación de números semi-aleatorios estos no están confinados por las clases de estabilidad y curvas sigma, como es el caso de los modelos Gaussianos.

4. Modelos de dinámica de fluidos computacionales. Estos modelos permiten un análisis más complejo del flujo del aire basados en las leyes de continuidad y cantidad de movimiento, resolviendo las ecuaciones de Navier-Stokes mediante métodos de diferencias finitas o volumen finito en las tres dimensiones. La turbulencia típicamente se calcula por el método de cierre  $k-\varepsilon$  para calcular el parámetro isotrópico de viscosidad turbulenta presente en las ecuaciones de transporte de masa y momentum, que asume que el contaminante es dispersado de igual manera en todas direcciones. Este tratamiento funciona bien para capas límites planas.

A continuación se hace una descripción más detallada de los programas utilizados en este trabajo de tesis con el fin de entender su principio de funcionamiento.

## 3.2. TAPM

*The Air Pollution Model* es un programa capaz de pronosticar la meteorología y dispersión de contaminantes en 3D. Utiliza bases de datos de la topografía del lugar, uso de suelo, temperatura de suelo y mar y análisis sinópticos de la meteorología. TAPM consiste de dos componentes principales acopladas, la primera de meteorología pronosticada y la segunda el módulo que resuelve la dispersión de contaminantes. Para hacer esto resuelve aproximaciones de las ecuaciones fundamentales de la mecánica de fluidos y de las ecuaciones de transporte. Este programa ha sido utilizado para evaluar varios métodos de cierre para turbulencia [14], para modelar la meteorología[18][10], para modelar transporte de contaminates sin considerar reacciones químicas[23][16] y considerando reacciones químicas[12].

### 3.2.1. Módulo de meteorología

Este programa utiliza un sistema coordenado tridimensional cuyas coordenadas en el eje  $z$  siguen al terreno. El modelo resuelve las ecuaciones de *momentum* para los componentes horizontales del viento, la ecuación de *momentum* para medios incompresibles es resuelta para el componente vertical y ecuaciones escalares para la temperatura potencial virtual y humedad específica del vapor de agua, humedad de las nubes y la cantidad de lluvia. La función de presión de Exner es dividida en sus componentes hidrostática y no hidrostática, la ecuación de Poisson es resuelta para la componente no hidrostática. Procesos microfísicos de la nubosidad son incluidos. Los términos turbulentos en estas ecuaciones han sido determinados resolviendo las ecuaciones para la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación viscosa para entonces utilizar estos valores para representar los flujos verticales mediante un gradiente de difusión, incluyendo un término de contragradiante para el flujo de calor. Un esquema de caracterización del suelo es utilizado, mientras que los flujos de radiación tanto en la superficie como en niveles superiores son incluidos.

La radiación solar en la superficie es utilizada para el cálculo de las condiciones de frontera y para escalar variables, incluye componentes de onda corta y larga para cielo despejado con modificaciones por la humedad presente en la atmósfera.

La temperatura y humedad en la superficie son calculadas mediante un promedio ponderado para valores de suelo y vegetación. Una aproximación de restablecimiento forzado es utilizada para la temperatura y humedad del suelo y un balance de energía en el suelo es utilizado para la temperatura de la vegetación. Las condiciones de frontera para los flujos turbulentos son determinados mediante las variables de escala de Monin-Obukhov.

Aunque el programa TAPM toma en cuenta varios parámetros[13]; a continuación solo se describen los parámetros que están más relacionados con la dinámica de fluidos.

#### Variabes meteorológicas básicas

Los componentes de la velocidad promedio del viento  $u$  y  $v$  son calculados de las ecuaciones de *momentum* y el componente vertical  $\dot{\sigma}$  de la ecuación de continuidad. La temperatura potencial virtual es determinada de una ecuación que resulta de combinar la ecuación de la conservación de la energía y del vapor de agua. La función de presión de Exner  $\pi = \pi_H + \pi_N$  es determinada mediante la suma de los componentes hidrostático  $\pi_H$  y no hidrostático  $\pi_N$ . Las ecuaciones para estas variables son

$$\frac{du}{dt} = F(u) + \frac{\partial \overline{w'u'}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} - \theta_v \left( \frac{\partial \pi}{\partial x} + \frac{\partial \pi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) + f_v - N_s(u - u_s) \quad (3.1)$$

$$\frac{dv}{dt} = F(v) + \frac{\partial \overline{w'v'}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} - \theta_v \left( \frac{\partial \pi}{\partial y} + \frac{\partial \pi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) + f_u - N_s(v - v_s) \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \dot{\sigma}}{\partial \sigma} = - \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + u \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) + v \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \quad (3.3)$$

$$\frac{d\theta_v}{dt} = F(\theta_v) + \frac{\overline{\partial w' \theta'_v}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} + S_{\theta_v} - N_s(\theta_v - \theta_{vs}) \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial \pi_H}{\partial \sigma} = -\frac{g}{\theta_v} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^{-1} \quad (3.5)$$

$t$  = es el tiempo [s]

$x, y, \sigma$  = las coordenadas [m]

$$\sigma = z_T \left( \frac{z - z_s}{z_T - z_s} \right) \quad (3.6)$$

$z_T$  = máxima altura del modelo [m]

$z_s$  = altura del terreno [m]

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \dot{\sigma} \frac{\partial \phi}{\partial \sigma}$$

$F(\phi)$  = filtrado horizontal de  $\phi$

$\overline{w' \phi'}$  = flujo vertical de  $\phi$

$f$  = es el parámetro de la fuerza de Coriolis que es función de la latitud [1/s]

$u_s, v_s, \theta_{vs}$  = vientos sinópticos a gran escala y temperatura potencial virtual

$N_s = 1/24 * 3600$

$T$  = temperatura [K]

$g$  = constante gravitacional [m/s]

$$S_{\theta_v} = \frac{\theta_v}{T} \left( \frac{\partial T}{\partial t} \right)_R - \frac{\lambda}{c_p} S_{qv} \quad (3.7)$$

$\lambda$  = calor latente de vaporización [J/kg]

$c_p$  = calor específico a presión constante [J/kgK]

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \left( \frac{\sigma - z_T}{z_T - z_s} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial y} = \left( \frac{\sigma - z_T}{z_T - z_s} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial z} = \left( \frac{\sigma - z_T}{z_T - z_s} \right) \frac{\partial z_s}{\partial z} \quad (3.10)$$

## Turbulencia y difusión

El problema de “cerradura” de las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento a través del modelado de la turbulencia se aborda con las ecuaciones promediadas y utiliza una aproximación de gradiente de difusión, el cual depende en el coeficiente de difusión  $K$  y los gradientes de las variables promedio. Utilizando notación tensorial, los flujos son

$$\overline{u'_i u'_j} = \frac{2}{3} E \delta_{ij} - K \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.11)$$

$$\overline{u'_i \theta'_v} = -K \left( \frac{\partial \theta_v}{\partial x_i} - \gamma_{\theta_v} \right) \quad (3.12)$$

$$\overline{u'_i \phi'} = -2,5K \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (3.13)$$

en donde  $\gamma_{\theta_v} = 0,00065$  [K/m] y  $\phi$  representa un escalar cualquiera. El coeficiente de 2.5 utilizado en la ecuación 3.13 está basado en un análisis de cierre de segundo orden[5][22].

El esquema de turbulencia utilizado para calcular K es el modelo estándar  $k - \varepsilon$  en coordenadas que siguen al terreno, con constantes para la ecuación de tasa de disipación viscosa derivada del análisis de Duynkerke (1988). El modelo resuelve ecuaciones de pronóstico para la energía cinética turbulenta  $k$  y la tasa de disipación viscosa  $\varepsilon$

$$\frac{dk}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K \frac{\partial k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K \frac{\partial k}{\partial y} \right) + \left( \frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( K \frac{\partial k}{\partial \sigma} \right) + P_s + P_b - \varepsilon \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon}{dt} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( K \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \right) + \left( \frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( c_{\varepsilon 0} K \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} \right) + \dots \\ &+ \frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon 1} \max(P_s, P - s + P_b) - c_{\varepsilon 2} \varepsilon) \end{aligned} \quad (3.15)$$

en donde

$$\begin{aligned} P_s &= 2K \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial w}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \right] + \dots \\ &+ K \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)^2 \right] + \dots \\ &+ K \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$P_b = -\frac{g}{\theta_v} K \left( \frac{\partial \theta_v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} - \gamma_{\theta_v} \right) \quad (3.17)$$

con

$$w = \left( \frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^{-1} \left( \dot{\sigma} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} - v \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned}
K &= c_m \frac{k^2}{\varepsilon} \\
c_m &= 0,09 \\
c_{\varepsilon 0} &= 0,69 \\
c_{\varepsilon 1} &= 1,46 \\
c_{\varepsilon 2} &= 1,83
\end{aligned}$$

### 3.2.2. Módulo de dispersión

Este modulo utiliza la meteorología y turbulencia pronosticada del módulo meteorológico y consta de cuatro módulos. El módulo Euleriano, que resuelve las ecuaciones de pronóstico para concentraciones y para correlaciones cruzadas de concentración y temperatura potencial virtual. El módulo Lagrangiano de partículas, que puede ser utilizado para representar la dispersión de fuentes cercanas con mayor precisión. El módulo de levantamiento de pluma es utilizado para tomar en cuenta la cantidad de movimiento de la pluma, así como efectos de flotación de las plumas de emisión. El módulo de estelas para edificios, que permite al módulo de levantamiento de pluma en modo Euleriano o Lagrangiano incluir los efectos de las estelas de los edificios. Opcionalmente, este módulo también incluye reacciones fotoquímicas para fases gaseosas y reacciones químicas para fases acuosas y gaseosas, principalmente para modelar las reacciones de bióxido de azufre y partículas. Efectos de deposición húmeda y seca también son incluidas.

A continuación solo se describen sólo el módulo Euleriano ya que fue el utilizado en la simulación. Para los restantes módulos basta decir que utilizan parametrizaciones que toman en cuenta la temperatura de la pluma, velocidad del viento, turbulencia del aire, tipo de terreno, dimensiones de los edificios, sus orientaciones, etc.

#### Módulo Euleriano

La ecuación de pronóstico para la concentración  $\chi$  es similar a la utilizada para la temperatura virtual potencial, incluye advección, difusión y términos fuente y sumidero.

$$\frac{d\chi}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_\chi \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_\chi \frac{\partial \chi}{\partial y} \right) - \left( \frac{\partial \sigma}{\partial z} \right) \frac{\partial}{\partial \sigma} (\overline{w'\chi'}) + S_\chi + R_\chi \quad (3.19)$$

la expresión para el flujo vertical de la concentración de los trazadores incluye flujos de contragradiante que a continuación se muestran

$$\overline{w'\chi'} = -K_\chi \frac{\partial \chi}{\partial \sigma} + \frac{1 - c_{\chi^3}}{c_{\chi^1}} \frac{k}{\varepsilon} \frac{g}{\theta_v} \overline{\theta'_v \chi'} \quad (3.20)$$

con

$$\frac{\overline{\theta'_v \chi'}}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_\chi \frac{\partial \overline{\theta'_v \chi'}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_\chi \frac{\partial \overline{\theta'_v \chi'}}{\partial y} \right) + \left( \frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( K_\chi \frac{\partial \overline{\theta'_v \chi'}}{\partial \sigma} \right) + (K + K_\chi) \cdot$$

$$\cdot \left[ \left( \frac{\partial \theta_v}{\partial x} + \frac{\partial \theta_v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial \chi}{\partial x} + \frac{\partial \chi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) + \left( \frac{\partial \theta_v}{\partial y} + \frac{\partial \theta_v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \left( \frac{\partial \chi}{\partial y} + \frac{\partial \chi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \right] \\ - \overline{w' \theta'_v} \frac{\partial \chi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} - \overline{w' \chi'} \frac{\partial \theta_v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} - \frac{2}{c_\chi} \frac{\varepsilon}{k} \overline{\theta'_v \chi'} \quad (3.21)$$

con

$$c_{\chi^1} = 3,0 \\ c_{\chi^3} = 0,5 \\ c_\chi = 1,6 \\ K_\chi = 2,5K$$

Inicialmente los valores para  $\chi$  son establecidos a un valor inicial definido por el usuario. Los valores para  $\overline{w' \chi'}$  son inicializados en cero, si los flujos de contragradien- te son considerados como poco relevantes para una situación en particular entonces la solución para la ecuación 3.21 es omitida y  $\overline{\theta'_v \chi'}$  valdrá cero. Generalmente los flujos de contragradien- te son solo importantes para la difusión de contaminates en lugares cercanos a las fuentes y además sólo cuando la resolución es menor a 1 km. Para las concentraciones de contaminantes en las fronteras del la malla más grande se consideran los valores establecidos por el usuario, mientras que para las mallas interiores (anidadas) los valores de la malla superior son pasados a estas.

Dentro de este módulo existe opcionalmente un módulo para simular las reaccio- nes químicas pero en este caso no fueron consideradas.

### 3.3. ISC

El *Industrial Source Complex Short Term* es un programa avalado por la Agencia de Protección Ambiental de E.U.A. (EPA) para calcular los impactos en la calidad del aire debido a un grupo de fuentes de contaminación.

El modelo ISC calcula la dispersión de un contaminante en estado permanente, suponiendo que éste se dispersa obedeciendo a una ecuación de tipo Gaussiano. El modelo contempla una gran variedad de tipos de fuentes de emisión, con las cuales pueden modelarse las diferentes fuentes de los complejos industriales.

El uso de este modelo es apropiado para el estudio de las fuentes de emisión in- dustrial; en áreas urbanas o rurales; terreno plano; distancias de transporte menores a 50 km; dispersión de contaminantes primarios (CO, NO<sub>x</sub>, PM10, PST, SO<sub>2</sub>) y emisiones continuas de otros contaminantes que se encuentren en el aire.

El modelo incorpora los algoritmos de dispersión para receptores en terreno com- plejo donde la elevación del receptor está por encima de la elevación de la fuente. Además, contiene un algoritmo para modelar los efectos de la eliminación de gases o partículas por precipitación húmeda o por mecanismos secos.

Para el cálculo, el modelo requiere de información meteorológica horaria, la cual considera constante y uniforme en todo el dominio de cálculo, durante cada hora. Se supone que la velocidad vertical del viento es cero. Las concentraciones horarias



calculadas en los receptores provocadas por cada fuente son sumadas para obtener la concentración total. El modelo cuenta con varios tipos de algoritmos, pero para efectos de normatividad en la modelación la EPA ha determinado un conjunto que se denomina características reguladoras.

### 3.3.1. Modelo Gaussiano

La ecuación a resolver es la ecuación de la conservación de masa pero despreciando los términos difusivos

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (3.22)$$

tomando en cuenta que

$$u_j = \bar{u}_j + u'_j \quad (3.23)$$

$$C = \bar{C} + C' \quad (3.24)$$

en donde los términos  $\bar{C}$  y  $\bar{u}_j$  son los valores promedios y los términos  $u'_j$  y  $C'$  son las fluctuaciones debidas a la turbulencia. Por definición:

$$\overline{u'_j} = 0 \quad (3.25)$$

$$\overline{C'} = 0 \quad (3.26)$$

sustituyendo 3.23 y 3.24 en 3.22 y considerando que

$$\overline{u'_j C'} = -K_j \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (3.28)$$

se tiene:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( K_j \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \right) \quad (3.29)$$

La solución a esta ecuación para un punto de emisión a una determinada altura H es

$$\bar{C} = \frac{Q_m}{4\pi x \sqrt{K_y K_x}} \exp \left[ -\frac{uy^2}{4K_y x} \right] \times \left\{ \exp \left[ -\frac{u}{4K_z x} (z - H)^2 \right] + \exp \left[ -\frac{u}{4K_z x} (z + H)^2 \right] \right\} \quad (3.30)$$

el coeficiente de difusión turbulenta  $K_j$  depende tanto de la posición, tiempo, velocidad del viento y las condiciones del tiempo en general. Sutton resolvió este problema proponiendo la siguiente definición

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{2} \bar{C}^2 (ut)^{2-n} \quad (3.31)$$

Cuadro 3.1: Ecuaciones recomendadas para los coeficientes de dispersión  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  [15].

Estabilidad	$\sigma_y$ m	$\sigma_z$ m
Rural		
A	$0.22x(1+0.0001x)^{-1/2}$	$0.20x$
B	$0.16x(1+0.0001x)^{-1/2}$	$0.12x$
C	$0.11x(1+0.0001x)^{-1/2}$	$0.08x(1+0.0002x)^{-1/2}$
D	$0.08x(1+0.0001x)^{-1/2}$	$0.06x(1+0.0015x)^{-1/2}$
E	$0.06x(1+0.0001x)^{-1/2}$	$0.03x(1+0.0003x)^{-1}$
F	$0.04x(1+0.0001x)^{-1/2}$	$0.016x(1+0.0003x)^{-1}$
Urbana		
A	$0.32x(1+0.0004x)^{-1/2}$	$0.24x(1+0.0001x)^{+1/2}$
B	$0.32x(1+0.0004x)^{-1/2}$	$0.24x(1+0.0001x)^{+1/2}$
C	$0.22x(1+0.0004x)^{-1/2}$	$0.20x$
D	$0.16x(1+0.0004x)^{-1/2}$	$0.14x(1+0.0003x)^{-1/2}$
E	$0.11x(1+0.0004x)^{-1/2}$	$0.08x(1+0.0015x)^{-1/2}$
F	$0.11x(1+0.0004x)^{-1/2}$	$0.08x(1+0.0015x)^{-1/2}$

Cuadro 3.2: Estabilidades Pasquill-Gifford.

Viento (m/s)	Día			Noche	
	Insolación			Nubosidad	
	Fuerte	Moderada	Débil	$> 1/2$	$\leq 3/8$
$<2$	A	A-B	B	F	F
2-3	A-B	B	C	E	F
3-4	B	B-C	C	D	E
4-6	C	C-D	D	D	D
$>6$	C	D	D	D	D

con expresiones similares para  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$ . Sustituyendo 3.31 en la ecuación 3.30 queda

$$\bar{C} = \frac{\dot{Q}}{2\pi\sigma_y\sigma_z u} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] \times \left\{ \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\} \quad (3.32)$$

Estos coeficientes de dispersión representan las desviaciones estándar de la concentración sobre los ejes coordenados. Los valores para dichos coeficientes son más fáciles de obtener experimentalmente que los coeficientes de difusión turbulenta  $K_j$ . Estos coeficientes de dispersión son función de las condiciones atmosféricas y de la distancia aguas abajo del punto de emisión. Las condiciones atmosféricas son clasificadas en seis clases diferentes mostradas en la tabla 3.2 (A-extremadamente inestable, B-moderadamente inestable, C-ligeramente inestable, D-neutral, E-ligeramente estable, F-moderadamente estable) y el cálculo de los coeficientes de dispersión  $\sigma$  pueden ser calculados con los datos de la tabla 3.1.

# Capítulo 4

## Resultados

A continuación se presentan los resultados de las simulaciones hechas en TAPM e ISC. Los datos de las fuentes de emisión para ambas simulaciones fueron obtenidas del estudio *Estudio de Dispersión de Contaminantes a la Atmósfera de la Central Termoeléctrica Presidente Plutarco Elías Calles* y se resumen en la tabla 4.1. La simulación para el programa TAPM fue realizada para el año 2002 debido a que sólo se disponen las bases de datos de meteorología a partir de ese año. Los datos meteorológicos necesarios para correr el programa ISC fueron obtenidos del programa TAPM ya que, como se mencionó anteriormente, este los calcula para cualquier punto en el dominio de calculo. De esta forma se pretende que los datos meteorológicos coincidan al menos en el punto en donde las emisiones son liberadas al ambiente.

Los resultados comprenden gráficas de concentraciones promedio anuales para cada contaminante (PST, NO<sub>x</sub> y SO<sub>2</sub>) así como el valor más alto para los promedios de una o veinticuatro horas según sea el caso.

### 4.1. Breve descripción de la CTPPEC

Ubicada en el municipio La Unión, Guerrero, en la localidad de Petacalco, en la costa del océano pacífico, a 15 km de Lázaro Cárdenas, Michoacán (figura 4.2). La Central se localiza a aproximadamente 7 km del puerto de descarga y a 5 km de los patios de almacenamiento de carbón, la capacidad de estos patios es de 1'920,000

Cuadro 4.1: Geometría de chimeneas y características de las emisiones de la CTPPEC[4].

Unidad	Altura de chimenea	Diámetro	Tasa de emisión	Tasa de emisión	Tasa de emisión	Velocidad de los gases	Temperatura de salida
	[m]	[m]	NO <sub>x</sub> [g/s]	SO <sub>2</sub> [g/s]	PST [g/s]	[m/s]	[°K]
1	120	6	81.56	1,096	97.12	19	432
2	120	6	85.76	1,342	104.42	19	432
3	120	6	94.60	1,388	94.49	19	432
4	120	6	82.00	1,278	99.00	19	432
5	120	6	75.40	1,334	91.15	19	432
6	120	6	86.12	1,240	91.04	19	432



Figura 4.1: Vista de la Central Termoeléctrica Presidente Plutarco Elías Calles.

toneladas de carbón. El combustóleo se almacena en 4 tanques con capacidad de  $34,600 \text{ m}^3$  cada uno (figura 4.1).

La C.T. de Petacalco es una de las dos únicas centrales carboeléctricas de México (la otra es la de Río Escondido en Coahuila) que utiliza carbón como combustible primario carbón para producir vapor de alta presión ( entre  $120$  y  $170 \text{ kg/cm}^2$  ) y alta temperatura ( del orden de  $520^\circ\text{C}$  ), el cual se conduce hasta las aspas o álabes de una turbina de vapor, haciéndola girar y al mismo tiempo hace girar el generador eléctrico que esta acoplado al rotor de la turbina de vapor. Se fundamenta en el mismo principio que la tecnología conocida como Termoeléctrica de Tipo Vapor, que emplea combustóleo, gas o diesel como combustible, para hacer girar los generadores eléctricos, el único cambio importante es que las cenizas de los residuos de la combustión, requieren de varias maniobras y espacios muy grandes para su manejo y confinamiento.

La Central utiliza como combustible principal carbón importado, el cual es transportado en barcos graneleros con capacidad de hasta  $150\,000$  Toneladas de Peso Muerto. También se utiliza combustóleo pesado como combustible alternativo y diesel para los arranques. Estos últimos se descargan desde buques-tanque de  $50,000$  Toneladas de Peso Muerto de capacidad. Debido a que estas unidades generadoras cuentan con quemadores de combustible diseñados para poder quemar carbón y también combustóleo, se le denomina Central “Dual”.

En las instalaciones de esta Central se cuenta con seis unidades generadoras

## 4.2. BREVE RESUMEN DE LAS NORMAS RELEVANTES PARA ESTE ESTUDIO<sup>35</sup>



Figura 4.2: Imagen satelital de la zona de estudio.

Carboeléctricas, en operación con una capacidad nominal de 350 MW cada una, haciendo una capacidad instalada total de 2,100 MW. Las fechas de entrada en operación comercial de sus unidades generadoras son las siguientes: U-1, noviembre 8 de 1993; U-2, diciembre 14 de 1993; U-3, octubre 16 de 1993; U-4, diciembre 21 de 1993; U-5, julio 27 de 1994 y U-6, noviembre 16 de 1994.

## 4.2. Breve resumen de las normas relevantes para este estudio

A continuación se describen las normas medio ambientales de relevancia para este estudio. En la tabla 4.2 se presenta un resumen de ellas.

- Norma Oficial Mexicana NOM-023-SSA1-1993. Criterio para evaluar la calidad del aire ambiente con respecto al bióxido de nitrógeno  $\text{NO}_2$ . La concentración de bióxido de nitrógeno, como contaminante atmosférico, no debe rebasar el límite máximo normado de  $0.21 \text{ ppm}^1$  o lo que es equivalente a  $395 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , en una hora una vez al año[2].

<sup>1</sup>Todas las conversiones de ppm a  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  se hicieron considerando condiciones atmosféricas estándar

Cuadro 4.2: Resumen de normas ambientales a considerar.

Norma	$\Delta t$ del promedio [h]	Límite máximo promedio [ $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ]	Limite máximo promedio anual [ $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ]
PST	24	260	75
NO <sub>2</sub>	1	395	-
SO <sub>2</sub>	24	341	79

- Norma Oficial Mexicana NOM-022-SSA1-1993. Criterio para evaluar la calidad del aire ambiente con respecto al bióxido de azufre SO<sub>2</sub>. La concentración de bióxido de azufre como contaminante atmosférico no debe rebasar el límite máximo normado de 0.13 ppm o lo que es equivalente a 341  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , en 24 horas una vez al año y 0.03 ppm (79  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) en una media aritmética anual[1].
- Norma Oficial Mexicana NOM-024-SSA1-1993. Criterio para evaluar la calidad del aire ambiente con respecto a partículas suspendidas totales (PST). La concentración de partículas suspendidas totales como contaminante atmosférico, no debe rebasar el limite máximo permisible de 260  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , en 24 horas, en un periodo de un año y 75  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  en una media aritmética anual[3].

### 4.3. Resultados de la simulación en TAPM

Para simplificar el manejo de los resultados del programa TAPM, el año se dividió en cuatro partes. Dichas partes corresponden a los periodos Enero-Marzo, Abril-Junio, Julio-Septiembre y Octubre-Diciembre.

El dominio se centró en las coordenadas geográficas 17°59' Norte y 102°7' Oeste, las cuales son las coordenadas de la central termoeléctrica. La malla superior tiene un espaciamiento entre elementos de  $dx=dy=10\,000\text{m}$ . Dentro de esta se anidaron tres mallas más (el centro de la malla superior coincide con el centro de las mallas interiores); la primera de ellas tiene un  $dx=dy=5\,000\text{m}$ , le sigue una de  $dx=dy=2\,500\text{m}$  y finalmente una de  $dx=dy=1\,000\text{m}$ . Todas ellas con 40 x 40 elementos en sentido horizontal y con 20 elementos en sentido vertical (10, 50, 100, 150, 200, 300, 400, 500, 750, 1000, 1250, 1500, 2000, 2500, 3000, 4000, 5000, 6000, 7000 y 8000 m sobre el nivel del suelo). Los resultados que aquí se presentan corresponden a la malla de  $dx=dy=1\,000\text{m}$ .

En la configuración del módulo de meteorología se consideró solo la presión hidrostática, se tomó en cuenta el tipo de suelo y se pronosticó la tasa de disipación viscosa. En la configuración del módulo de dispersión de contaminantes se trabajó con el sistema de referencia Euleriano y no se consideraron reacciones fotoquímicas.

### Resultados meteorológicos para Petacalco

Del módulo de meteorología del TAPM se extrajeron datos meteorológicos para el sitio de Petacalco para el año 2002. A continuación se hace un breve análisis de

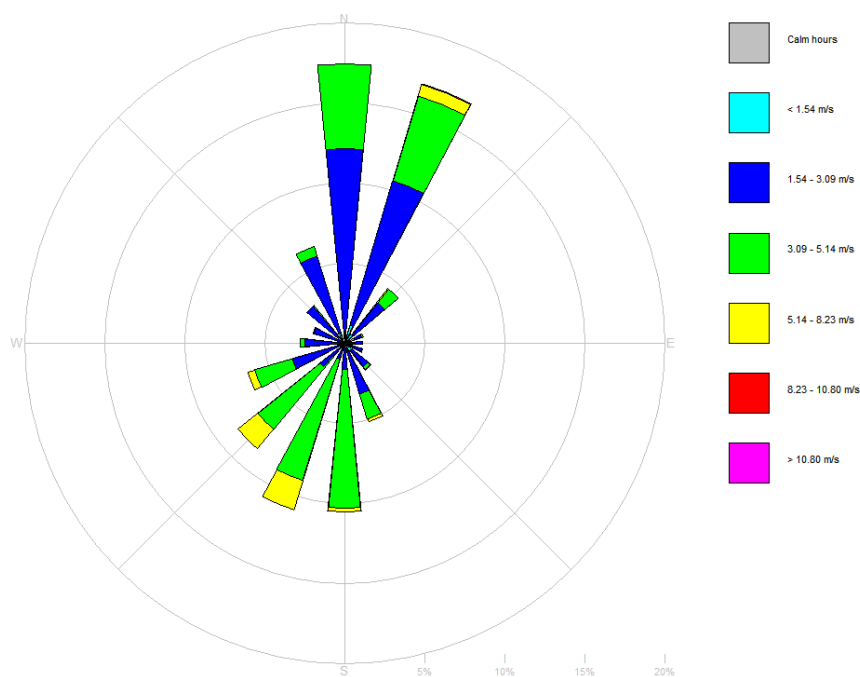


Figura 4.3: Rosa de los vientos en Petacalco para el año 2002.

estos para entender mejor las condiciones meteorológicas y poder anticipar de cierta forma los resultados de dispersión de contaminantes tanto para el TAPM y el ISC.

Los vientos dominantes vienen de las direcciones N y NNE (figura 4.3). En promedio para todo el año, dichos datos muestran que en el periodo de 1:00 a 6:00 horas los vientos vienen del Norte, en el periodo de las 7:00 a las 10:00 horas giran para orientarse al Sur<sup>2</sup> (en el que permanecen de las 11:00 a 12:00 horas), aunque no puede establecerse con precisión en que hora se encuentran en el Este. En el periodo de las 13:00 a 19:00 horas giran para colocarse al Oeste, a las 20:00 horas provienen del Oeste y de 21:00 a 24:00 horas giran para colocarse de nuevo al Norte.

En el periodo de 19:00 a 8:00 horas la capa de mezclado permanece por debajo de los 120 m, su valor mínimo promedio de 72 m lo alcanza a las 4:00 horas. En el periodo de 9:00 a 18:00 horas se encuentra por arriba de los 120 m, con un máximo promedio de 240 m que sucede a las 16:00 horas.<sup>3</sup>

La temperatura promedio más baja se encuentra a las 6:00 horas (24.2 °C) y la más alta a las 14:00 horas (30.8 °C).

<sup>2</sup>la dirección indica de donde provienen los vientos, i.e. vientos del sur son vientos que van hacia el norte.

<sup>3</sup>Se da el valor de 120 m como referencia porque esa es la altura de las chimeneas(ver tabla 4.1).

## Resultados de dispersión

- PST: Los promedios de 24 horas, así como el promedio anual, nunca pasaron de los límites establecidos por la norma. El valor máximo para los promedios de 24 horas fue de  $54 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , que representa el 20.8 % del valor máximo permitido por la norma (figura 4.4). El valor máximo para el promedio anual fue de  $14.3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , representa el 19.1 % del máximo permitido por la norma (figura 4.5). Tanto para el promedio de 24 horas (figura 4.4), como para el promedio anual (figura 4.5) puede observarse que la región con mayor nivel de concentración es la de los sitios de San Francisco y Guaricho (5 km hacia el norte de la CTPPEC).

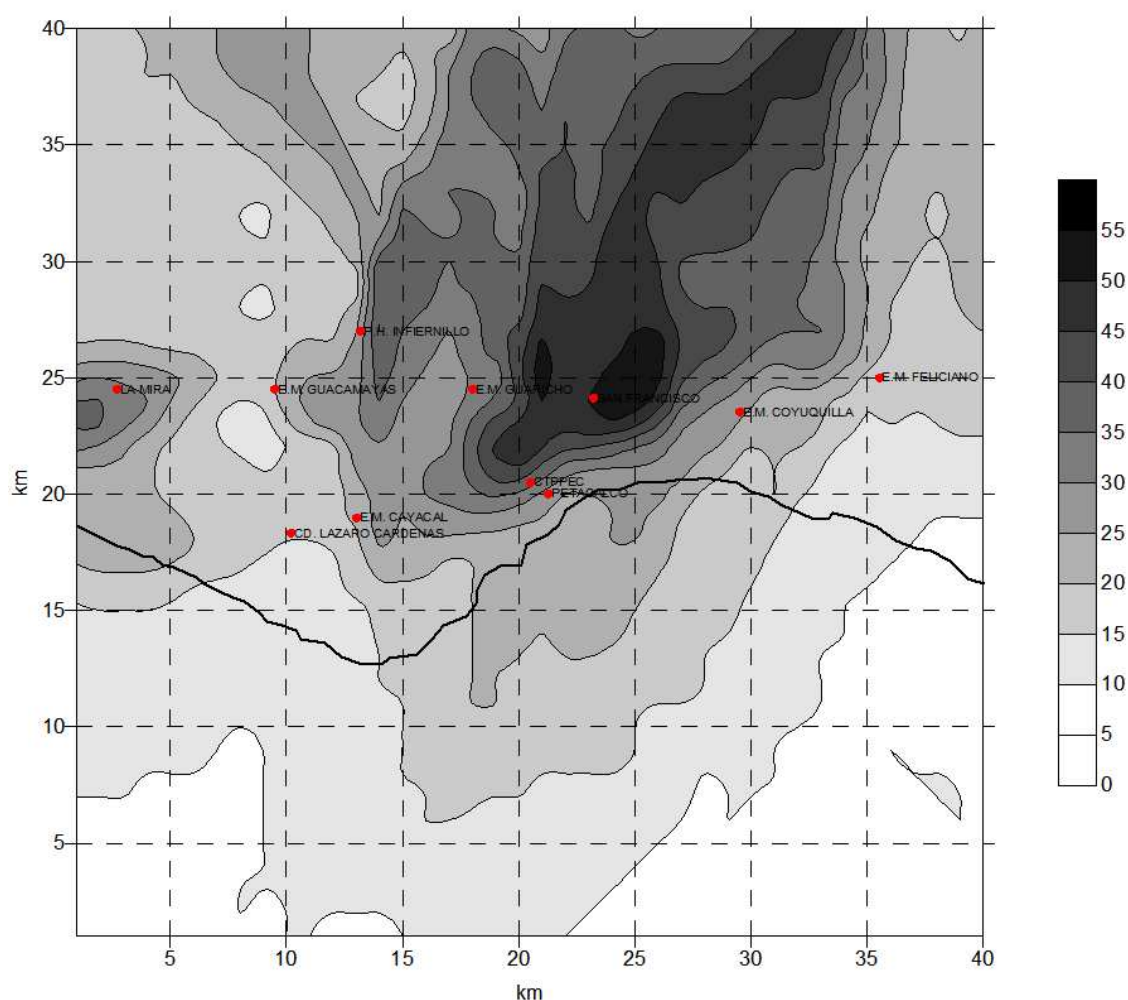


Figura 4.4: Isopletas para concentración máxima de PST en promedio de 24 hr para el año 2002 obtenida en TAPM. Valor máximo:  $54 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .



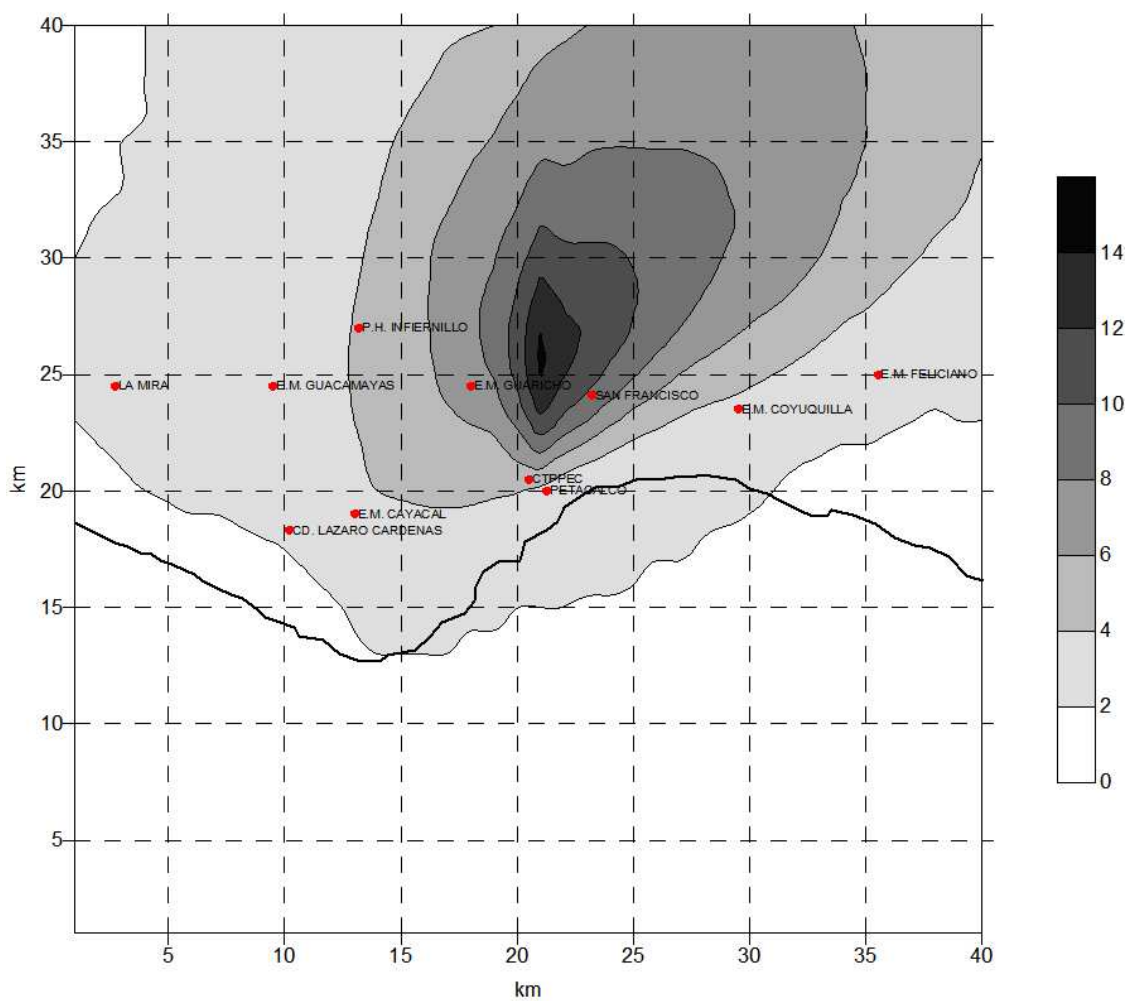


Figura 4.5: Isopletas para concentración promedio de PST para el año 2002 obtenida en TAPM. Valor máximo  $14.3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

- $\text{NO}_x$ : Se pronosticó que en solo dos ocasiones se rebasó el límite máximo promedio de una hora establecido por la norma, la zona afectada tiene un área aproximada de  $6 \text{ km}^2$  y su centro se localiza a 2 km al NO de la CTPPEC (figura 4.7). El valor máximo en el dominio de cálculo para este promedio fue de  $468 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (figura 4.6), que es superior en 18.5% al límite máximo de la norma. El valor máximo para el promedio anual fue de  $12.6 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (figura 4.8) y la zona más afectada para este promedio se encuentra a 5 km al N de la CTPPEC.

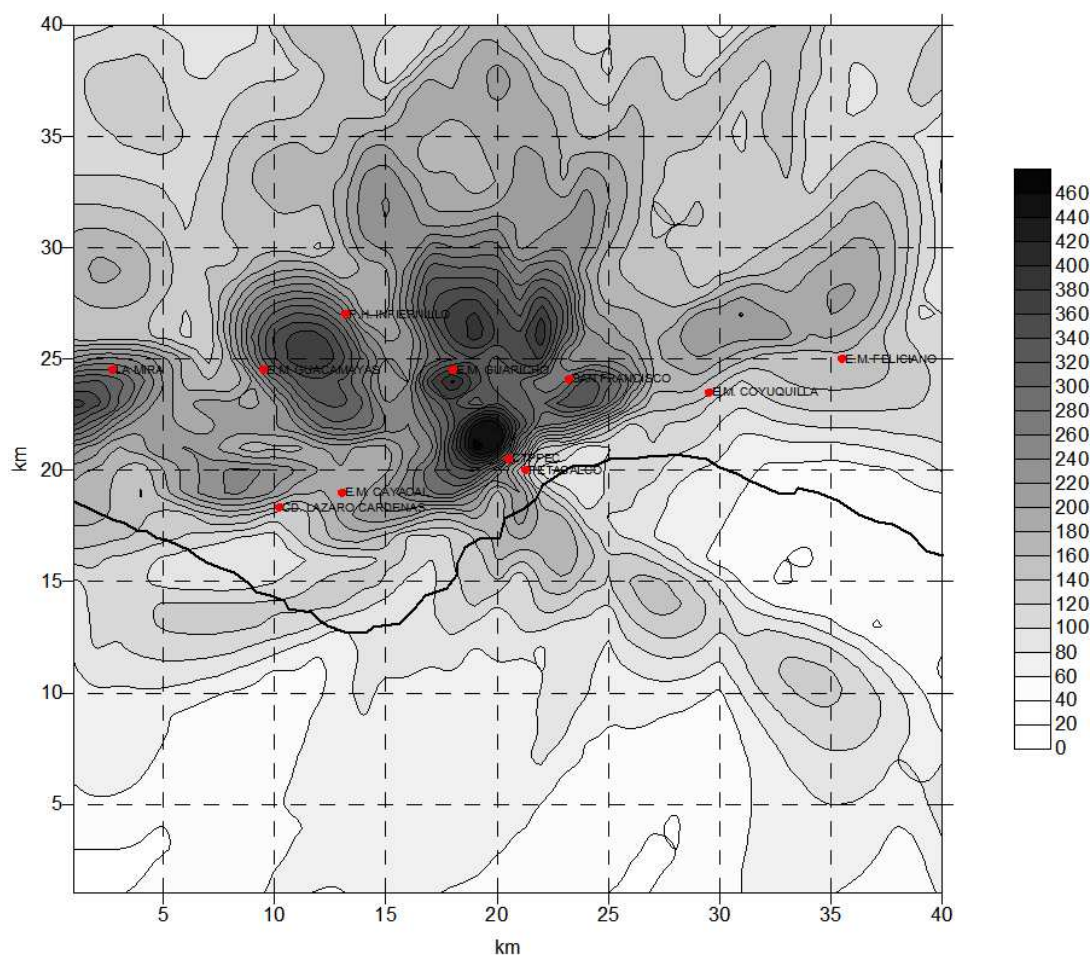


Figura 4.6: Isoplethas para concentración máxima de  $\text{NO}_x$  en promedio de 1 hora para el año 2002 obtenida en TAPM. Valor máximo  $468 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

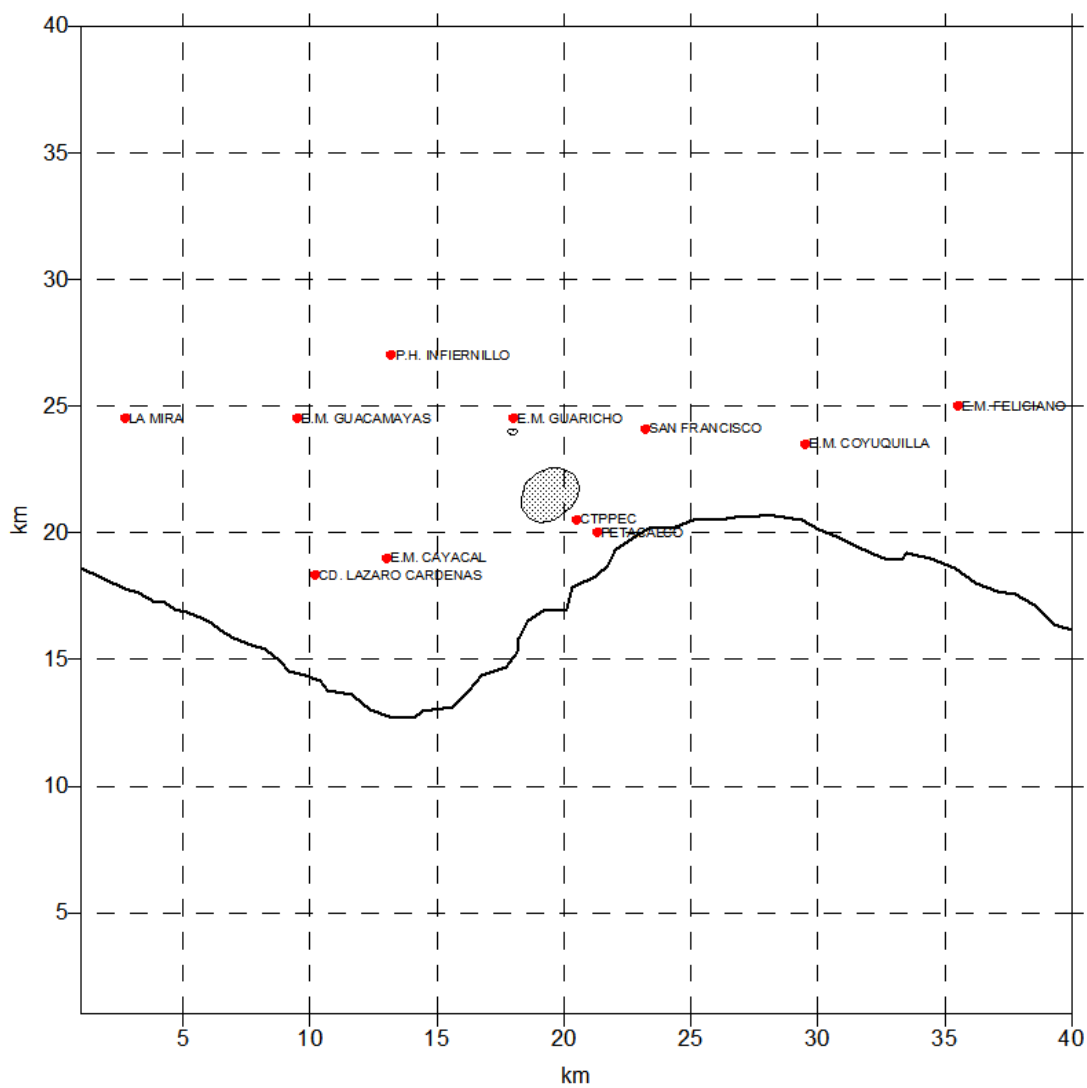


Figura 4.7: Zona en donde el nivel de  $\text{NO}_x$  rebasó a la norma en al menos una vez en el año 2002 en TAPM.

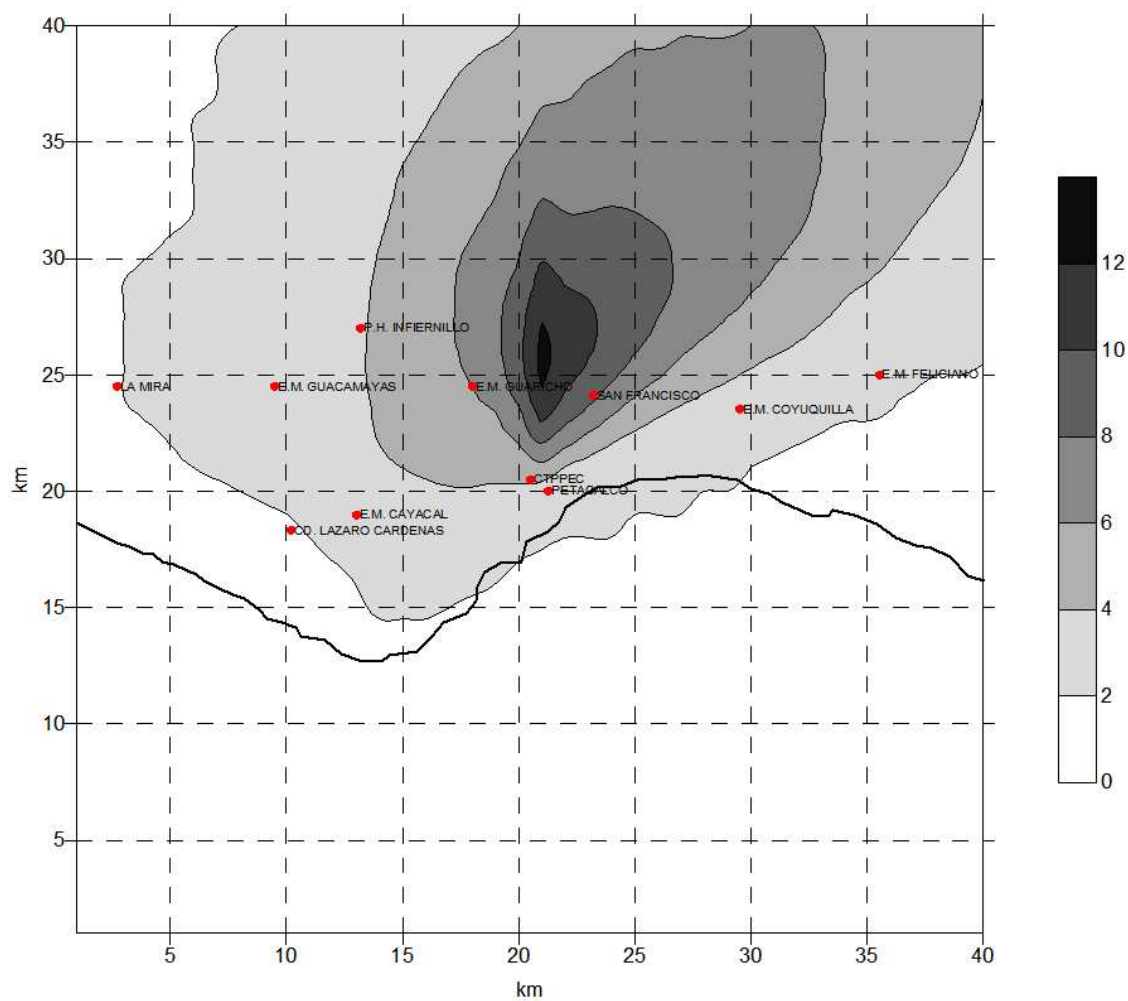


Figura 4.8: Isopletas para concentración promedio de NO<sub>x</sub> para el año 2002 obtenida en TAPM. Valor máximo 12.6 µg/m<sup>3</sup>.

- $\text{SO}_2$ : Los promedios de 24 horas y el promedio anual fueron excedidos en algunas zonas del dominio (figuras 4.10 y 4.13). El valor máximo para el promedio de 24 horas fue de  $720 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , valor que excede en 111 % al valor máximo normado (figura 4.9). La zona en donde este promedio fue rebasado en al menos una ocasión tiene un área superior<sup>4</sup> a los  $400 \text{ km}^2$  (figura 4.10) y la zona más afectada se localiza 5 km al N de la CTPPEC (figura 4.11). El valor máximo para el promedio anual fue de  $192.2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , valor que excede en 143 % al valor máximo permitido y la zona más afectada se encuentra a 5 km al N de la CTPPEC (figura 4.12). La superficie en donde se sobrepasa este valor promedio tiene una extensión ligeramente superior<sup>5</sup> a los  $250 \text{ km}^2$  (figura 4.13).

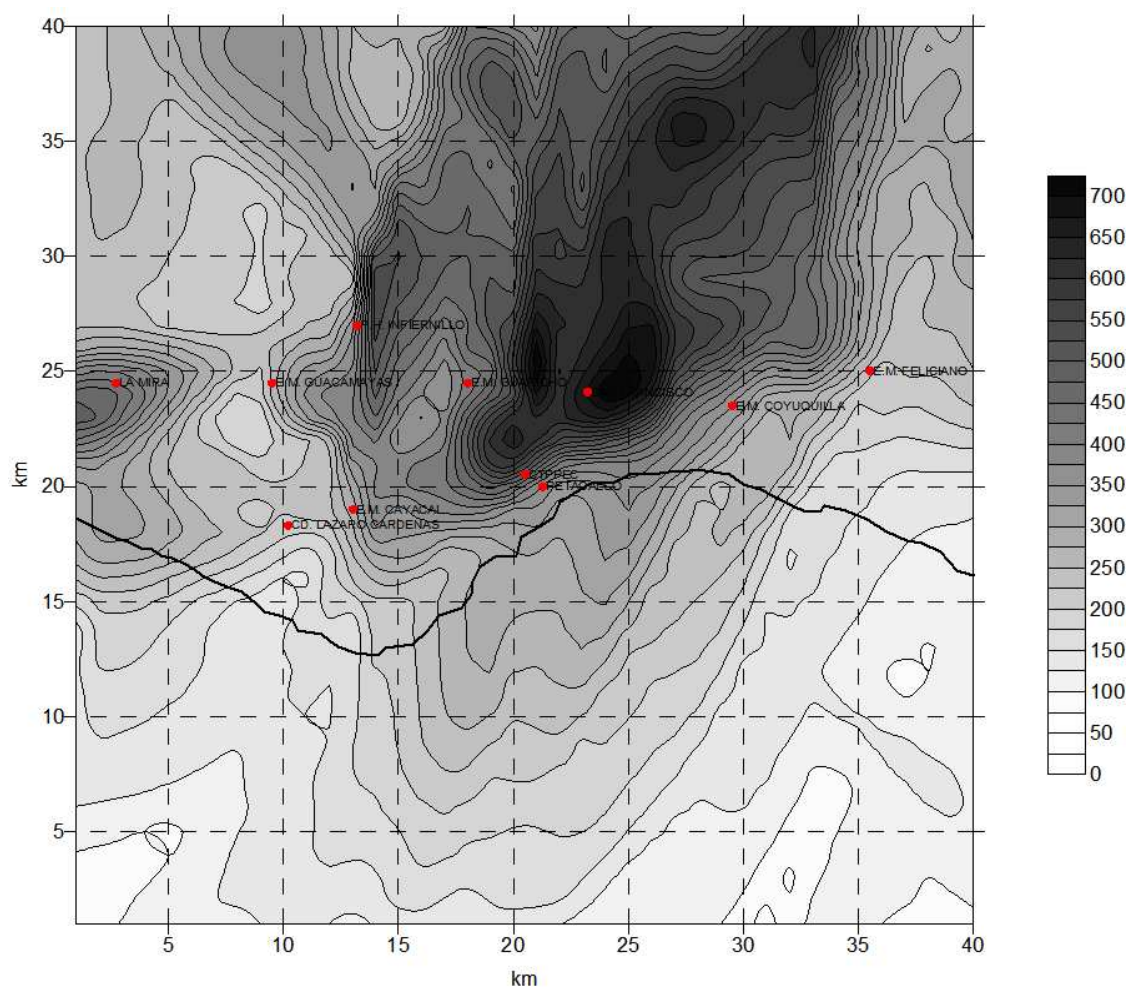


Figura 4.9: Isopletas para concentración máxima de  $\text{SO}_2$  en promedio de 24 horas para el año 2002 obtenida en TAPM. Valor máximo  $720 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

<sup>4</sup>Se menciona que es superior ya que en la figura 4.10 se puede apreciar que la zona afectada sale del dominio de  $40 \times 40 \text{ km}^2$ .

<sup>5</sup>Se menciona que es superior ya que en la figura 4.13 se puede apreciar que la zona afectada sale del dominio de  $40 \times 40 \text{ km}^2$ .

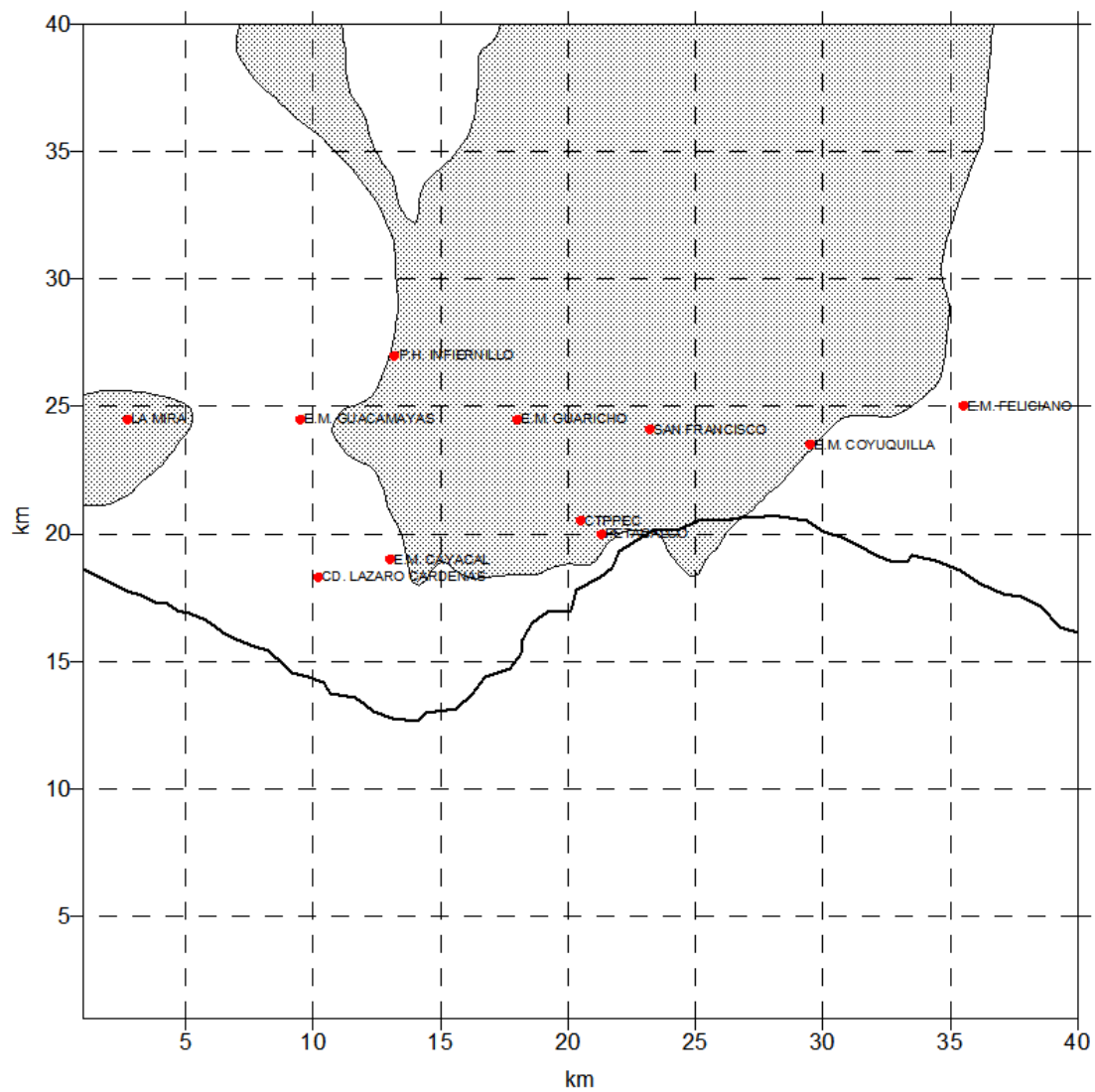


Figura 4.10: Zona en donde el nivel de  $\text{SO}_2$  rebasó a la norma en al menos una vez en el año 2002 en TAPM.



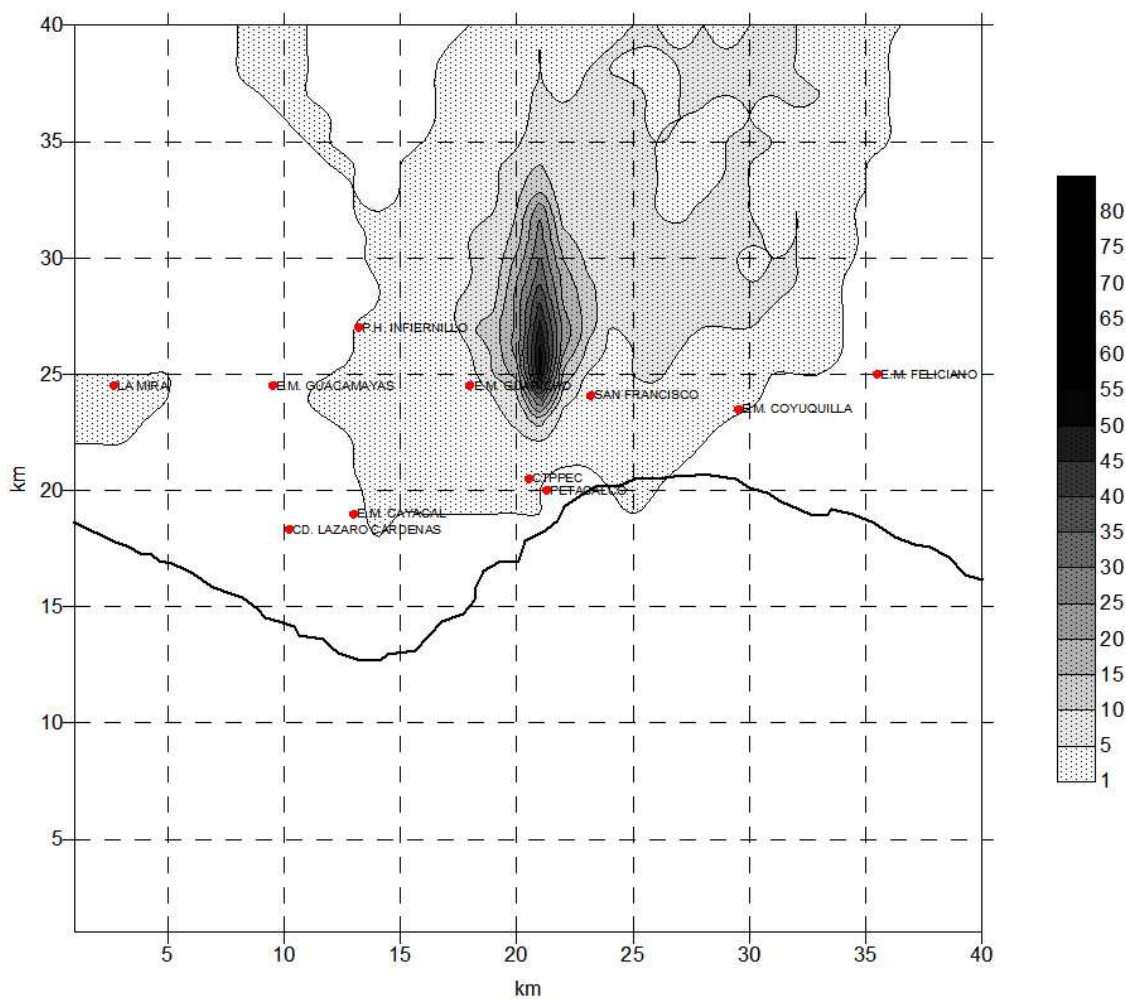


Figura 4.11: Número de veces que el promedio establecido por la norma de 24 horas para el año 2002 fue excedido para el SO<sub>2</sub> en TAPM. Valor máximo 80 ocasiones.

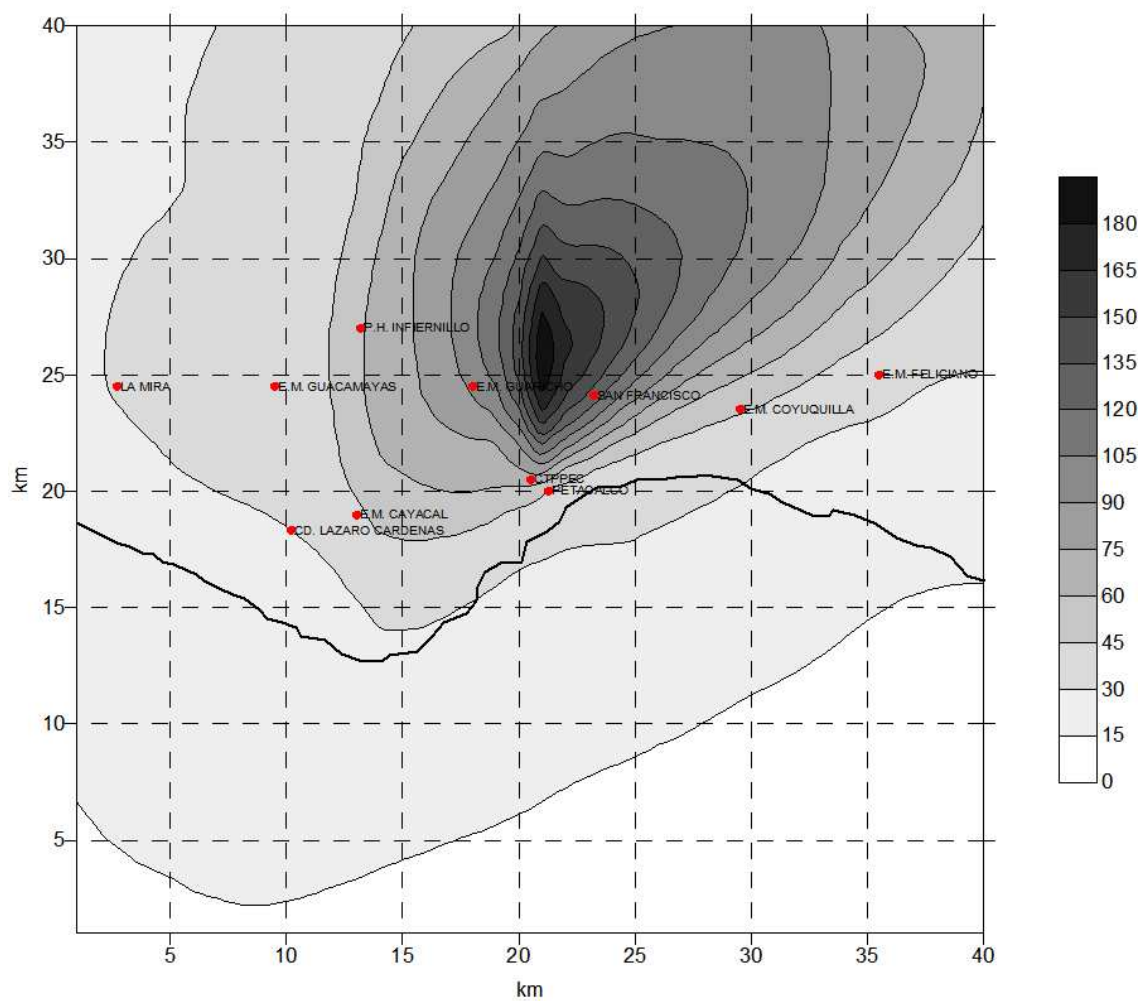


Figura 4.12: Isopletas para concentración promedio de SO<sub>2</sub> para el año 2002 obtenida en TAPM. Valor máximo 192.2 μg/m<sup>3</sup>.



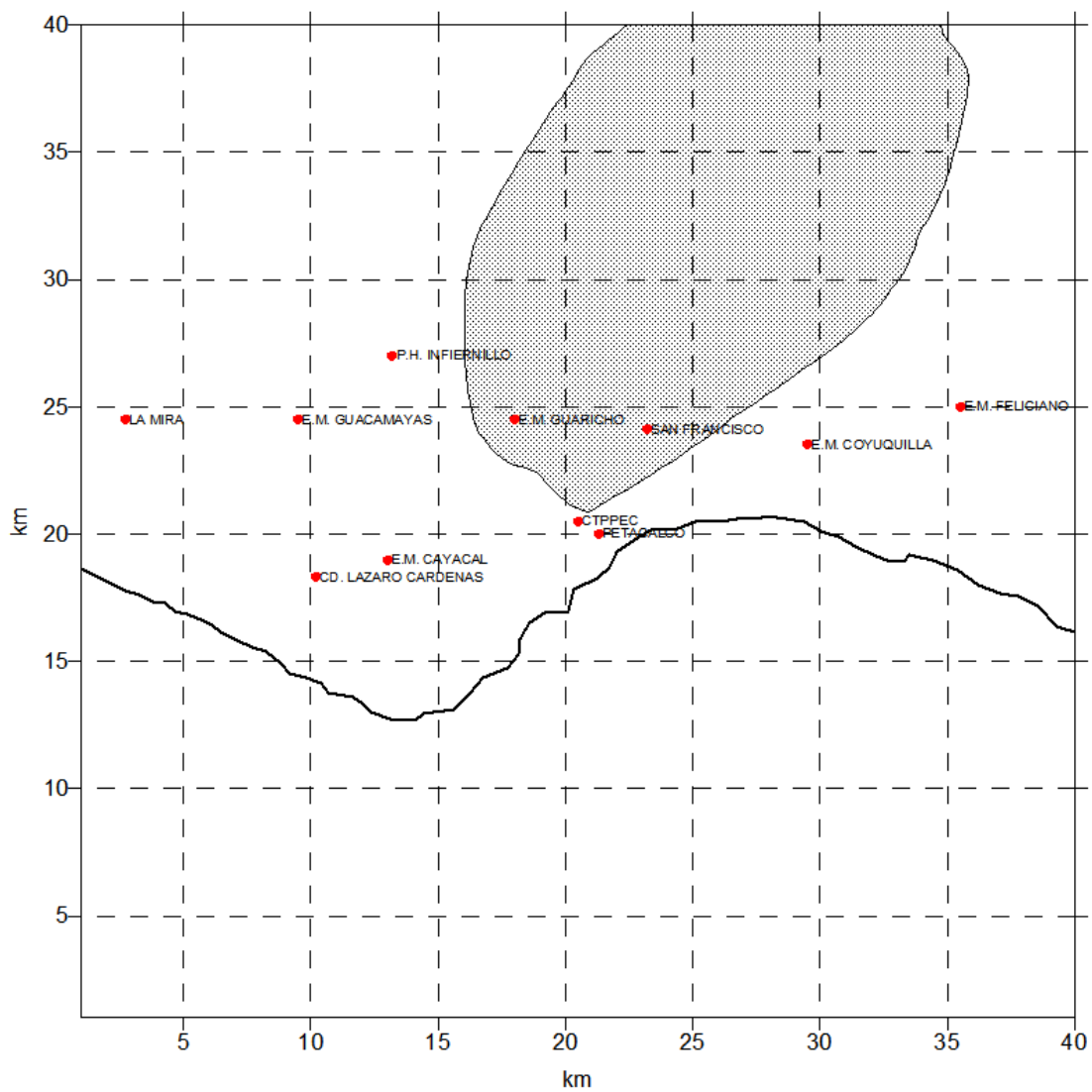


Figura 4.13: Zona en donde el nivel de  $\text{SO}_2$  promedio anual rebasó a la norma en TAPM.

#### 4.4. Resultados de la simulación en ISCST

Como se mencionó anteriormente, los datos meteorológicos requeridos por el ISC fueron obtenidos del dominio de cálculo de la simulación del programa TAPM para el sitio de la CTPPEC. Estos resultados incluyen valores horarios para la velocidad de viento, dirección, temperatura y tipo de estabilidad principalmente. Estos datos junto con los datos de los puntos de emisión (tabla 4.1) son suficientes para hacer la corrida correspondiente.

##### Resultados de dispersión

- PST: Tanto los promedios de 24 horas como el promedio anual nunca pasaron del límite establecido por la norma. El valor máximo en el dominio de cálculo para los promedios de 24 horas fue de  $32.6 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , que representa el 12.5 % del valor establecido por la norma (figura 4.14). El valor máximo para el promedio anual fue de  $0.52 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , que representa el 0.69 % del valor permitido (figura 4.15).

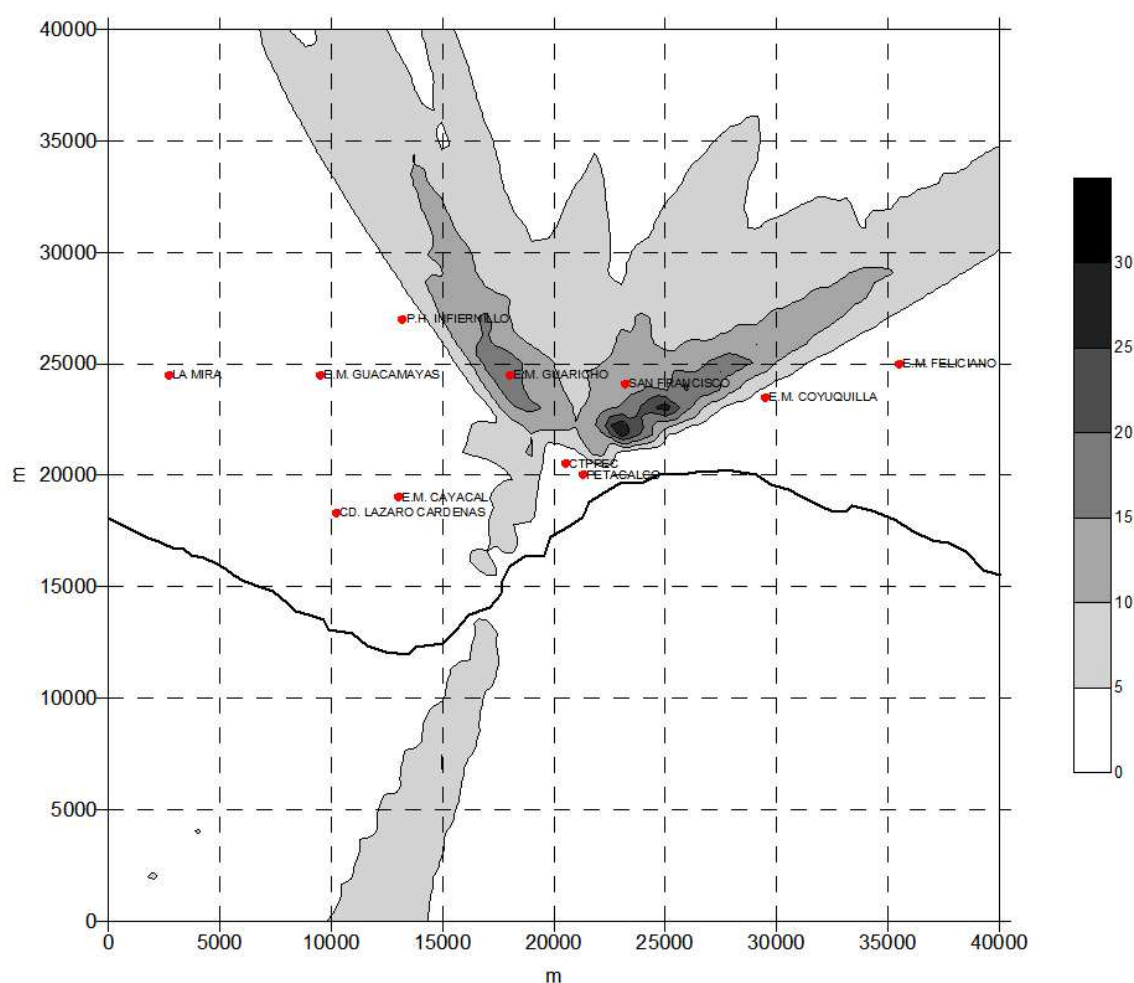


Figura 4.14: Isoplethas para concentración máxima de PST en promedio de 24 hr para el año 2002 obtenida en ISC. Valor máximo:  $32.6 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

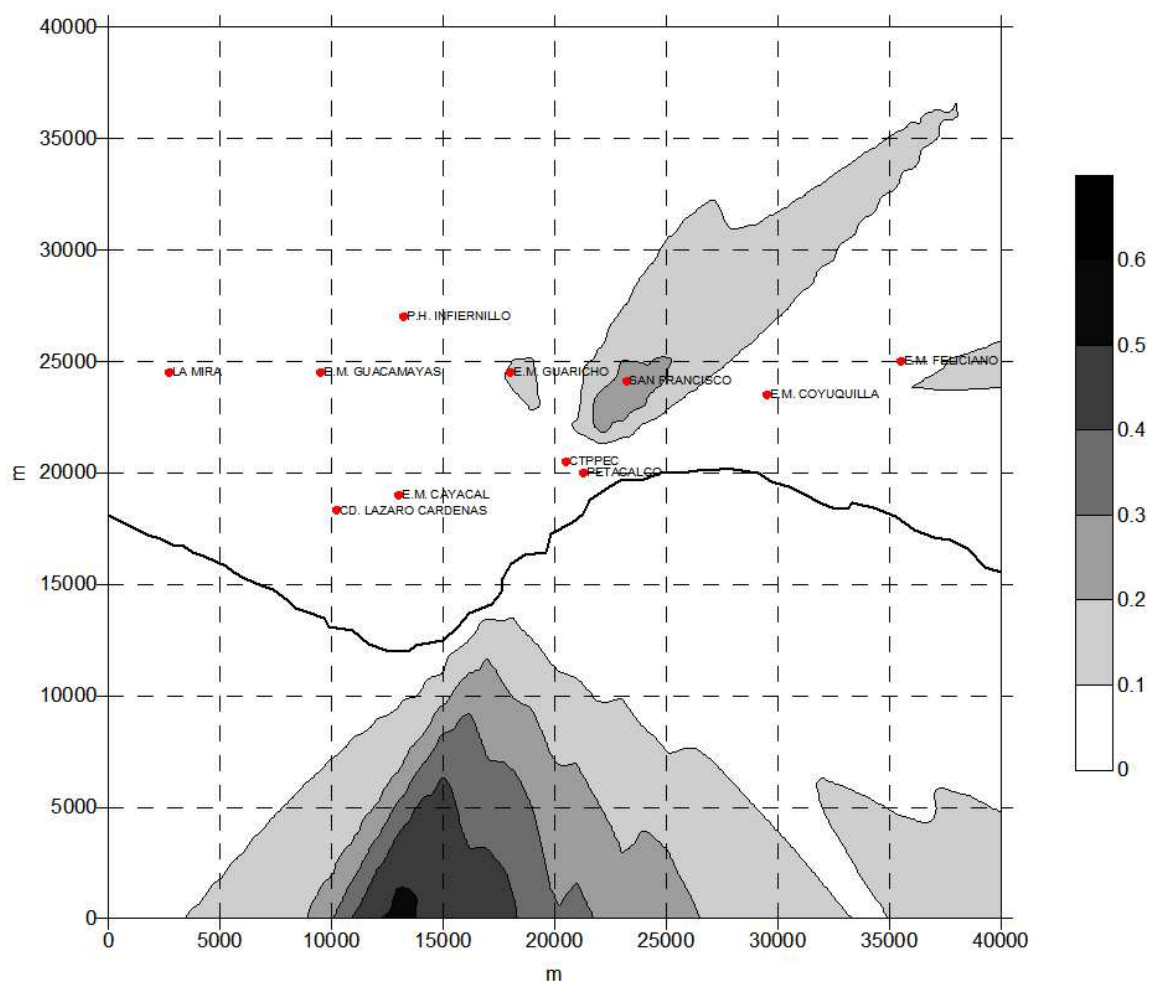


Figura 4.15: Isopletas para concentración promedio de PST para el año 2002 obtenida en ISC. Valor máximo  $0.52 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

- $\text{NO}_x$ : En ningún momento se rebasaron los límites del promedio de una hora establecido por la norma. El valor máximo en el dominio de cálculo para el promedio de 1 hora fue de  $222 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , que representa el 56.2% del valor máximo permitido por la norma (figura 4.16). El valor máximo para el promedio anual (no regulado por la norma) fue de  $0.46 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (figura 4.17).

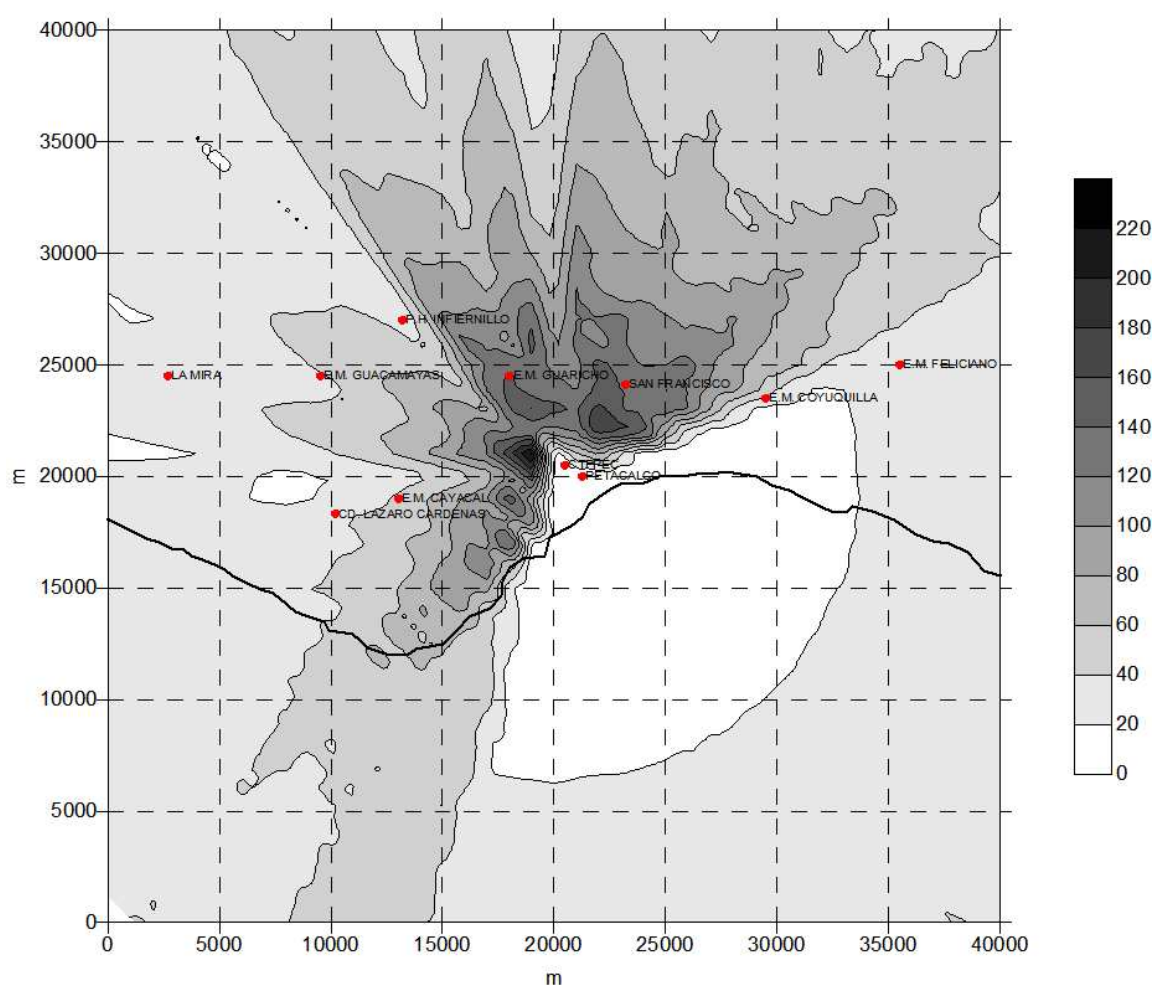


Figura 4.16: Isoplethas para concentración máxima de  $\text{NO}_x$  en promedio de 1 hora para el año 2002 obtenida en ISC. Valor máximo  $222 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

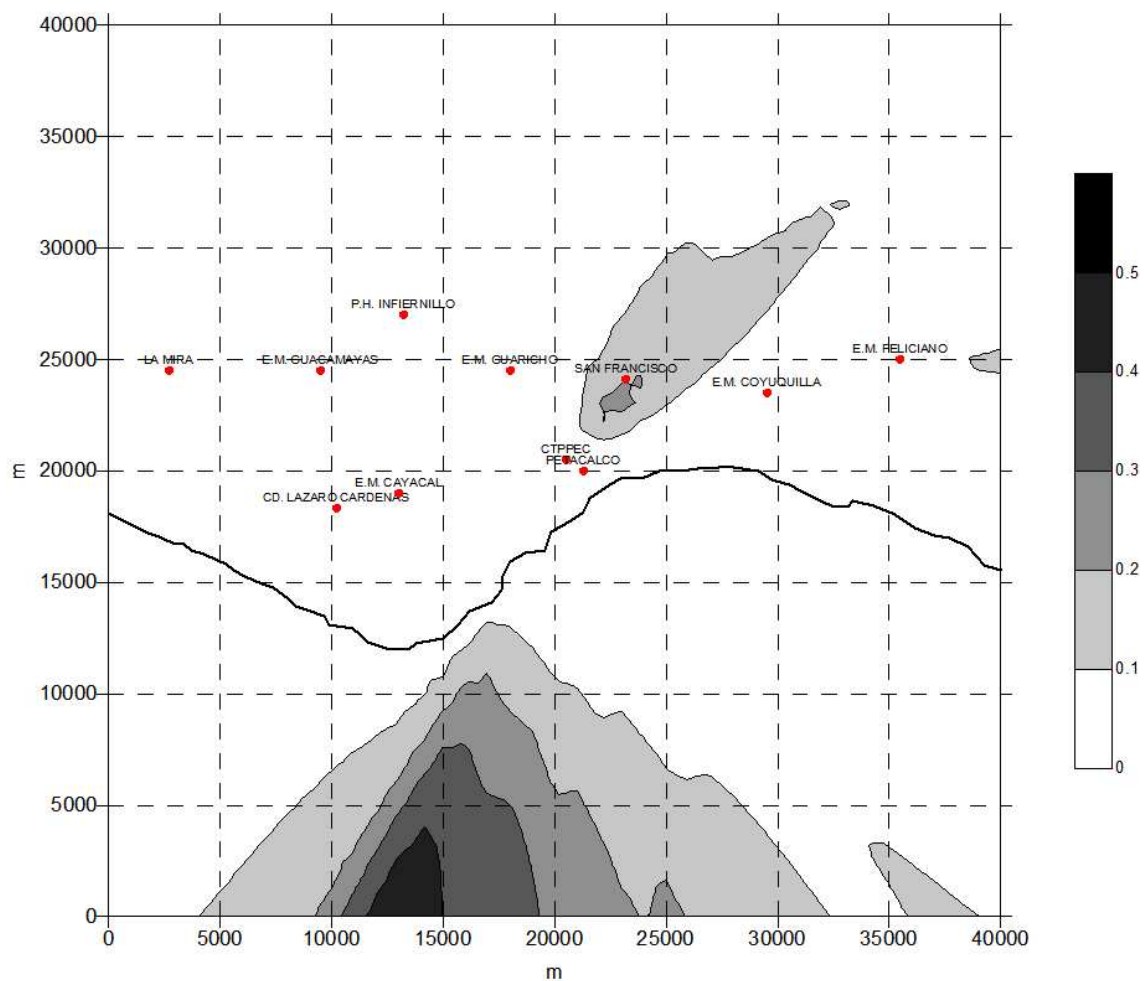


Figura 4.17: Isopletas para concentración promedio de NO<sub>x</sub> para el año 2002 obtenida en ISC. Valor máximo 0.46 μg/m<sup>3</sup>.

- $\text{SO}_2$ : Los promedios de 24 horas fueron excedidos en una sola ocasión. El valor máximo para el promedio de 24 horas fue de  $433 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , que está 27% arriba del valor de la norma (figura 4.18). La zona afectada tiene un área aproximada de  $1.6 \text{ km}^2$  y está ubicada aproximadamente a 4 km al NE del la CTPPEC (figura 4.19). El valor máximo para el promedio anual fue de  $6.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , representa el 8.7% del valor máximo permitido (figura 4.20).

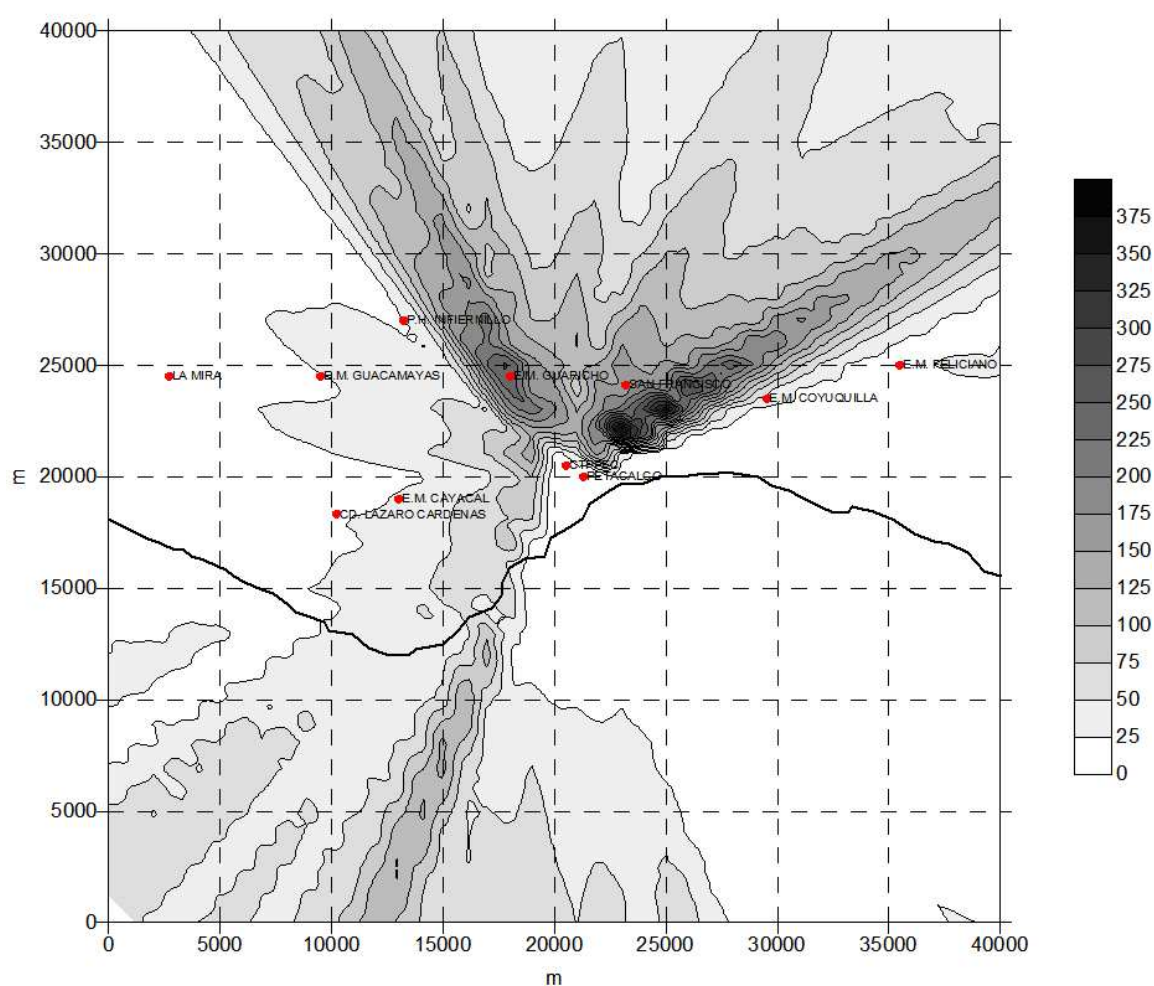


Figura 4.18: Isoplethas para concentración máxima de  $\text{SO}_2$  en promedio de 24 horas para el año 2002 obtenida en ISC. Valor máximo  $433 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

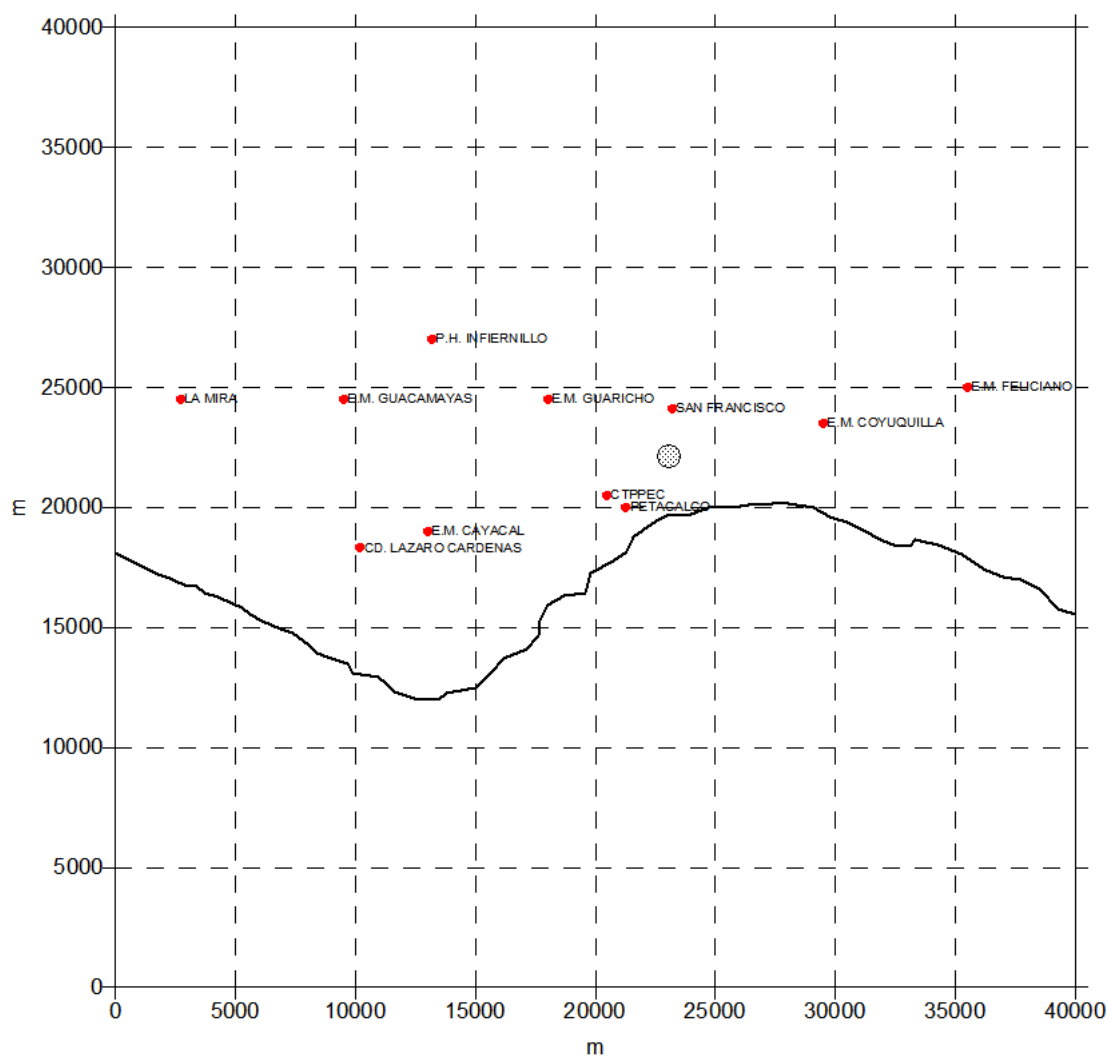


Figura 4.19: Zona en donde el nivel de  $\text{SO}_2$  rebasó a la norma en al menos una vez en el año 2002 en ISC.



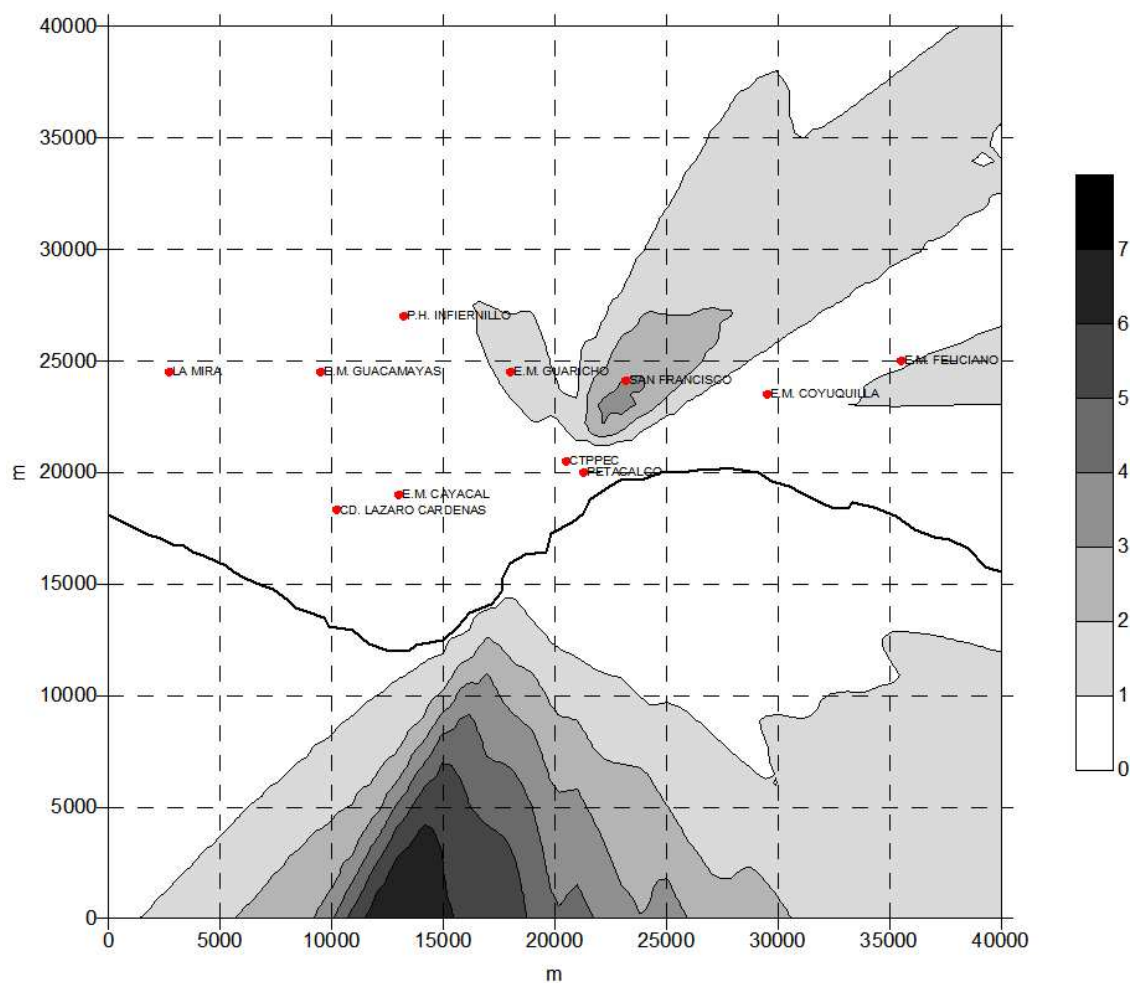


Figura 4.20: Isopletas para concentración promedio de SO<sub>2</sub> para el año 2002 obtenida en ISC. Valor máximo 6.9  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ .



## 4.5. Resultados del estudio PUMA-CFE

A continuación se transcribe el resumen de los resultados de las mediciones hechas en las estaciones meteorológicas aledañas a la zona de influencia de la CTPPEC con el fin de tener un punto de referencia para llevar a cabo la comparación entre el ISC y el TAPM. Las mediciones a las que hace mención fueron hechas del periodo 1996-2000 por la CFE y el PUMA y las correspondientes de julio 2000 a junio 2001 por el PUMA[4].

- *PST: El periodo de información disponible para la revisión de esta norma es el del PUMA en la zona de la CTPPEC (julio 2000 a julio 2001). La Norma Mexicana de Calidad del Aire para el promedio anual de PST fue rebasada en las estaciones Cayacal y Coyuquilla.*

**Tanto el ISC como el TAPM reportan que nunca se pasaron los niveles establecidos por la norma.**

*La Norma Mexicana de Calidad del Aire para el promedio 24 horas de PST fue rebasada en Coyuquilla dos ocasiones, los rebases a la norma ocurrieron el 2 de diciembre de 2000 y el 2 de mayo de 2001.*

**Según los resultados de TAPM la estación más afectada es la de Guaricho, aunque no sobrepasa el límite máximo y la zona más afectada es el sitio aledaño a San Francisco. Para el ISC sucede lo mismo (ver figura 4.14).**

*Se detectó que las instalaciones industriales cercanas a Cayacal influenciaron las concentraciones ahí registradas. Tomando en cuenta el valor recomendado para sulfatos, para protección a la visibilidad de California EUA, se observa que en todos los sitios se rebasó dicha recomendación, especialmente en Guaricho. Por lo que se considera que las emisiones de la CTPPEC en forma indirecta están contribuyendo a la reducción del alcance visual en la cuenca atmosférica de Petacalco. En los días 2 de diciembre de 2000 y 2 de mayo de 2001, las direcciones dominantes en estos días son del N, NNE, NNW y E, es decir, en una dirección opuesta de la CTPPEC. Por lo tanto, tal y como se asentó en el informe del PUMA, la CTPPEC no está directamente relacionada con los problemas de calidad del aire por PST detectados en la estación Coyuquilla.*

**Esto no parece ser cierto según los resultados del TAPM. En la simulación para la CTPPEC, sucede que durante el día (más o menos de 12:00 a 18:00 horas) los contaminantes de las chimeneas viajan a niveles más bajos debido a que es en este periodo cuando las plumas se encuentran dentro de la altura de mezclado, lo que provoca una mayor concentración a nivel del suelo. Estos vientos que provienen del sur llevan esta nube de contaminantes hacia el norte, provocando mayores niveles de contaminación en esta zona de la central. La “mancha” de contaminación viaja hacia esta dirección durante el día para en la tarde girar gradualmente en dirección contraria y regresar junto con los vientos nocturnos del N y NNE. Al analizar los datos para un día cercano al 2 de diciembre pero del año 2002 se encontró que aunque el viento en la zona de la estación Coyuquilla**

proviene del sector NNE (figura 4.21) la “mancha” de contaminación se encontraba viajando de regreso (figura 4.22).

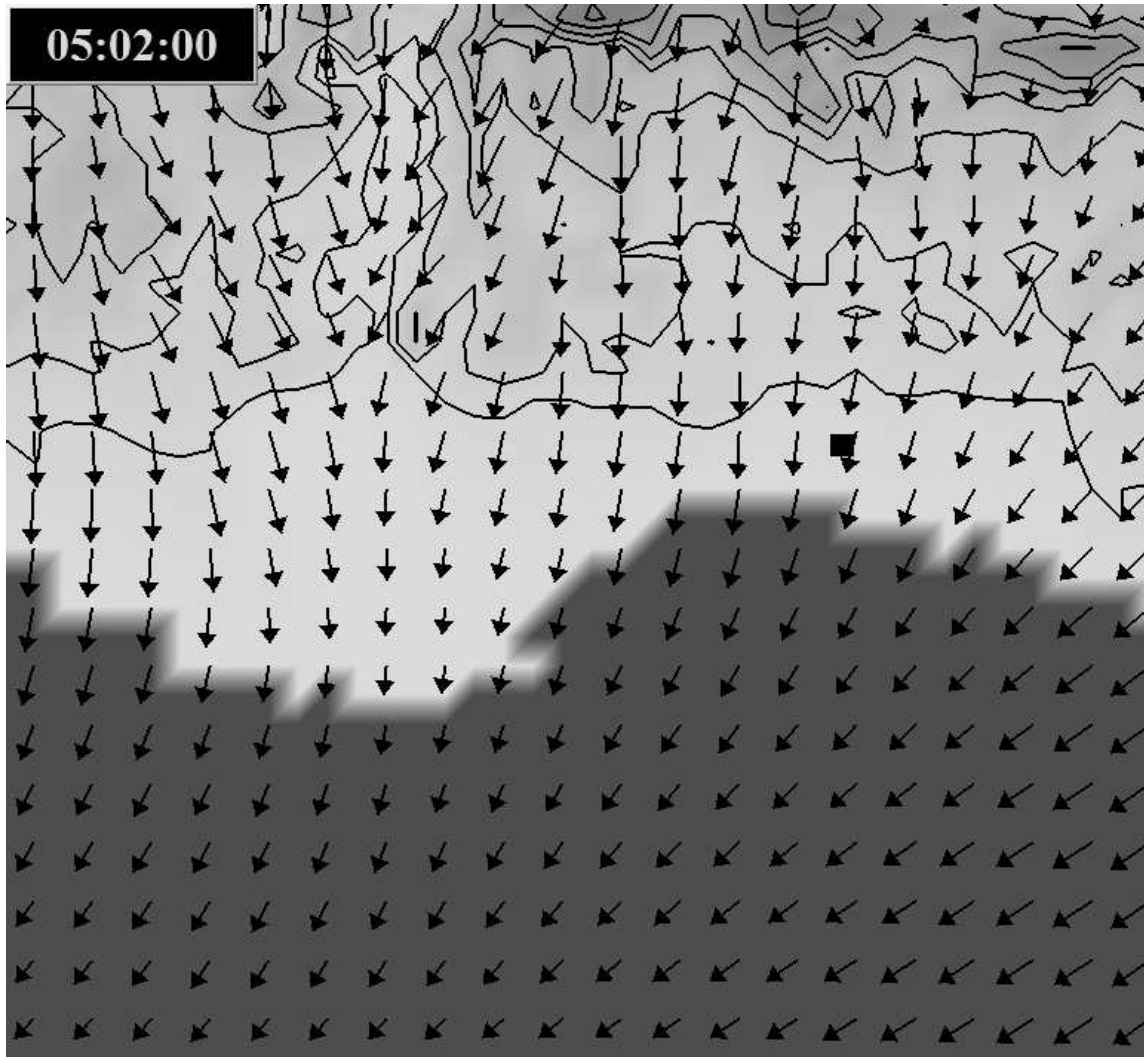


Figura 4.21: Campo de velocidades para el día 5 de Diciembre de 2002 a las 2:00 horas. El cuadro negro indica la localización de la estación Coyuquilla.

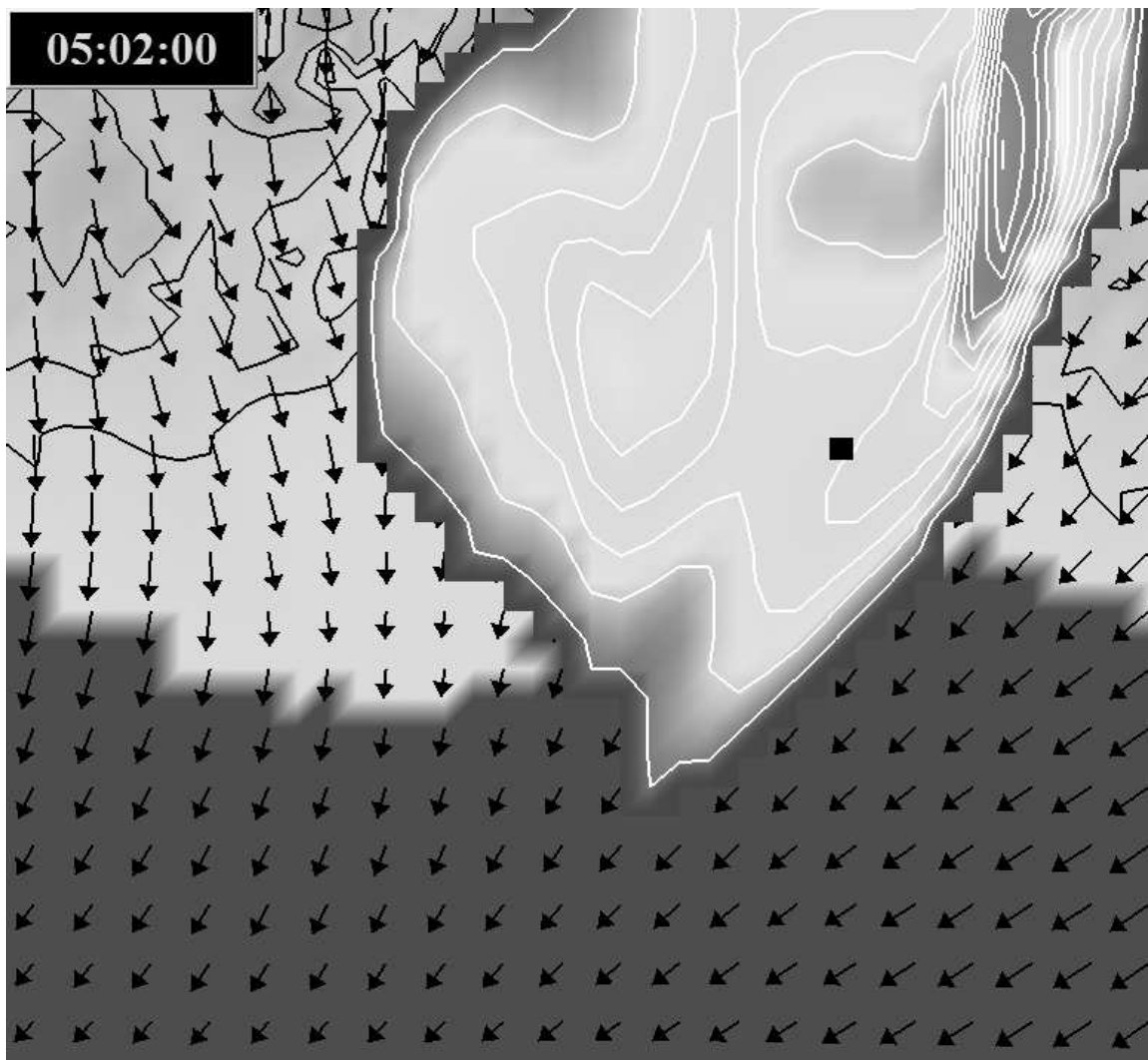


Figura 4.22: Nube de PST viajando de regreso para el día 5 de Diciembre de 2002 a las 2:00 horas. El cuadro negro indica la localización de la estación Cuyuquilla.

- **NO<sub>2</sub>**: *La Norma Mexicana de Calidad del Aire para NO<sub>2</sub> promedio anual no se ha rebasado en ninguna de las estaciones, durante el periodo observado.*

**En la figura 4.8 se puede observar que el promedio obtenido en TAPM nunca fue rebasado en todo el dominio de cálculo. Sucede lo mismo para el ISC (figura 4.17).**

*No obstante, la norma para NO<sub>2</sub> promedio 1 hora sí se ha rebasado en varias ocasiones en las estaciones Cayacal y Guaricho.*

**En la simulación de TAPM se puede observar que si hubo una zona en donde la norma se rebasó, e incluso se localiza cerca de las estaciones Cayacal y Guaricho, pero el rebase solo fue en dos ocasiones. Para el ISC no hubo una zona en donde se rebasara este valor (figura 4.16) aunque la zona que predice con mayor concentración coincide con la obtenida por el TAPM.**

*En la estación Guaricho se presentan las concentraciones más elevadas (hasta dos veces el valor de la norma) y, también, la mayor frecuencia, en comparación con las estaciones Cayacal y Guacamayas. La estación Cayacal está influenciada por las emisiones vehiculares de la zona.*

**Analizando los resultados numéricos de TAPM también se puede ver el mismo comportamiento, lo anterior puede distinguirse en la gráfica 4.6. Para el ISC se puede ver que la zona más afectada, pero que no rebasa el límite máximo, es la ubicada a 2 km al oeste de la CTPPEC.**

*En una de las campañas de monitoreo intensivo (5 al 9 de marzo de 2001 en Coyuquilla) se presentó un evento en el que la Norma Mexicana de Calidad del Aire para NO<sub>2</sub> promedio máximo en una hora se rebasó al menos en dos horas consecutivas (a las 2 y 3 pm del 6 marzo). La dirección del viento a estas horas fue del sector SSW, lo cual revela que la CTPPEC no fue la responsable en esta ocasión. Analizando nuevamente la base de datos del PUMA, se tiene que en la estación Guaricho, la concentración de NO<sub>2</sub>, promedio 1h se rebasó en varias ocasiones: 11 de julio de 2000 (18:00 hrs), 12 de julio de 2000 (13:00 hrs), 13 de julio de 2000 (11:00 hrs) y 16 de agosto de 2000 (13:00 hrs). En todos los casos, salvo el del 13 de julio de 2000, la dirección del viento dominante a la hora en que sucedieron las altas concentraciones de NO<sub>2</sub>, por arriba de la norma, fue de los sectores SSW y SSE. Lo cual apunta a que la CTPPEC pudo ser la responsable. No obstante, el 13 de julio de 2000 el viento dominante desde las 8:00 hrs hasta las 11:00 hrs fue del sector Este (NNE, NE y ESE); lo cual podría indicar que existen otras fuentes de emisión de NO<sub>2</sub>, diferentes a la CTPPEC, en los alrededores de la estación Guaricho que podrían estar afectando esta zona. De ser cierto lo anterior, es probable que la calidad del aire monitoreado por la estación Guaricho no sea responsabilidad únicamente de la CTPPEC.*

**Según las simulaciones en TAPM esto puede ser posible. En la figura 4.23 y 4.24 se pueden ver las condiciones de viento y concentraciones a nivel del suelo para el día 4 de Julio a las 9:00 horas. En ellas**

se puede apreciar que en la zona de la estación Guaricho hay una alta concentración de contaminantes, inclusive cuando el viento se encuentra en el sector de ENE a NE. Esto se debe a que la nube de contaminantes viaja hacia el sector de N a ENE durante las 12 y 20 horas y durante la noche cambia a la dirección opuesta trayendo, si las condiciones son adecuadas, la nube de contaminantes de regreso.

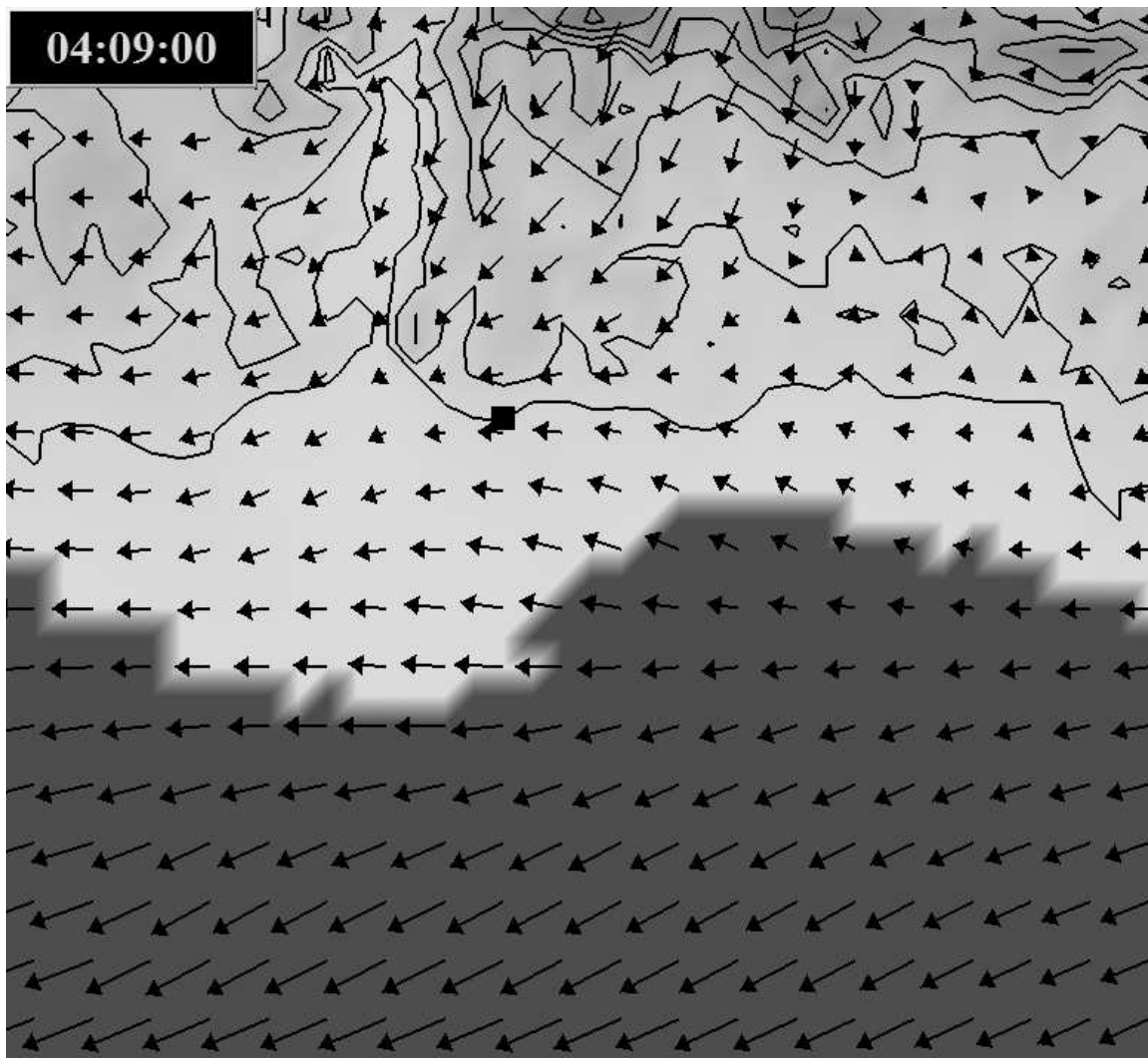


Figura 4.23: Campo de velocidades para el día 4 de Julio de 2002 a las 9:00 horas. El cuadro negro indica la localización de la estación Guaricho.

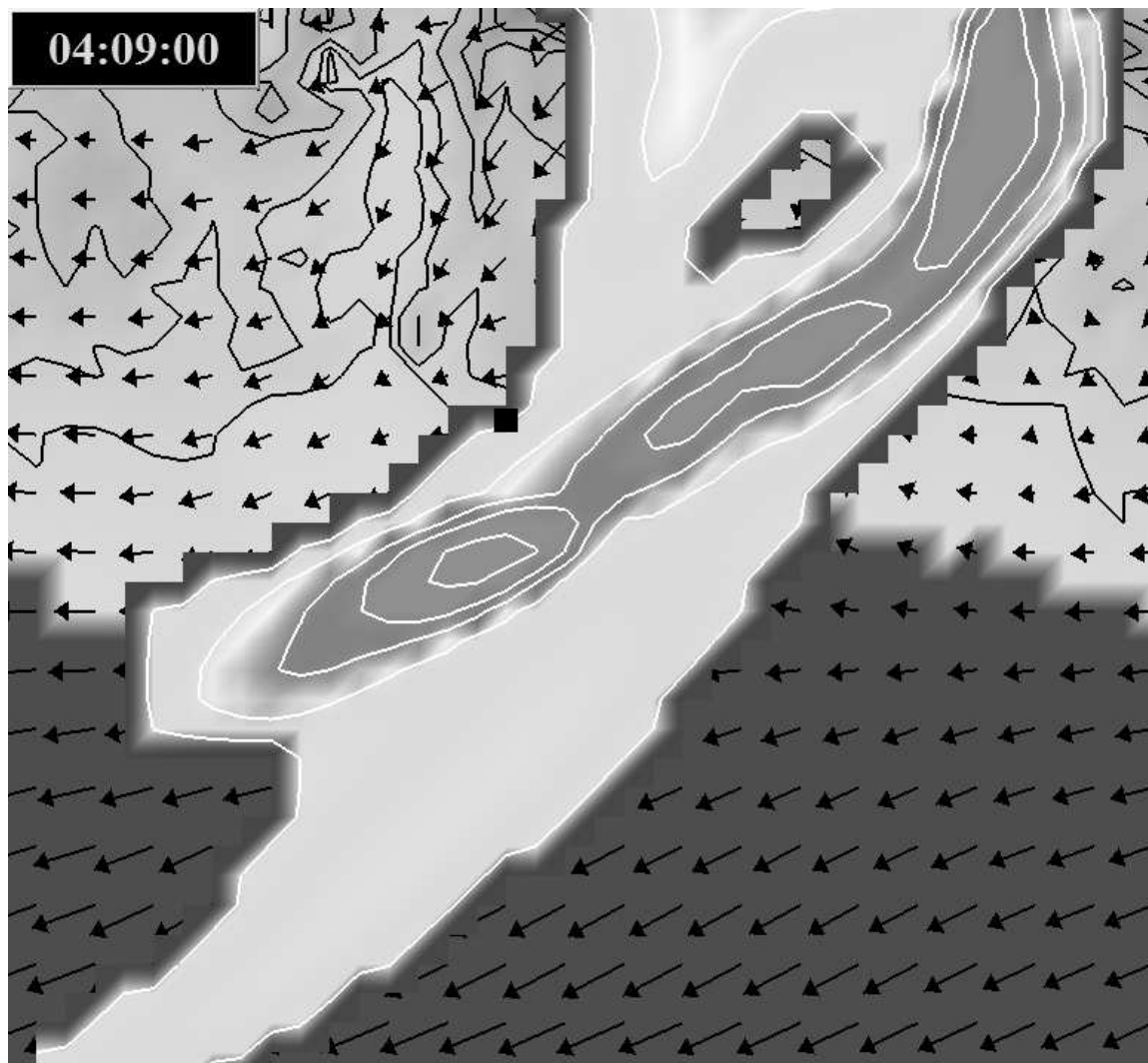


Figura 4.24: Nube de NO<sub>2</sub> viajando de regreso para el día 4 de Julio de 2002. El cuadro negro indica la localización de la estación Guaricho.

- **SO<sub>2</sub>**: *La Norma Mexicana de Calidad del Aire para SO<sub>2</sub> promedio aritmético anual no fue rebasada en ningún caso a lo largo del periodo 1996-2000, en ninguna de las tres estaciones de monitoreo de la CFE.*

**En la figura 4.13 se puede observar que sólo la estación Guaricho se encuentra dentro de la zona en la que el promedio anual fue rebasado y cabe mencionar que se encuentra muy cercana a la zona en donde el promedio no fue rebasado. Para el ISC se puede observar que en todo el dominio no se sobrepasó este valor máximo (figura 4.20).**

*Las concentraciones promedio en 24 horas de SO<sub>2</sub> para el mismo periodo, muestra en general valores bajos, aunque la Norma Mexicana de Calidad del Aire ha sido rebasada ocasionalmente en las tres estaciones, aunque de manera preferente en las estaciones Cayacal y Guacamayas.*

**En la figura 4.11 se puede observar que las estaciones Guacamayas y Cayacal se encuentran muy cercanas a la zona en donde la norma se rebasó en al menos una ocasión, mientras que la estación Guaricho se encuentra dentro de la zona en donde la norma fue rebasada en al menos de 1 a 5 veces en el año. En el ISC, para el promedio de 24 horas (gráfica 4.18) se lee que de las tres estaciones, la estación más afectada es la de Guaricho, lo que coincide con el reporte. Las estaciones de Guacamayas y Cayacal se encuentran, según los resultados del ISC, en una zona de baja concentración, lo que no corresponde con las mediciones.**

*Aunque las medianas anuales de los promedios de SO<sub>2</sub> en 24 horas indican una disminución a lo largo del periodo 1996 - 2000, ésta no es estadísticamente significativa; por lo que debe considerarse que los niveles de contaminación se han mantenido constantes. Las estaciones Cayacal y Guacamayas tienen influencia tanto de las emisiones de la CTPPEC como de otras actividades industriales. La estación Guaricho se encuentra en un sitio netamente rural y sólo está influenciada por las emisiones de la CTPPEC.*

**Para el TAPM, en la figura 4.11 se puede corroborar este dato.**

*Analizando la estación Guaricho, se tiene que las mayores concentraciones tienden a ocurrir entre los meses de febrero y mayo. Durante el periodo de trabajo del PUMA en la zona (julio 2000 a julio 2001) se corroboraron las observaciones anteriores. En la estación Guaricho se rebasó la norma una sola vez, durante el mes de enero. Según la base de datos proporcionada, el 10 de enero de 2001 la concentración promedio en 24 h en la estación Guaricho fue de 630 µg/m<sup>3</sup> (la norma establece 341 µg/m<sup>3</sup>). No obstante, el viento dominante durante ese día fue del NNE y del N; esto es, de una dirección opuesta a la de la CTPPEC. Durante las horas que se registraron las máximas concentraciones (10:00 am a 12:00 pm) el viento fue del sector N.*

**En el TAPM se puede ver que sucedió lo mismo que para los dos casos anteriores.**

Como se pudo observar, los resultados de las simulaciones de ISC y TAPM presentan una gran diferencia tanto en los niveles de concentración como en el número de rebases para cada norma. En general los valores obtenidos para los promedios en ISC fueron mucho menores a los obtenidos por TAPM, al igual que el número de rebases (tabla 4.3). El número de veces que los resultados reportados por el programa TAPM coinciden con lo dicho por el reporte superan en al menos cuatro veces al número de coincidencias que tuvieron los datos reportado por el programa ISC.

Cabe resaltar que las zonas en la que los promedios de 24, 1 hora o promedios anuales fueron excedidos en la simulación hecha por el TAPM se encuentran en zonas netamente rurales, a excepción del caso de los promedios de 24 horas para el SO<sub>2</sub> (figura 4.10) en la que la zona afectada comprende la parte norte de la ciudad Lázaro Cárdenas (estación Guacamayas).

Para el ISC la zona en donde se sobrepasó el promedio máximo para el SO<sub>2</sub> se encuentra en zona rural.

Cuadro 4.3: Resumen de valores máximos  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  y número de rebases (#r).

	PST		NO <sub>x</sub>		SO <sub>2</sub>	
	Promedio	Anual	Promedio	Anual	Promedio	Anual
	24hr		1hr		24hr	
TAPM	54	14.3	468 (2r)	12.6	720 (80r)	192.2
ISC	32.6	0.52	222	0.46	433(1r)	6.9



# Capítulo 5

## Conclusiones

Para poder dar una conclusión respecto a la aplicación del modelo TAPM en los estudios de impacto ambiental para la CTPPEC serían necesarios datos de concentraciones y variables meteorológicas de todas las estaciones. Sin embargo, se puede observar que pese a ello los resultados en TAPM se acercan más a lo reportado en el estudio previo de la CTPPEC que los resultados en ISC.

El TAPM hace una importante contribución en las conclusiones que fueron reportadas en el estudio previo en CTPPEC. Este programa, al hacer un pronóstico de la meteorología del lugar, obtiene un campo de velocidades más apegado a la realidad y con ello explica porque en ciertas estaciones meteorológicas y durante periodos en los que el viento no provenía de la CTPPEC se obtuvieron valores altos para todos los contaminantes. Fue posible simular el movimiento de vaivén de la nube de contaminates gracias a que los datos de la malla más interna de  $dx=dy=1\ 000\text{m}$  (en la que se presentan los resultados) se encuentra anidada en mallas más grandes (una de  $dx=dy=2\ 500\text{m}$ , la que a su vez se encuentra anidada en una de  $dx=dy=5\ 000\text{m}$  y que está anidada en una de  $dx=dy=10\ 000\text{m}$ ) y por ende la “nube” de contaminantes no se pierde al abandonar el dominio más “interno”.

Se puede observar que las concentraciones para el ISC son menores en comparación con el TAPM. Para las PST promedio 24 horas y promedio anual representan el 60.4 % y el 3.6 % de los niveles pronosticados por el TAPM respectivamente. Para el  $\text{NO}_x$  promedio 1 hora y promedio anual representa el 47.4 % y el 3.7 %. Para el  $\text{SO}_2$  promedio 24 horas y promedio anual representa el 60.1 % y el 3.6 %. Debido a la falta de datos de concentraciones, no es posible calificar el grado de certeza de dichos programas. Pero si es posible asegurar que no hay similitud tanto en los valores como en la forma de las isopletras.

Al parecer esto se debe a que el TAPM es capaz de simular mejor las estabilidades atmosféricas y la interacción entre el mar y la tierra de la zona de estudio (costa) y por ende la capacidad que tiene la atmósfera de dispersar un contaminante en su interior. El ISC, aunque trabaja con un archivo meteorológico del sitio de la central termoeléctrica, hace la suposición de que tanto la dirección del viento, la altura de la capa de mezclado y su estabilidad son constantes en todo el dominio durante el periodo de una hora, además de no considerar la interacción entre el mar y la tierra en la zona costera (fumigación). Mientras que el TAPM puede obtener valores distintos para estas variables en todo el dominio de cálculo en un mismo instante. Además, el TAPM deja atrás la necesidad de disponer de datos meteorológicos necesarios para

correr el ISC. Anteriormente para el ISC se debían montar estaciones meteorológicas para obtener dichos datos, hacer mediciones con globos para determinar el tipo de estabilidad y posteriormente procesarlos para poder utilizarlos en el programa.

Finalmente es necesario comentar que esta simulación aún puede ser mejorada si se consideraran las reacciones fotoquímicas, cosa que es capaz de simular el TAPM y el ISC no.

Como se puede apreciar, este es un trabajo que contribuye a la búsqueda de opciones de mayor precisión para simular dispersión de contaminantes en estudios de impacto ambiental. En este se presenta un método alternativo y que promete dar resultados más precisos en comparación con el modelo de pluma Gaussiana. Aunque el tiempo de cálculo en el programa TAPM es muy superior al del programa ISC (ISC hace sus cálculos en menos de 2 minutos para todo un año, TAPM en al rededor de 2 dias en un procesador de doble núcleo de 2.8 GHz de velocidad) este es insignificante si se toma en cuenta que la calidad de los datos es superior y que el ISC necesita de mediciones previas de estaciones meteorológicas de las que no siempre se dispone.

Finalmente, se puede hacer la siguiente recomendación: en una primera aproximación para un estudio de impacto ambiental se puede utilizar el ISC como una herramienta de cálculo sencilla, rápida y económica (si se disponen de los datos meteorológicos); mientras que el TAPM puede ser utilizado para calcular y explicar con mayor detalle los niveles de contaminación y los patrones de flujo relevantes para la dispersión de contaminantes en una determinada localidad. Con la certeza que sus cálculos son más precisos [12], [23], [18], [16] y [17].

# Bibliografía

- [1] *NOM-022-SSA1-1993*, 1993.
- [2] *NOM-023-SSA1-1993*, 1993.
- [3] *NOM-024-SSA1-1993*, 1993.
- [4] Diagnóstico ambiental en la zona de influencia de la central termoeléctrica plutarco elías calles. Technical report, UNAM, 2000.
- [5] Andren A. Evaluation of turbulent closure scheme suitable for air pollution applications. *J. Appl. Meteorol.*, (29):224–239, 1990.
- [6] S. Pal Arya. *Air pollution meteorology and dispersion*. Oxford University Press, 1999.
- [7] C.A. Brebbia B. Caussade, H. Power. *Air Pollution*, volume IV. Computational Mechanics Publications, 1996.
- [8] M.E. Berlyand. *Prediction and Regulation of Air Pollution*. Kluwer Academic Publisers, 1991.
- [9] Richard A. Dobbins. *Atmospheric Motion and Air Pollution*. John Wiley & Sons, Inc., 1979.
- [10] J.L. Gras, M.D. Keywood, and G.P. Ayers. Factors controlling winter-time aerosol light scattering in launceston, tasmania. *Atmospheric Environment*, (35):1881–1889, 2001.
- [11] N.S. Holmes and L. Morawska. A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles: An overview of different dispersion models available. *Atmospheric Environment*, (40):5902–5928, 2006.
- [12] Peter Hurley, Peter Maninsa, and Sunhee Lee. Year-long, high-resolution, urban airshed modelling: verification of tapm predictions of smog and particles in melbourne, australia. *Atmospheric Environment*, (37):1899–1910, 2003.
- [13] P.J. Hurley. *The Air Pollution Model (TAPM) Version 2. Technical Description*.
- [14] P.J. Hurley. An evaluation of several turbulence schemes for the prediction of mean and turbulent fields in complex terrain. *Boundary-Layer Meteorology*, (83):43–73, 1997.

- [15] Karl B. Schnelle Jr. and Partha R. Dey. *Atmospheric Dispersion Modeling Compliance Guide*. McGraw-Hill, 2000.
- [16] Ashok K. Luhar, Ian E. Galbally, and Melita Keywood. Modelling pm10 concentrations and carrying capacity associated with woodheater emissions in launceston, tasmania. *Atmospheric Environment*, (40):5543–5557, 2006.
- [17] Ashok K. Luhar and Peter J. Hurley. Evaluation of tapm, a prognostic meteorological and air pollution model, using urban and rural point-source data. *Atmospheric Environment*, (37):2795–2810, 2003.
- [18] Ashok K. Luhar and P.J. Hurley. Evaluation of tapm, a prognostic meteorological and air pollution model, using urban and rural point-source data. *Atmospheric Environment*, (37):2795–2810, 2003.
- [19] Leopoldo García-Colín Scherer and Juan Rubén Varela Ham. *Contaminación Atmosférica*. El colegio nacional, 1996.
- [20] John H. Seinfeld. *Contaminación Atmosférica, Fundamentos Físicos y Químicos*. Instituto de Estudios de Administración Local, 1978.
- [21] Arthur C. Stern. *Air Pollution*, volume I. Academic Press, second edition, 1968.
- [22] Rodi W. Calculation of stably stratified shear-layer flows with a buoyancy-extended k- $\epsilon$  turbulence model. *Turbulence and diffusion in stable environments*, pages 111–143.
- [23] Peyman Zawar-Reza, Simon Kingham, and Jamie Pearce. Evaluation of a year-long dispersion modelling of pm10 using the mesoscale model tapm for christchurch, new zealand. *Science of the Total Environment*, (349):249– 259, 2005.