



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

**PROGRAMA DE MAESTRIA Y DOCTORADO EN
INGENIERÍA**

INSTITUTO DE INGENIERÍA

**ANALISIS COMPARATIVO ENTRE UN MODELO
GAUSSIANO DE FUMIGACIÓN, UN MODELO
METEOROLÓGICO DE PRONÓSTICO DE DISPERSIÓN
DE CONTAMINANTES Y EL MODELO SCREEN3.**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE :

MAESTRO EN INGENIERÍA
P R E S E N T A:

DAVID SAMUEL NAVARRO GARCÍA

DIRECTOR DE TESIS: DR. ALEJANDRO RODRÍGUEZ VALDÉS



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.

Resumen

La fumigación costera es un proceso en el que una pluma elevada de contaminantes que se dispersa en un flujo estable o neutral tierra adentro con poca difusión, es arrastrada dentro de una capa límite interna térmica, experimentando un mezclado vertical rápido debido a movimientos convectivos generados dentro de ésta. Este fenómeno es capaz de provocar altas concentraciones de contaminantes a nivel del suelo, por lo que su modelado matemático es de gran importancia. Se simuló este fenómeno mediante tres modelos: SCREEN3, un modelo meteorológico de pronóstico de dispersión de contaminantes (TAPM), y un Modelo de Pluma Gaussiano. Se calcularon las concentraciones de NO_x y SO_2 a nivel del suelo mediante el uso del modelo Gaussiano de fumigación costera, así como mediante el modelo TAPM en la zona aledaña a una central termoeléctrica. De este estudio se obtuvieron las distancias a las que ocurren las concentraciones máximas durante un evento de fumigación costera, y se llevó a cabo una comparación de los resultados obtenidos por ambos modelos.

Abstract

Coastal fumigation is a turbulent dispersion process in which a plume, released from a tall stack within the stable or neutral onshore breeze, is entrained into the growing thermal internal boundary layer that forms over land. The plume is subsequently mixed to the ground by the convective turbulence within the thermal internal boundary layer. This phenomenon may lead to high ground level concentrations of pollutants, thus mathematical modeling of fumigation is of considerable practical importance. Three models were used to simulate this phenomenon: SCREEN3, a model for weather and dispersion forecasting of pollutants (TAPM) and a Gaussian plume model. Ground level concentrations of NO_x and SO_2 were calculated using the Gaussian fumigation model as well as the model TAPM in the surrounding area to a power station. In this study, the distances where the peak concentrations occur were obtained and a comparison of the results obtained by both models was made.

ÍNDICE

1. Introducción

1.1 Preliminares.....	1
1.2 Descripción del fenómeno.....	3
1.3 Objetivo	5
1.4 Alcance	5
1.5 Procedimiento de análisis.....	6

2. Antecedentes

2.1 Modelos estocásticos	9
2.1.1 Modelo de Pluma Gaussiano	10
2.1.2 Modelo SCREEN3.....	10
2.2 Modelos determinísticos.....	11
2.2.1 TAPM.....	13
2.2.2 PHOENICS.....	15

3. Marco teórico

3.1 Normatividad.....	16
3.2 El NO ₂ y SO ₂ como contaminantes atmosféricos.....	16
3.3 Modelo Gaussiano.....	18
3.3.1 Estabilidad atmosférica.....	19
3.3.2 Modelo de Pluma Gaussiano	20
3.3.3 Elevación de la pluma.....	22
3.3.4 Profundidad de la capa límite térmica interna (TIBL).....	25
3.3.5 Desviación estándar de la nube.....	25
3.3.6 Velocidad del viento.....	27
3.3.7 Precisión de las predicciones.....	27
3.3.8 Condiciones de uso.....	28
3.4 Modelo SCREEN3.....	29

3.4.1	Conceptos básicos del modelado de la dispersión.....	29
3.4.2	Condiciones meteorológicas del peor escenario.....	30
3.4.3	Elevación de la pluma.....	31
3.4.4	Parámetros de dispersión.....	31
3.4.5	Dispersión inducida por flotación.....	32
3.4.6	Fumigación costera.....	32
3.5	The Air Pollution Model (TAPM)	34
3.5.1	Limitaciones del TAPM.....	34

4 Resultados

4.1	La Central Termoeléctrica Presidente Plutarco Elías Calles (CTPPEC).....	36
4.2	Condiciones de operación	36
4.3	Escenario propuesto.....	37
4.4	Resultados del Modelo de Pluma Gaussiano	
4.4.1	Datos característicos de la CTPPEC	39
4.4.2	EES (Engineering Equation Solver)	39
4.4.3	Resultados	41
4.4.3.1	Concentraciones de NO _x	42
4.4.3.2	Concentraciones de SO ₂	45
4.4.3.3	Resumen de resultados Modelo de Pluma Gaussiano.....	48
4.5	Resultados del modelo SCREEN3.....	48
4.5.1	Datos de entrada.....	49
4.5.2	Resultados.....	54
4.6	Resultados del modelo TAPM	
4.6.1	Datos de entrada.....	56
4.6.2	Resultados	63
4.6.2.1	Concentraciones de NO _x	63
4.6.2.2	Concentraciones de SO ₂	64
4.6	Comparación de resultados del Modelo de Pluma Gaussiano, TAPM y SCREEN3.....	69

5 Conclusiones y recomendaciones	
5.1 Conclusiones	80
5.2 Recomendaciones	83
Referencias.....	84
Apéndices	
A Programa EES.....	89
B Descripción técnica del modelo TAPM	
B.1 El módulo meteorológico.....	93
B.2 El módulo de contaminación atmosférica.....	104
C Video del 8 al 10 de agosto de 2003. Simulación TAPM.....	11

Capítulo 1

Introducción

1.1 Preliminares

La degradación del medio ambiente debida a la actitud adoptada por los humanos hacia la Naturaleza durante el último siglo, en el sentido en que en su actuación tenía licencia para explotar los recursos naturales con una total indiferencia ante todo lo que no repercutiera en beneficio directo del hombre, ha dado lugar a uno de los problemas capitales que la Humanidad tiene planteados en la actualidad, la contaminación.

La contaminación del aire es una condición atmosférica en la que se encuentran sustancias en concentraciones superiores a las encontradas en ambientes normales en la naturaleza. Esta condición, es capaz de provocar efectos significativos en humanos, animales, vegetación, o materiales (Seinfeld, 1986). Las sustancias presentes pueden ser naturales o, químicos o compuestos, hechos por el hombre en estado sólido, líquido o gaseoso.

Como una regla general, la calidad del aire tiende a empeorar donde son emitidos la mayoría de los contaminantes atmosféricos, esto es, en áreas industriales y zonas urbanas. Así que, la contaminación local y urbana incluyendo la contaminación en interiores constituye un problema serio. Ciertos contaminantes como el ozono en la tropósfera, oxidantes fotoquímicos y compuestos de azufre y nitrógeno, son fácilmente transportados por vientos y se dispersan sobre grandes regiones.

Cada año, los países industriales generan miles de millones de toneladas de contaminantes. Muchos contaminantes proceden de fuentes fácilmente identificables; el dióxido de azufre, por ejemplo, procede de las centrales energéticas que queman carbón o petróleo.

Las plantas de generación de potencia convencionales que funcionan a base de combustibles fósiles son la fuente principal de contaminantes atmosféricos. De las chimeneas de estas plantas de generación se emiten cantidades considerables de materia en forma de partículas en suspensión (SiO_2), óxidos de

aluminio y hierro del carbón, así como metales pesados. Los contaminantes gaseosos que se emiten en mayor proporción son el monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂), dióxido de azufre (SO₂), óxidos de nitrógeno (NO₂), y ciertos hidrocarburos y compuestos orgánicos volátiles (VOCs).

La concentración de los contaminantes se reduce al dispersarse éstos en la atmósfera, proceso que depende de factores climatológicos como la temperatura, la velocidad del viento, el movimiento de sistemas de altas y bajas presiones y la interacción de éstos con la topografía local, por ejemplo las montañas y valles.

Las altas chimeneas de las industrias no reducen la cantidad de contaminantes, simplemente los emiten a mayor altura, reduciendo así su concentración *in situ*. Estos contaminantes pueden ser transportados a gran distancia y producir sus efectos adversos en áreas muy alejadas del lugar donde tuvo lugar la emisión. El pH o acidez relativa de muchos lagos de agua dulce, que se genera por la precipitación de ácido sulfúrico y ácidos nítricos en combinación con la humedad del medio ambiente, se ha visto alterado hasta tal punto que han quedado destruidas poblaciones enteras de peces. En Europa se han observado estos efectos, y así, por ejemplo, Suecia ha visto afectada la capacidad de sustentar peces de muchos de sus lagos. Las emisiones de dióxido de azufre y la subsiguiente formación de ácido sulfúrico pueden ser también responsables del ataque sufrido en las calizas y mármol a grandes distancias.

El creciente consumo de carbón y petróleo desde finales de la década de 1940 ha llevado a concentraciones cada vez mayores de dióxido de carbono. Las emisiones crecieron un 3.1 % al año entre 2000 y 2006, más del doble del índice de crecimiento durante los años 90. El efecto invernadero resultante, que permite la entrada de la energía solar, pero reduce la reemisión de rayos infrarrojos al espacio exterior, genera una tendencia al calentamiento que podría afectar al clima global y llevar al deshielo parcial de los casquetes polares.

La contaminación atmosférica no es sólo un problema de “emisiones” sino también un fenómeno íntimamente ligado a las condiciones meteorológicas del

lugar, y como tal, debe ser tratado como uno de los peligros del clima (Pielke, 1979). Debido a esto se han desarrollado diversos modelos de calidad del aire.

Los modelos de calidad del aire utilizan técnicas matemáticas y numéricas para simular los procesos químicos y físicos que afectan a los contaminantes en el aire mientras se dispersan y reaccionan en la atmósfera. Basados en entradas de información meteorológica e información de la fuente como tasas de emisión y alturas de las chimeneas, estos modelos están diseñados para caracterizar a los contaminantes primarios que son emitidos directamente en la atmósfera, y en algunos casos, a los contaminantes secundarios que son formados como resultado de reacciones químicas complejas dentro de la ella.

En ambientes costeros, la meteorología puede afectar adversamente a la dispersión de contaminantes en el aire. La *fumigación costera* es un proceso en el que una pluma de contaminantes que se transporta en una capa de aire estable o neutral con poca difusión en el eje vertical, es arrastrada dentro de una capa límite térmica interna (TIBL, por sus siglas en inglés), experimentando un rápido mezclado vertical debido a los movimientos convectivos existentes dentro de esta capa. Este proceso es capaz de ocasionar altas concentraciones de contaminantes a nivel del suelo y puede persistir por muchas horas.

Actualmente se han desarrollado diversos modelos capaces de representar el fenómeno de la fumigación en zonas costeras, ya que muchas instalaciones potencialmente contaminantes se localizan en estas zonas.

1.2 Descripción del fenómeno

La dispersión de contaminantes en las regiones costeras, difiere de las regiones tierra adentro, principalmente debido a que la dispersión es afectada por la diferencia de temperaturas entre la superficie de la tierra y del agua.

La diferencia de temperatura entre las superficies de la tierra y del agua afecta a la dispersión, debido a que ésta tiende a causar una diferencia en la presión del aire sobre la superficie de la tierra y del agua y porque tiende a producir un diferente tipo de estabilidad atmosférica en el aire sobre el agua y la tierra, con una interfase entre ellos.

En un entorno costero, la tierra es generalmente más caliente que el agua del mar durante el día, por lo que se genera una capa de aire estable o neutral sobre el agua. Cuando el aire estable fluye desde el mar hacia la tierra, se forma una capa límite térmica interna (TIBL por sus siglas en inglés). La TIBL es una capa límite convectiva la cual crece con la distancia tierra adentro y se desarrolla principalmente durante la primavera y el verano ya que la energía absorbida por la tierra es mayor que en otoño e invierno. La dispersión turbulenta, producida por el calentamiento de la tierra, es confinada al interior de la TIBL (Figura 1).

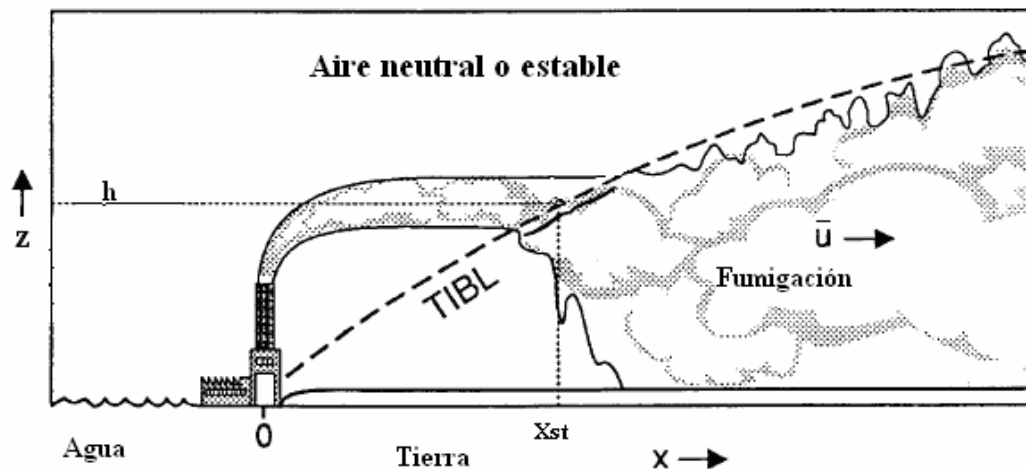


Figura 1 Fumigación costera

El fenómeno conocido como fumigación costera se presenta cuando una pluma de contaminantes, que es emitida al medio ambiente por una fuente elevada en una región atmosférica estable o neutral sobre la TIBL, se mueve tierra adentro con relativamente poca difusión en el eje vertical. Eventualmente, a una distancia tierra adentro, determinada por la tasa de crecimiento de la capa límite y por la altura efectiva de la fuente, la pluma intercepta a la TIBL; siendo ésta, rápidamente dispersada hacia el suelo por los fuertes movimientos convectivos que ocurren dentro de ésta.

La magnitud de las concentraciones así como su ubicación, depende de las propiedades del flujo, de la turbulencia dentro y fuera de la TIBL, del crecimiento de la TIBL con la distancia tierra adentro y de las características de la fuente entre otros parámetros.

La pluma de contaminantes se ensancha, en la dirección vertical, hasta que la capa límite turbulenta se llena uniformemente. En el plano horizontal se puede considerar que la dispersión es ilimitada ya que, por lo general, no existen fronteras que la restrinjan y únicamente es afectada por depresiones meteorológicas, anticiclones, grandes nubes, y los efectos de montañas, colinas, ciudades, entre otros factores.

1.3 Objetivo

Calcular las concentraciones de NO_x y SO_2 a nivel del suelo mediante tres modelos. Un modelo Gaussiano de fumigación costera, el modelo SCREEN3 y un modelo meteorológico y de pronóstico de dispersión de contaminantes (TAPM) en la zona aledaña a una central termoeléctrica (CT) y analizar los resultados con el fin de inferir la aplicabilidad y bondad de cada modelo.

1.4 Alcance

Se realizó un estudio comparativo entre tres modelos capaces de representar el fenómeno de fumigación costera: un modelo meteorológico y de pronóstico de dispersión de contaminantes (The Air Pollution Model, TAPM por sus siglas en inglés), un modelo de dispersión de pluma Gaussiano y el modelo SCREEN3. Con el modelo TAPM y el Modelo de Pluma Gaussiano, se obtuvieron las concentraciones de contaminantes (SO_2 y NO_x) a nivel del suelo y se calculó la distancia a partir de la CT en la que se presenta la mayor concentración de contaminantes. El modelo SCREEN3 no pronosticó un escenario de fumigación costera para las condiciones simuladas.

El modelo TAPM es adecuado para dominios horizontales menores a 1000 km por 1000 km, provee una interfase gráfica atractiva, predice los vientos, temperaturas, presiones, vapor de agua, nubosidad y lluvia, así como otros parámetros meteorológicos. TAPM incorpora los efectos de la elevación de la

pluma así como los efectos de las estelas de las edificaciones, fotoquímica, química acuosa, deposición seca y húmeda.

El modelo de dispersión Gaussiana es válido para una pluma con flotación neutral sobre la tierra y para distancias no mayores a 100 km desde la fuente con condiciones meteorológicas constantes durante el tiempo que viaja la pluma. Se programó este modelo en el programa EES (*Engineering Equation Solver* por sus siglas en inglés), el cual básicamente se utilizó para resolver el sistema de ecuaciones así como para programar una interfase gráfica amigable con el fin de ejemplificar la facilidad con la que se introducen datos y la rapidez con la que se obtienen resultados.

El modelo SCREEN3 es capaz de estimar las concentraciones máximas a nivel del suelo y las distancias en donde se presenta, también incorpora los efectos de edificaciones calculando las concentraciones máximas para las regiones cercanas y lejanas a la estela generada por estas. Así mismo, es capaz de estimar las concentraciones en zonas de recirculación en cavidades y las provocadas por la fumigación costera y por la fumigación debida al rompimiento de la capa de inversión. La fumigación debida al rompimiento de la capa de inversión ocurre justo después del amanecer cuando la inversión nocturna se disipa debido al calentamiento de la superficie siendo lentamente reemplazada por una capa inestable que crece hasta la parte superior de la pluma.

1.5 Procedimiento de análisis

Con el fin de determinar la contribución de la termoeléctrica en la contaminación ambiental por NO_x y SO_2 se utilizó un modelo de pluma Gaussiano, The Air Pollution Model (TAPM) y el modelo SCREEN3.

Para acortar los tiempos de cálculo del Modelo de pluma Gaussiano, se programó éste para obtener los perfiles de concentraciones únicamente en la mitad de la pluma con respecto a su eje longitudinal, ya que, este modelo es simétrico respecto a este eje. El tamaño del dominio para la simulación del Modelo de Pluma Gaussiano fue de 20 km en la dirección del viento a partir de la Central Termoeléctrica (CT) y de 8 km en la dirección lateral debido a que en simulaciones previas con un dominio y mallado mayor, se observó que las

concentraciones máximas se dan aproximadamente a 6 km viento arriba de la fuente y a que los contaminantes se dispersan en la dirección lateral 14 km aproximadamente.

Para la simulación en el modelo TAPM se utilizó una malla anidada de 60 x 60 km en una malla de 400 x 400 km. El anidamiento de mallas consiste en resolver el modelo primero en una malla gruesa sobre un área grande; con el resultado se calcula la meteorología en una región interior más restringida, cubierta por una malla más fina, y así sucesivamente, hasta alcanzar el detalle requerido en el contorno deseado.

En el modelo SCREEN3 se utilizó un arreglo de 41 nodos con una separación entre ellos de 500 m, abarcando una distancia a partir de la CT de 20 km.

Para visualizar el impacto de la CT, se generaron tablas y figuras en las que se muestra la distribución de contaminantes predicha por el Modelo de Pluma Gaussiano y el modelo TAPM para cada contaminante a nivel del suelo.

Este estudio describe en el capítulo 2 los modelos de dispersión de contaminantes más utilizados, justificando el uso de tres modelos para su comparación, un modelo de pluma Gaussiano, el modelo TAPM y el modelo SCREEN3.

En el capítulo 3 se hace una descripción detallada de los tres modelos propuestos en este trabajo:

- Un modelo analítico de fumigación costera basado en el Modelo de Pluma Gaussiano, capaz de arrojar resultados confiables de una manera económica, rápida y simple.
- El modelo TAPM, el cual permite conocer la distribución de las concentraciones de manera precisa considerando la topografía del terreno; así como una mejor aproximación de las condiciones meteorológicas.
- El modelo SCREEN3 es propuesto por la EPA (*Environmental Protection Agency* de los Estado Unidos de Norteamérica) para aplicaciones regulatorias (http://www.epa.gov/scram001/dispersion_screening.htm).

En el capítulo 4 se propone a la Central Termoeléctrica Presidente Plutarco Elías Calles (CTPPEC) como ejemplo ilustrativo del fenómeno de fumigación costera. Se listan los datos monitoreados (la meteorología del sitio así como las condiciones de operación de la central) en la zona de la CT considerados como información de entrada en el Modelo de Pluma Gaussiano, en el modelo TAPM y en el modelo SCREEN3 y posteriormente se analizan los resultados obtenidos por estos modelos.

En el capítulo 5 se hace un resumen de los resultados más relevantes, aportando así algunas conclusiones y recomendaciones.

Capítulo 2

Antecedentes

2.1 Modelos Estocásticos

Los modelos estocásticos son aquellos modelos matemáticos que están basados en la probabilidad y en la estadística, en los cuales se incorporan las incertidumbres que por lo general acompañan nuestras observaciones de eventos reales. Los modelos estocásticos utilizados en el estudio de la atmósfera, están basados en el análisis estadístico de datos obtenidos por una red de monitoreo atmosférico. Un ejemplo de un modelo estadístico estará dado por el pronóstico de las concentraciones de un contaminante, como una función estadística de las mediciones actuales y la correlación entre estas mediciones y las tendencias de las concentraciones del contaminante.

Actualmente varios modelos estocásticos de fumigación debido a fuentes puntuales están en uso para predecir el nivel de contaminantes a nivel del suelo de materiales aerotransportados desde chimeneas altas. Tal vez el mayor problema de la mayoría de estos modelos es que suponen que la pluma se mezcla instantáneamente y/o uniformemente en la dirección vertical inmediatamente después de que ésta se intersecta con la TIBL. Estas suposiciones guían a predicciones imprecisas de la variación del nivel de contaminantes a nivel del suelo con la distancia tierra adentro.

Algunos de los modelos estocásticos de fumigación costera empleados comúnmente son: los Modelos de Van Dop *et al.* (1979), el de Misra (1980), la extensión del modelo de Misra, el *Dispmod*, los modelos de dispersión estocástica Lagrangiana, el modelo de fumigación PDF (*Probability density function* por sus siglas en inglés) y los modelos de pluma Gaussiano. Estos modelos están sujetos a las siguientes suposiciones: estado permanente (con excepción del modelo estocástico Lagrangiano), se asume que la altura final de la pluma se alcanza antes de su intersección con la TIBL y que la chimenea es de una altura tal que ningún contaminante de la pluma alcance el suelo cuando

ésta se transporta en la capa estable. Para una mayor descripción de estos modelos, revisar el trabajo de Navarro (2008).

Actualmente, los modelos de pluma Gaussiano son ampliamente usados para estimar el impacto de contaminantes no reactivos. En este trabajo se proponen los modelos estocásticos SCREEN3 y el modelo de difusión de pluma Gaussiano para el cálculo de las concentraciones de contaminantes a nivel del suelo, debido a que los demás modelos estocásticos antes mencionados tienen una aplicación muy limitada para la estimación de la dispersión de contaminantes debido a la cantidad de parámetros que se deben prescribir para las condiciones de cada caso. Como se explica en el trabajo de Navarro (2008), los resultados obtenidos por el uso de modelos estocásticos más complejos no ofrecen una diferencia sustancial en los resultados, o mayor confianza en la predicción de las concentraciones viento abajo.

2.1.1 Modelo de Pluma Gaussiano

El Modelo de Pluma Gaussiano propuesto en esta Tesis, se aplica a una pluma con flotación neutral sobre la tierra, para distancias no mayores a 100 km desde la fuente. Las condiciones meteorológicas se consideran constantes durante el tiempo que viaja la pluma. Los perfiles de concentraciones obtenidos mediante este modelo pueden ser sensibles a pequeños cambios en los valores propuestos en la profundidad de la capa límite, la desviación estándar vertical y horizontal de la nube. Este modelo ha mostrado ser extremadamente sensible si la tasa de crecimiento de la capa límite interna con la distancia es muy pequeña en el punto donde la pluma intercepta a la capa límite térmica (Navarro, 2008). Un ejemplo de este caso es para plumas con grandes alturas de estabilidad o aquellas que expulsadas por chimeneas muy altas interceptan a la capa límite a distancias tierra adentro muy grandes.

2.1.2 Modelo SCREEN3

El modelo SCREEN3 corre interactivamente en una computadora formulando al usuario una serie de preguntas con el fin de obtener la información de entrada al modelo y determinar las configuraciones a simular.

El modelo SCREEN3 es un modelo de pluma Gaussiano, válido para una sola fuente, que provee las concentraciones máximas a nivel del suelo para fuentes puntuales, de área y de volumen, así como las concentraciones en cavidades y las debidas al rompimiento de la capa de inversión y a la fumigación costera. SCREEN3 es una versión de preevaluación del modelo ISC3 el cual es un modelo alternativo a los modelos recomendados por la EPA en la “*Guideline on Air Quality Models*” que puede ser utilizado en aplicaciones regulatorias (http://www.epa.gov/scram001/dispersion_alt.htm#isc3). Los resultados de este modelo son calculados en promedios de una hora.

2.2 Modelos determinísticos

Los modelos determinísticos tienen la capacidad para simular procesos como el transporte, la difusión atmosférica (advección y convección), las reacciones térmicas y fotoquímicas y la sedimentación de diversas especies químicas o partículas. Estos modelos simulan los procesos atmosféricos relacionados con la contaminación del aire y están basados generalmente en las ecuaciones de conservación de masa de cada contaminante.

La formulación de un modelo determinístico de calidad del aire puede hacerse suponiendo un estado permanente o transitorio de los contaminantes en la atmósfera, siendo igualmente variable la resolución temporal y la resolución espacial del modelo. La concentración de las especies cambia en función del tiempo, ya sea por la incorporación de nuevas especies, por el transporte de las mismas entre una celda y otra, por la difusión o por las reacciones químicas.

Los modelos determinísticos de calidad del aire son importantes ya que estando calibrados apropiadamente, proporcionan una perspectiva clara de la relación determinística fuente-receptor. Es decir, un modelo determinístico puede proporcionar información para relacionar las emisiones de las fuentes con el impacto de éstas sobre los receptores, con lo cual apoya el planteamiento e implantación de estrategias de control de emisiones.

Puede considerarse que los modelos determinísticos de calidad del aire son herramientas útiles para:

- El establecimiento de normatividad sobre control de emisiones

- La evaluación de estrategias y técnicas para el control de emisiones
- La ubicación de futuras fuentes contaminantes, con el fin de minimizar el impacto de las mismas sobre el ambiente
- Predecir y planificar los episodios de contaminación con el fin de atenuar la frecuencia y el número de los mismos

No obstante, las bondades que poseen los modelos determinísticos de calidad del aire, es importante mencionar que, si bien por sí solos éstos no son la solución de los problemas de contaminación, sí proporcionan información útil para la implantación y evaluación de estrategias de control y reducción de emisiones.

Además de lo anterior, los modelos determinísticos pueden aplicarse en diversos aspectos relacionados con la contaminación del aire; entre ellos, para describir procesos o fenómenos que se efectúan en la atmósfera.

Existen dos enfoques básicos que emplean los modelos determinísticos para describir la dispersión turbulenta, el enfoque Euleriano y el enfoque Lagrangiano. El enfoque Euleriano asigna a cada punto del espacio y en cada instante un valor para las propiedades o magnitudes fluidas sin importar la partícula fluida que en dicho instante ocupa ese punto (no está ligada a las partículas fluidas sino a los puntos del espacio ocupados por el fluido). El enfoque Lagrangiano consiste en seguir a cada partícula fluida en su movimiento, de manera que se buscan las funciones de posición, así como las propiedades de la partícula fluida en cada instante. La diferencia básica entre estos dos enfoques es que en el caso del Euleriano, el sistema de referencia está fijo con respecto a la Tierra, mientras que en el Lagrangiano, el sistema de referencia (parcela de aire) sigue el movimiento del viento dominante. La aplicación de cada uno de éstos depende de las características de la situación en cuestión. Una manera de resolver numéricamente las ecuaciones obtenidas mediante estos enfoques es mediante programas computacionales. Actualmente existen varios programas computacionales capaces de representar adecuadamente la dispersión turbulenta. A continuación se describirán brevemente dos programas computacionales, TAPM y PHOENICS debido a que éstos son comúnmente

utilizados para la simulación de procesos de dispersión de contaminantes con buenos resultados.

2.2.1 TAPM

El modelo TAPM (The Air Pollution Model) resuelve numéricamente las ecuaciones de la mecánica de fluidos así como las ecuaciones de transporte de escalares para predecir la meteorología y concentraciones para un rango de contaminantes en aplicaciones de contaminación atmosférica. TAPM consiste en módulos meteorológicos y de concentraciones de contaminantes acoplados, eliminando la necesidad de tener observaciones meteorológicas *in situ*. En vez de eso, el modelo predice los flujos importantes para la contaminación local, como las brisas marinas y flujos inducidos por el terreno, con base en una meteorología de mayor escala (orden de miles de kilómetros o más) provista por análisis sinópticos (análisis de información que describe el estado de la atmósfera sobre una gran área en un momento dado). Las condiciones iniciales para cada anidación son interpoladas de los análisis sinópticos (en intervalos de 6 horas) del modelo del Departamento de Australia de Asimilación y Predicción de la Meteorología Global (GASP por sus siglas en inglés). Para obtener las condiciones de frontera de la malla más grande se interpolan los valores de los análisis sinópticos obtenidos cada 6 horas. Para las mallas anidadas, se obtienen las condiciones de frontera a partir de la malla anterior.

El módulo meteorológico de TAPM resuelve las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento para la componente horizontal y transversal del viento, la ecuación de continuidad para la velocidad vertical, y ecuaciones escalares para la temperatura potencial virtual y humedad específica del vapor de agua. La función de presión de Exner (Apéndice B) se divide en componentes hidrostáticos y no-hidrostáticos y se resuelve una ecuación de Poisson para el componente no-hidrostático.

La comprensión de los procesos micro-físicos de las nubes es de gran importancia para representar adecuadamente los efectos de los modelos a nivel regional y global ya que las nubes tienen un efecto significativo en el albedo global jugando un importante rol en el ciclo hidrológico. Es por esto que en los

cálculos se incluyen procesos explícitos micro-físicos de nubes con el fin de resolver las ecuaciones de conservación para la humedad específica representada por la suma del vapor, agua y hielo contenidos en las nubes. Los términos que representan la turbulencia en estas ecuaciones han sido determinados resolviendo las ecuaciones para la energía cinética y la tasa de disipación viscosa, usando estos valores para representar los flujos verticales con un enfoque de un gradiente de difusión, incluyendo un término de contra-gradiente para el flujo de calor.

El módulo de contaminación atmosférica de TAPM, el cual utiliza la meteorología y turbulencia predicha del módulo meteorológico, consiste de cuatro módulos:

- El módulo de malla Euleriana (EGM) resuelve las ecuaciones para calcular la media y varianza de la concentración, y para la correlación cruzada (covarianza) de concentración y temperatura potencial virtual.
- El módulo Lagrangiano de partícula (LPM) puede ser usado para representar la dispersión cercana a la fuente de manera más precisa.
- El módulo de altura de pluma se utiliza para tomar en cuenta los efectos de flotación y de cantidad de movimiento de la pluma para fuentes puntuales.
- El módulo de estelas causadas por edificaciones permite que la altura efectiva de la pluma así como la dispersión incluya los efectos de las estelas generadas por las “cavidades” en el flujo por edificaciones y obstáculos significativos.

El modelo también incluye reacciones fotoquímicas en fase gaseosa y reacciones químicas en fase líquida para el dióxido de azufre y partículas, y un módulo de polvo para las partículas totales en suspensión. También se incluyen efectos de deposición húmeda y seca. En este trabajo no se implementaron los módulos de reacciones químicas y de partículas en suspensión debido a dos factores:

- Se desea considerar el peor escenario en el que todo contaminante que sale de las chimeneas permanece en la atmósfera en la misma

forma en la que fue emitido (no se pierde material por reacciones químicas ni por deposición en la superficie).

- Con el fin de simplificar las simulaciones ahorrando tiempo máquina.

2.2.2 PHOENICS

PHOENICS es un programa de propósito general capaz de predecir cuantitativamente la manera en que los fluidos fluyen dentro y alrededor de motores, equipos de proceso, edificios, seres humanos, lagos, ríos, océanos, etc. También es capaz de predecir los cambios en la composición asociados a procesos químicos y físicos, así como los esfuerzos mecánicos y térmicos en cuerpos inmersos.

PHOENICS es capaz de discretizar las ecuaciones de conservación de masa, conservación de la cantidad de movimiento y conservación de la energía y resolverlas numéricamente con el fin de tener una representación tridimensional, tomando en cuenta la geometría de cuerpos inmersos (orografía, edificaciones), etc.

El nombre es un acrónimo de *Parabolic Hyperbolic Or Elliptic Numerical Integration Code Series*. PHOENICS es un código CFD (Dinámica de fluidos computacional).

El modelo determinístico utilizado por PHOENICS es más difícil de programar, ya que requiere de las condiciones de frontera adecuadas así como las condiciones iniciales. EL modelo TAPM no presenta estas desventajas ya que las condiciones iniciales y de frontera, como el tipo y forma de terreno, y condiciones atmosféricas, son conocidas. Es por esto que en esta tesis, se propone el modelo TAPM como punto de comparación para un modelo estocástico de pluma Gaussiana y el modelo SCREEN3.

Capítulo 3

Marco teórico

3.1 Normatividad

La Norma Oficial Mexicana NOM-023-SSA1-1993, Salud Ambiental establece que el bióxido de nitrógeno, como contaminante atmosférico, no debe rebasar el valor permisible de 0.21 ppm ($395 \mu\text{g m}^{-3}$), en una hora una vez al año, como protección a la salud de la población susceptible.

Actualmente nuestro país carece de una norma oficial que regule las concentraciones máximas permitidas en una hora, una vez al año, para el dióxido de azufre (SO_2). Para comparar los resultados obtenidos se utilizarán los estándares de calidad del aire de California, EU. Estos estándares están listados en la tabla de estándares en la sección 70200 de título 17 del código de regulaciones de California. De acuerdo a estos estándares, la concentración máxima permitida de SO_2 es de 0.25 ppm ($655 \mu\text{g m}^{-3}$) en una hora una vez al año.

3.2 El NO_2 y SO_2 como contaminantes atmosféricos

El dióxido de nitrógeno (NO_2) es un agente sumamente oxidante, soluble en agua, de color café-rojizo, constituido por un átomo de nitrógeno y dos átomos de oxígeno en su estructura molecular. Constituye uno de los precursores básicos de la neblina o smog fotoquímico y se distingue a simple vista en las grandes urbes por la coloración café-rojizo.

Muchos de los efectos ambientales que se atribuyen al NO_2 se deben en realidad a los productos de diversas reacciones asociadas.

En presencia de luz solar el NO_2 se disocia en NO y O , donde el oxígeno atómico (O) reacciona con el oxígeno molecular del ambiente (O_2) para producir ozono (O_3), el cual es un contaminante altamente oxidante de efectos conocidos.

Por otra parte el NO_2 reacciona con el radical OH para producir partículas de ácido nítrico (HNO_3), las cuales se dispersan en el ambiente en forma de lluvia,

llovizna, niebla, nieve y rocío, dando origen a un proceso de acidificación de la tierra y cuerpos de agua.

Las variaciones o cambios permanentes en las propiedades de estos elementos, deriva finalmente en la pérdida de hábitat de especies primarias y consecuentemente en catástrofes ecológicas con daños irreversibles.

El dióxido de nitrógeno puede irritar los pulmones, causar bronquitis y pulmonía, así como reducción significativa de la resistencia respiratoria a las infecciones. Los efectos de exposición a corto plazo no son claros, pero la exposición continua o frecuente a concentraciones mayores a las encontradas normalmente en el aire, puede causar un incremento en la incidencia de enfermedades respiratorias en los niños, agravamiento de afecciones en individuos asmáticos y con enfermedades respiratorias crónicas.

A diferencia del ozono, las concentraciones de NO_2 en interiores pueden ser más altas que las registradas en el exterior; esto se debe a que una fuente de éste contaminante son las estufas que utilizan gas L.P. Actualmente se acepta que no hay evidencia científica confiable que sugiera la posibilidad de efectos crónicos atribuibles al NO_2 . Sin embargo, el dióxido de nitrógeno puede ser fatal a concentraciones elevadas.

La OMS recomienda como límite para preservar la salud pública una concentración máxima de NO_2 diaria de 0.11 ppm ($200 \mu\text{g m}^{-3}$) promedio de 1 hora una vez al año, y 0.023 ppm ($40 \mu\text{g m}^{-3}$) en una media aritmética anual. La Norma Oficial Mexicana establece como límite de protección a la salud, una concentración máxima diaria de 0.21 ppm ($395 \mu\text{g m}^{-3}$) promedio de 1 hora una vez al año para protección de la población susceptible.

El dióxido de azufre (SO_2) es un gas incoloro de olor característico, constituido por un átomo de azufre y dos átomos de oxígeno en su estructura molecular.

El SO_2 atmosférico puede oxidarse a SO_3 por diferentes medios y reaccionar con la humedad del entorno (H_2O) para producir partículas de ácido sulfúrico (H_2SO_4), las cuales se dispersan en el ambiente en forma de lluvia, llovizna, niebla, nieve y rocío dando origen a un proceso de acidificación de la tierra y cuerpos de agua.

En altas concentraciones el dióxido de azufre puede ocasionar dificultad para respirar, humedad excesiva en las mucosas de las conjuntivas, irritación severa en vías respiratorias e incluso al interior de los pulmones por formación de partículas de ácido sulfúrico, ocasionando vulnerabilidad en las defensas.

El dióxido de azufre es causante de enfermedades respiratorias como broncoconstricción, bronquitis y traqueítis, pudiendo llegar a causar broncoespasmos en personas sensibles como los asmáticos, agravamiento de enfermedades respiratorias y cardiovasculares existentes y la muerte; si bien los efectos señalados dependen en gran medida de la sensibilidad de cada individuo, los grupos de la población más sensibles al dióxido de azufre incluye a los niños y ancianos, a los asmáticos y a aquellos con enfermedades pulmonares crónicas como bronquitis y enfisema.

La combinación de óxidos de azufre y partículas suspendidas actúan sinérgicamente produciendo un efecto combinado mucho más nocivo que el efecto individual de cada uno de ellos por separado. Experimentos realizados en animales expuestos a concentraciones de SO₂ de 9 a 50 ppm, muestran cambios morfológicos y funcionales permanentes similares a los que presenta la bronquitis crónica.

La OMS recomienda como límite para preservar la salud pública una concentración de SO₂ de 100 a 150 µg m⁻³ promedio de 24 horas, y de 40 a 60 µg m⁻³ en una media aritmética anual. La Norma Oficial Mexicana establece como límite de protección a la salud, una concentración de 0.13 ppm (341 µg m⁻³) promedio de 24 horas, una vez al año, y 0.03 ppm (79 µg m⁻³) en una media aritmética anual para protección de la población susceptible.

3.3 Modelo Gaussiano

El modelo Gaussiano, que incluye la ecuación de distribución Gaussiana es el modelo más usado en dispersión de contaminantes. La ecuación de distribución Gaussiana emplea cálculos relativamente simples, que sólo requieren dos parámetros de dispersión (σ_y y σ_z) para identificar la variación de las concentraciones de contaminantes que se encuentran lejos del centro de la pluma, D.B. Turner (1970). Este modelo determina las concentraciones de

contaminantes en el nivel del suelo sobre la base de las variables atmosféricas de tiempo promedio (por ejemplo, la temperatura y la velocidad del viento).

3.3.1 Estabilidad atmosférica

La clasificación de la estabilidad y turbulencia atmosférica para el modelado de la difusión turbulenta en aplicaciones regulatorias más simple y más frecuentemente usada es la propuesta por Pasquill (1961) y después modificada por Turner (1970) (Tabla 1). Mediante este esquema, se proponen 6 clases discretas identificadas por las letras A a la F. Como puede verse en esta Tabla, las estabilidades A, B y C representan las horas diurnas con condiciones inestables. La estabilidad D representa los días o noches con cielo cubierto con condiciones neutrales. Las estabilidades E y F representan las condiciones nocturnas estables, y se basan en la cantidad de cobertura de nubes. Por consiguiente, la clasificación A representa condiciones de gran inestabilidad y la clasificación F representa condiciones de gran estabilidad. Esta clasificación es función de la velocidad del viento medida a 10 metros sobre el terreno, de la radiación solar durante el día y de la nubosidad durante la noche.

Tabla 1 Condiciones meteorológicas que definen el tipo de estabilidad atmosférica de Pasquill.

VELOCIDAD DEL VIENTO [m/s] A 10M DEL SUELO	<u>DÍA</u>			<u>NOCHE</u>	
	RADIACIÓN SOLAR			NUBOSIDAD	
	Fuerte	Moderada	Ligera	≥ 4/8	≤ 3/8
< 2	A	A-B	B	---	---
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

A, extremadamente inestable; B, moderadamente inestable; C, ligeramente inestable; D, neutral; E, ligeramente estable; F, moderadamente estable.

En la Tabla 1, la radiación solar “Fuerte” corresponde a un ángulo de altitud solar mayor de 60°, mientras que “Ligero” corresponde a una altitud solar menor a 35°, ambos con cielo despejado. La nubosidad corresponde a la fracción de cielo cubierto con nubes, en un lugar en particular.

3.3.2 Modelo de pluma Gaussiano

La formulación matemática del modelo Gaussiano considerando una fuente puntual continua en un flujo uniforme con turbulencia homogénea es:

$$\bar{c}(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\bar{u}\sigma_y\sigma_z} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right] \quad (1)$$

donde, \bar{c} es la concentración de contaminantes (kg m^{-3}), Q es la tasa de emisión, \bar{u} es la velocidad media de transporte del aire correspondiente a la

altura de estabilidad de la pluma, σ_y es el parámetro Gaussiano de dispersión horizontal y σ_z es el parámetro Gaussiano de dispersión vertical.

Para tomar en cuenta el efecto de la superficie de la tierra en la ecuación (1) se considera que los contaminantes se reflejarán a partir de cierta distancia en dirección del viento. Para lo anterior es necesario utilizar una fuente imaginaria con una localización en $z = -h$, $x=0$ y $y=0$, teniendo así, una imagen en el espejo de la fuente original. Esto implica que no se toma en cuenta a la superficie del suelo como un sumidero para dichos contaminantes. La adición de una fuente imagen lleva a la siguiente ecuación para una emisión en la superficie o elevada:

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

donde, h es la altura efectiva de la pluma.

Para el caso del fenómeno de fumigación costera, donde se presentan condiciones de inversión, el material quedará atrapado entre la TIBL y el suelo (ver Figura 1). Para representar estas condiciones mediante el Modelo de pluma Gaussiano, se deberán introducir múltiples reflexiones. En otras palabras, la concentración aerotransportada en el punto de interés, debe ser obtenida sumando las contribuciones de varias fuentes virtuales. El número de contribuciones depende de los valores relativos del coeficiente de dispersión vertical y de la profundidad de la TIBL. Se puede representar a las alturas de las fuentes virtuales como:

$$z = \pm 2mA \pm h \quad (m = 0,1,2,3\dots) \quad (3)$$

donde, A es la profundidad de la TIBL.

En este trabajo se truncó la serie después del término $m=1$ ya que, por lo general, esto proporciona una suficiente precisión (Navarro, 2008). La distribución de concentraciones, entonces, puede ser expresada como:

$$\bar{c}(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] F(h, z, A), \text{ si } \sigma_z < A \quad (4)$$

donde,

$$F(h, z, A) = \exp\left[-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(2A-z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \\ + \exp\left[-\frac{(2A-z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(2A+z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(2A+z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right]$$

y por,

$$\bar{c}(x, y, z) = \frac{Q}{(2\pi)^{\frac{1}{2}} u \sigma_y A} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right], \text{ si } \sigma_z > A \quad (5)$$

donde las desviaciones estándar de la pluma σ_z y σ_y deberán ser evaluadas considerando los efectos de la dispersión de la pluma dentro y fuera de la TIBL.

3.3.3 Elevación de la pluma

La pluma emitida por una chimenea, mientras que se dispersa bajo la influencia de la turbulencia atmosférica, tiende a sufrir una elevación como consecuencia de dos factores. El primer factor es la cantidad de movimiento vertical producida cuando los gases salen de la chimenea con una velocidad específica. El segundo factor es la diferencia de temperaturas entre los gases de la chimenea con el medio ambiente, produciendo así un efecto de flotación de la pluma.

En el modelo Gaussiano, la elevación de la pluma debida a los efectos de la cantidad de movimiento y a la flotación, se debe añadir a la altura física de la chimenea para estimar la altura efectiva de la pluma.

Según las predicciones para la elevación de la pluma basadas en el análisis dimensional, para el caso de un tipo de estabilidad Pasquill E ó F, para una pluma vertical en la salida y dominada por los efectos de cantidad de movimiento, se propone la siguiente ecuación para calcular la elevación de la pluma, Briggs (1968):

$$\Delta H = 1.5 \left(\frac{F_m}{u} \right)^{1/3} s^{-1/6} \quad (6)$$

Para el caso de una pluma dominada por los efectos de flotación con un tipo de estabilidad Pasquill E ó F se propone la siguiente ecuación para calcular la elevación de la pluma, Briggs (1968):

$$\Delta H = 2.6 \left(\frac{F_b}{u} \right)^{1/3} s^{-1/3} \quad (7)$$

donde, ΔH es la elevación de la pluma, F_m es el parámetro del flujo de cantidad de movimiento inicial, F_b es el parámetro del flujo de flotación inicial y s es el parámetro de estabilidad estática. Los parámetros F_m , F_b y s están dados por:

$$F_m = \left(\frac{\overline{\rho}_s}{\rho} \right) r_s^2 \overline{w}_s^2$$

$$F_b = \left(1 - \frac{\overline{\rho}_s}{\rho} \right) g r_s^2 \overline{w}_s^2 \quad (8)$$

$$s = \frac{g}{T_v} \left(\frac{\partial \overline{T}_v}{\partial z} + \Gamma \right)$$

donde, $\bar{\rho}_s$ es la densidad promedio y \bar{w}_s es la velocidad vertical promedio del efluente, r_s es el radio de la sección transversal, $\bar{\rho}$ es la densidad del medio ambiente a la altura de la fuente, g es la aceleración de la gravedad, Γ es el gradiente térmico adiabático y T_v es la temperatura virtual definida como:

$$T_v = T(1 + 0.61q) \quad (9)$$

con

$$q \approx 0.622 \frac{e}{p}$$

donde T es la temperatura ambiente, p es la presión, q es la humedad específica y e es la presión parcial del vapor de agua en el aire.

Los cambios relativos entre la presión y la temperatura de una porción de aire que se transporta adiabáticamente esta dada por la relación:

$$T_2 = T \left(\frac{p_2}{p} \right)^{R/c_p} \quad (10)$$

donde, T_2 es la temperatura ambiente a la presión p_2 , R la constante específica del gas y $R/c_p \cong 0.286$.

La altura de estabilidad de la pluma esta dada por:

$$h = h_s + \Delta H \quad (11)$$

donde h_s es la altura de la chimenea.

En esta tesis, únicamente se consideró el efecto de la flotación para la estimación de la altura de estabilidad de la pluma. Esto debido a que considerar aditivamente los efectos de cantidad de movimiento y de flotación puede resultar en una sobreestimación de la elevación total de la pluma (Pal Arya, 1999).

3.3.4 Profundidad de la capa límite térmica interna (TIBL)

Para determinar la altura de la capa límite térmica interna se utilizó la relación de Stunder y SethuRaman (1985):

$$z_i(x) = A_0 x^{1/2} \quad (12)$$

con,

$$A_0 = [2.7H_0 / (\bar{\rho} c_p \gamma \bar{u})]^{1/2}$$

donde, x es la distancia tierra adentro desde la interfase tierra-agua, H_0 es el flujo superficial de calor ($W m^{-2}$), $\bar{\rho}$ densidad del aire, c_p es la capacidad térmica específica del aire, γ es el gradiente vertical de temperatura potencial del aire sobre el agua ($K m^{-1}$).

3.3.5 Desviación estándar de la nube σ

Para obtener los coeficientes de dispersión para el eje lateral así como para el vertical, en este trabajo se utilizaron las fórmulas de interpolación de Briggs para campo abierto (Tabla 2). Estas fórmulas son función de las clases de estabilidad de Pasquill y de la distancia tierra adentro a partir de la fuente. Los valores de la dispersión en el eje lateral calculados mediante estas fórmulas son válidos para emisiones de muy corta duración, por lo que, para este caso, además se tomaron en cuenta las fluctuaciones en la dirección del viento.

Tabla 2 Fórmulas de interpolación de Briggs para campo abierto.

Categoría Pasquill	σ_{yt} (m)	σ_z (m)
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	$0.04x(1+0.0001x)^{-1/2}$	$0.016x(1+0.0003x)^{-1}$

x es la distancia viento debajo de la fuente en metros.

Para calcular el valor del parámetro de dispersión en el eje lateral (σ_y) tomando en cuenta las fluctuaciones en la dirección del viento, se utilizaron las siguientes expresiones de Moore (1976):

$$\sigma_y^2 = \sigma_{yt}^2 + \sigma_{yw}^2 \quad (13)$$

con

$$\sigma_{yw} = 0.065 \left(\frac{7}{u} \text{Tiempo} \right)^{\frac{1}{2}} x$$

donde, σ_{yt} es el término para la dispersión turbulenta obtenido mediante las fórmulas de interpolación de Briggs, σ_{yw} es la componente debida a las fluctuaciones en la dirección del viento y *Tiempo* es la duración de la emisión en horas.

En este trabajo los coeficientes de dispersión fueron evaluados utilizando una modificación del modelo de fuente virtual tal que:

$$\sigma(x) = \sigma_L(x_L + x_v) \quad (14)$$

donde, σ es el valor de la dispersión de la pluma correspondiente a una fuente puntual, x es la distancia desde la fuente, x_L es la distancia viajada dentro de la capa límite térmica, x_v es una distancia efectiva tal que $\sigma_L(x_v) = \sigma_s(x_{st})$, x_{st} es la distancia viajada en la capa estable.

3.3.6 Velocidad del viento

La velocidad media del viento aumenta con la altura en la mitad baja de la capa límite planetaria debido principalmente a ciertos factores que modifican el perfil vertical de velocidad del viento, como por ejemplo, la presencia de edificaciones, árboles, etc. En este trabajo se utilizó el perfil de ley de potencias para representar a la distribución media del viento con la altura.

$$\frac{\bar{u}}{\bar{u}_r} = \left(\frac{z}{z_r} \right)^n \quad (15)$$

donde, \bar{u}_r es la velocidad de referencia a la altura z_r y n es un exponente menor o igual a la unidad.

3.3.7 Precisión de las predicciones

La concentración de contaminantes predicha por el Modelo de Pluma Gaussiana utilizado en esta tesis, por lo general se encuentra dentro de un factor de tres de la concentración real (R.H. Clarke, 1979) si se usan valores medidos para todos los parámetros, así como si se asigna una correcta estabilidad atmosférica.

3.3.8 Condiciones de uso

Muchas suposiciones y aproximaciones están implícitas en el Modelo de Pluma Gaussiano propuesto en esta tesis. A continuación se mencionan algunas de las más importantes (Lyons y Scout, 1990):

1. Se supone una emisión continua de la fuente a una tasa constante, al menos para un tiempo igual o mayor que el tiempo de transporte al receptor de interés.
2. Flujo en estado permanente y condiciones meteorológicas constantes al menos para un tiempo igual o mayor que el tiempo de transporte al receptor de interés. Esta suposición puede ser inválida para condiciones meteorológicas que cambian rápidamente.
3. Conservación de masa en la pluma. La ecuación de continuidad satisfecha por la fórmula del Modelo de Pluma Gaussiano es una expresión matemática de la condición de que la tasa del flujo de masa a través de cualquier sección transversal de la pluma es igual a la tasa de emisión de la fuente. Esto implica que nada de material es removido a través de reacciones químicas o nucleares, o deposición en la superficie. Todo el material que toca la superficie o la TIBL debido a la difusión turbulenta es reflejado.
4. Se supone una distribución normal de la concentración media en la dirección lateral y vertical en cualquier punto viento abajo en la pluma. Se considera una velocidad del viento constante en el plano horizontal (x - y).
5. Viento cortante nulo en la vertical. Esta suposición está implícita en la velocidad media de transporte \bar{u} en la formulación del Modelo de Pluma Gaussiano.
6. Vientos lo suficientemente fuertes de tal manera que se pueda considerar que la difusión en la dirección del flujo sea despreciable en comparación con la media de transporte. Esta suposición se vuelve inválida para condiciones atmosféricas extremadamente estables o en condiciones de convección libre.

3.4 Modelo SCREEN3

La mayoría de las técnicas usadas en SCREEN3 se basan en las suposiciones y métodos comunes a otros modelos de dispersión de la EPA. A continuación se describirá como estos métodos fueron incorporados al modelo SCREEN3 y se describirán aquellas que son únicas a este modelo.

3.4.1 Conceptos básicos del modelado de la dispersión

SCREEN3 utiliza un modelo de pluma Gaussiano que incorpora factores relativos a la fuente y factores meteorológicos para estimar la concentración de contaminantes de fuentes continuas. Se asume que el contaminante no presenta reacciones químicas y que ningún tipo de proceso en que se remueva materia, como deposición húmeda o seca, actúa en la pluma durante su transporte desde la fuente.

La ecuación básica para determinar las concentraciones a nivel del suelo bajo la línea central de la pluma es:

$$X = \frac{Q}{2\pi u_s \sigma_y \sigma_z} \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_r - h_e}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{2z_r + h_e}{\sigma_z}\right)^2\right] \right. \\ \left. + \sum_{N=1}^k \left[\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_r - h_e - 2Nz_i}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_r + h_e - 2Nz_i}{\sigma_z}\right)^2\right] \right] \right. \\ \left. + \sum_{N=1}^k \left[\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_r - h_e + 2Nz_i}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_r + h_e + 2Nz_i}{\sigma_z}\right)^2\right] \right] \right\} \quad (16)$$

donde

X = concentración (g/m³)

Q = tasa de emisión (g/s)

π = 3.141593

u_s = velocidad del viento a la altura de la chimenea (m/s)

σ_y = parámetro de dispersión lateral

σ_z = parámetro de dispersión vertical

z_r = altura del receptor (m)

h_e = altura central de la pluma (m)

z_i = altura de mezclado (m)

k = límite de la suma para las múltiples reflexiones de la pluma del el suelo y de la inversión elevada. Este factor usualmente es ≤ 4 .

3.4.2 Condiciones meteorológicas del peor escenario

El modelo SCREEN3 examina un rango de clases de estabilidad de Pasquill y velocidades del viento para identificar las condiciones meteorológicas del peor escenario, *i. e.*, la combinación de la velocidad del viento y estabilidad que resulta en las máximas concentraciones a nivel del suelo.

La altura de mezclado usada en el modelo SCREEN3 para condiciones neutrales e inestables (clases AD) está basada en la altura de mezclado generada por energía mecánica. La altura mecánica de mezclado, z_m (m), es calculada (Randreson, 1984) como

$$z_m = 0.3 \frac{u^*}{f} \quad (17)$$

donde

u^* = velocidad de fricción (m s^{-1})

f = parámetro de Coriolis ($9.374 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ en 40° latitud)

Usando un perfil logarítmico lineal de la velocidad del viento, y suponiendo una rugosidad de 0.3 m, u^* es estimada de la velocidad del viento a los 10 m, u_{10} , como

$$u^* = 0.1u_{10} \quad (18)$$

Al sustituir u^* en la ecuación (17) se tiene

$$z_m = 320u_{10} \quad (19)$$

La altura mecánica de mezclado corresponde a la altura mínima de mezclado durante el día. Para ser conservativos, si el valor de z_m de la ecuación (18) es menor que la altura de la pluma, h_e , entonces la altura de mezclado usada para calcular las concentraciones es igualada a $h_e + 1$. Para condiciones estables, la altura de mezclado es igualada a 10000 m para representar mezclado ilimitado.

3.4.3 Elevación de la pluma

En el modelo SCREEN3 se utilizan los métodos de Briggs para estimar la elevación de la pluma.

El flujo de flotación para fuentes puntuales es calculado de Briggs (1975)

$$F_b = gv_s d_s^2 \frac{(T_s - T_a)}{4T_s} \quad (20)$$

El flujo de cantidad de movimiento, usado para calcular la elevación de la pluma tomando en cuenta los efectos de edificaciones, es calculado de

$$F_m = \frac{v_s^2 d_s^2 T_a}{4T_s} \quad (21)$$

La guía de usuarios de ISC (EPA, 1995b) describe las ecuaciones utilizadas para estimar la elevación de la pluma considerando los efectos de flotación y de cantidad de movimiento para condiciones de estabilidad neutrales, inestables y estables. También se describe la elevación de la pluma en estado transitorio, y como estimar la elevación final de la pluma. La elevación final de la pluma es utilizada en SCREEN3 para todos los casos, con excepción de los cálculos para terrenos complejos y al considerar los efectos de edificaciones.

3.4.4 Parámetros de dispersión

Las ecuaciones usadas para calcular los parámetros de dispersión vertical (σ_z) y lateral (σ_y) para sitios rurales y urbanos se describen en la sección 1.1.5 del volumen II de la guía de usuarios del ISC (EPA, 1995b).

3.4.5 Dispersión inducida por flotación

En el modelo SCREEN3, con la excepción del algoritmo de Schulman-Scire de estelas, los parámetros de dispersión σ_y y σ_z , son ajustados para tomar en cuenta los efectos de la dispersión inducida por flotación como sigue:

$$\sigma_{ye} = \left(\sigma_y^2 + \left(\frac{\Delta h}{3.5} \right)^2 \right)^{0.5} \quad (22)$$

$$\sigma_{ze} = \left(\sigma_z^2 + \left(\frac{\Delta h}{3.5} \right)^2 \right)^{0.5} \quad (23)$$

donde Δh es la distancia dependiente de la elevación de la pluma. Para el caso de rompimiento de la capa de inversión y de fumigación costera, las distancias siempre están más allá de la distancia de la elevación final de la pluma, por lo que $\Delta h =$ elevación final de la pluma.

3.4.6 Fumigación costera

Para fuentes rurales cercanas (al menos en 3 km) de un gran cuerpo de agua, las concentraciones máximas, considerando el fenómeno de fumigación costera, pueden ser estimadas por SCREEN3. Para este caso, este modelo supone un flujo estable con dirección tierra adentro con una clase de estabilidad Pasquill F ($\Delta\theta/\Delta z = 0.035 \text{ K m}^{-1}$) y una velocidad del viento a la altura de la chimenea de 2.5 m s^{-1} . La concentración máxima de contaminantes debida este fenómeno se supone que ocurre donde la cima de la pluma estable intercepta la cima de la TIBL.

Una evaluación de los modelos de fumigación costera (EPA, 1987b) ha mostrado que la altura de la TIBL como función de la distancia tierra adentro es representada de buena manera en áreas rurales con terreno relativamente plano por una ecuación de la forma:

$$h_T = A(x)^{0.5} \quad (24)$$

donde

h_T = altura de la TIBL (m)

A = factor de la TIBL que contiene constantes físicas necesitadas para la parametrización de la TIBL (incluyendo el flujo de calor) ($m^{1/2}$)

x = distancia tierra adentro desde la línea costera (m).

Estudios (e. g. Misra y Onlock, 1982) han mostrado que el factor de la TIBL, A , se encuentra en el intervalo de 2 a 6. En el modelo SCREEN3 para propósitos de una preevaluación, A es igualada a 6, ya que esto minimiza la distancia en la que la pluma intercepta a la TIBL y por lo tanto tiende a maximizar el valor estimado de la concentración.

La distancia donde se produce la concentración máxima a nivel del suelo se determina mediante la siguiente ecuación:

$$x_{max} = \left[\frac{(h_e + 2\sigma_{ze})}{6} \right]^2 - x_s \quad (25)$$

donde

x_{max} = la distancia viento abajo a la máxima concentración (m)

x_s = la distancia más corta de la fuente a la línea costera (m)

h_e = altura de la línea central de la pluma (m)

σ_{ze} = parámetro de la dispersión vertical que incluye la dispersión inducida por flotación (m)

La altura de la pluma basada en la suposición de una estabilidad F y una velocidad del viento de 2.5 m s^{-1} , y el parámetro de dispersión (σ_{ze}), incorporan los efectos de la dispersión inducida por flotación. Si x_{max} es menor de 200 m, entonces no se realiza ningún cálculo de fumigación costera, ya que la pluma aún puede estar influenciada por una elevación paulatina y su interacción con la TIBL es más difícil de modelar.

La concentración máxima debida a la fumigación costera, X_f , es calculada mediante la siguiente ecuación (Turners (1970)):

$$X_f = \frac{Q}{2\pi \cdot 0.5u(\sigma_{ye} + h_e/8)(h_e + 2\sigma_{ze})} \quad (26)$$

con los efectos de la dispersión inducida por flotación para σ_{ye} y σ_{ze} .

Aunque el cálculo de x_{max} toma en cuenta la distancia de la fuente a la línea costera en x_s , se debe tener precaución extra al interpretar los resultados al aumentar el valor de x_s . El uso de $A = 6$ en las ecuaciones (24) y (25) puede no ser conservador en estos casos, ya que habrá una mayor probabilidad de que la pluma sea simulada como estando dentro de la TIBL y por lo tanto la concentración debida al fenómeno de la fumigación costera no sea calculada. Un valor pequeño de A puede simular a la pluma como situada sobre la TIBL pudiendo esto predecir una concentración mayor de contaminantes a nivel del suelo.

3.5 The Air Pollution Model (TAPM)

En el Apéndice B, se describen los aspectos técnicos utilizados por el programa TAPM para el cálculo de las concentraciones de contaminantes. Se describe el componente meteorológico así como el componente de contaminación.

3.5.1 Limitaciones del TAPM

El modelo propuesto en esta tesis para estimar la dispersión mediante el uso del modelo TAPM presenta las siguientes limitaciones:

- TAPM es adecuado para dominios horizontales por debajo de los 1000 km por 1000 km. Generalmente no deberá ser usado para dominios mayores debido a que en las ecuaciones de este modelo se despreció la curvatura de la superficie de la tierra. El modelo se detendrá con un error si el dominio excede 1500 km por 1500 km.

- TAPM no puede ser usado para representar con precisión circulaciones atmosféricas grandes o eventos climáticos extremos debido a las razones planteadas arriba, así como por la suposición de incompresibilidad en el modelo y el hecho de que por arriba de los 5 km, los efectos no hidrostáticos no son representados.
- TAPM no puede ser usado para terrenos escarpados. El enfoque usado no puede representar discontinuidades en la altura del terreno (por ejemplo, desfiladeros o acantilados).
- TAPM supone que los procesos de las nubes son resueltos en los nodos de la malla interna usados en el modelo (3 km o menos). Por lo que la parametrización de la convección de las nubes a gran escala no esta incluida.

Capítulo 4

Resultados

4.1 La Central Termoeléctrica Presidente Plutarco Elías Calles (CTPPEC)

En esta tesis se propone como ejemplo ilustrativo del fenómeno de fumigación costera a la CTPPEC ya que debido a su ubicación geográfica, condiciones atmosféricas, así como a sus condiciones de operación es probable que genere episodios de fumigación costera. Sin embargo, para mostrar con mayor claridad el fenómeno de fumigación costera, se supuso un cambio en la altura de las chimeneas, de 120 m a 60 m. Mediante este cambio se buscó reducir la sensibilidad del Modelo de Pluma Gaussiano a pequeños cambios en las desviaciones estándar vertical y horizontal de la pluma así como en la altura de la TIBL ya que la tasa de crecimiento de esta capa con la distancia es muy pequeña en el punto donde la pluma la intercepta (Navarro, 2008).

La CTPPEC se encuentra en municipio La Unión, Guerrero, en la localidad de Petacalco, en la costa del Océano Pacífico, a 15 km de Lázaro Cárdenas, Michoacán. Esta Central utiliza carbón importado como combustible principal, combustóleo pesado como combustible alternativo y diesel para los arranques. La CTPPEC es una Central "Dual" debido a que sus unidades generadoras cuentan con quemadores de combustible diseñados para poder quemar carbón y también combustóleo.

Esta central cuenta con seis unidades generadoras en operación, con una capacidad nominal de 350 MW cada una, produciendo así un total de 2.1 GW. De las 6 unidades en operación, 5 funcionan a base de carbón y una a base de combustóleo.

4.2 Condiciones de operación

En la Tabla 3 se muestran las condiciones de operación de la CT: el número de chimeneas por unidad de generación, su geometría, tipo de combustible, la altura modificada y las tasas de emisión. La CTPPEC opera en 5 unidades con carbón y en la unidad restante con combustóleo.

Las tasas de emisión se estimaron a partir de la información que proporcionó el Departamento de Operación de la central (monitoreos en chimenea). Los monitoreos en chimenea abarcan un período desde febrero de 2000 a diciembre de 2001, con un promedio de 2.5 mediciones por mes, para cada contaminante.

Tabla 3 Condiciones de operación

Unidad (Combustible)	Altura de chimenea (m)	Diámetro (m)	Tasa de emisión NO _x (g/s)	Tasa de emisión SO ₂ (g/s)	Velocidad de los gases (m/s)	Temperatura de salida (K)
1-5 (Carbón)	60	6	155.6	777.6	22.37	432
6 (Combustóleo)	60	6	181.2	1 813.68	19.00	432

4.3 Escenario propuesto

Con el propósito de ejemplificar la bondad del Modelo de Pluma Gaussiano y TAPM, se propone un escenario crítico en verano con el fin de determinar los perfiles de concentraciones a nivel del suelo.

El escenario de verano se supone crítico debido a que en verano la cantidad de radiación solar que recibe la tierra es muy alta, provocando así el rápido crecimiento de la capa límite térmica interna. Este crecimiento provoca, como ya se ha explicado anteriormente, fuertes movimientos convectivos generando altas concentraciones de contaminantes a niveles del suelo.

Analizando el Modelo de Pluma Gaussiano, se observa que la concentración de contaminantes a nivel del suelo, depende de las condiciones de operación de la CTPPEC, así como de las siguientes condiciones meteorológicas: velocidad y dirección del viento, gradiente vertical de temperatura potencial del aire sobre el agua, flujo superficial de calor y tipo de estabilidad atmosférica. De lo anterior se

puede comprobar que en verano es más probable que sucedan episodios de fumigación costera. Al correr la simulación en el modelo TAPM para el año 2003, tal y como se esperaba, uno de los días para el que se encontraron los valores más altos de concentración a nivel del suelo fue el 9 de agosto a las 12 horas. Con base a lo anterior, se propuso, en esta tesis, este día para su estudio.

En la Figura 2 se muestra la rosa de vientos correspondientes a dicho día.

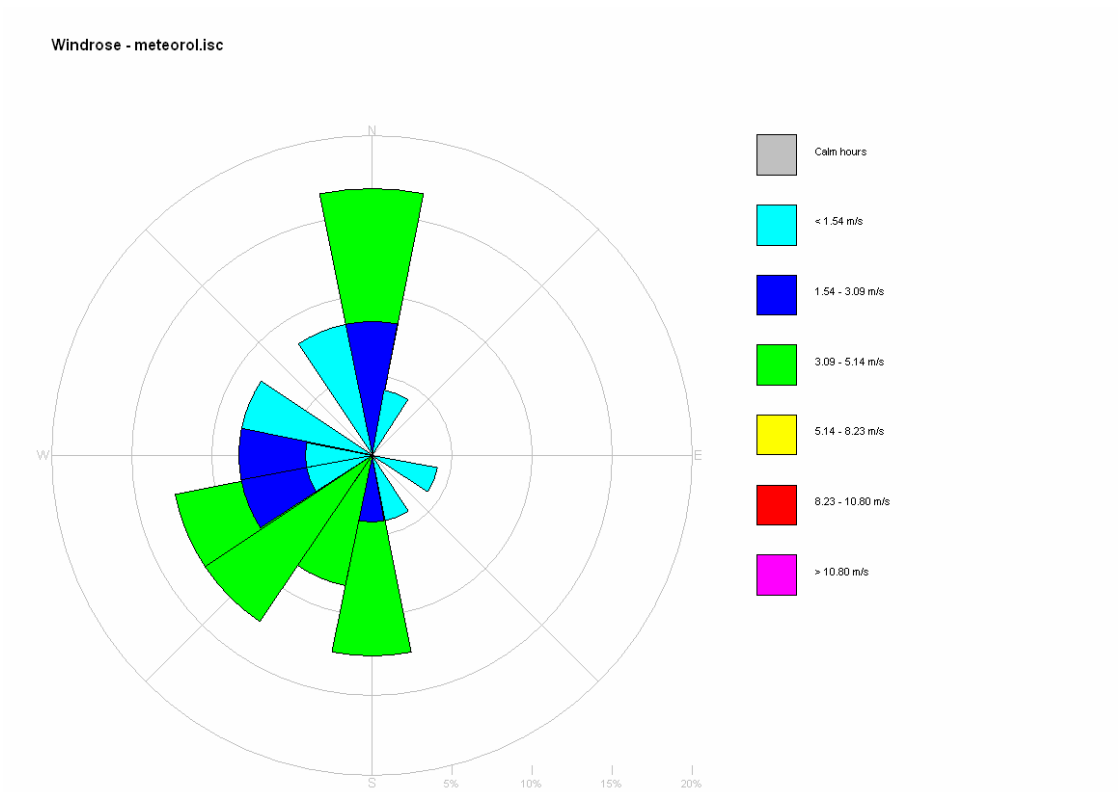


Figura 2. Rosa de vientos 9 de agosto de 2003

4.4 Resultados del Modelo de Pluma Gaussiano

4.4.1 Datos característicos de la CTPPEC

Las constantes utilizadas para realizar la simulación en el Modelo de Pluma Gaussiano fueron: $\bar{\rho}=1.194$ [kg m⁻³], $c_p=1005$ [J K⁻¹ kg⁻¹], $tiempo=1$ [h], $h_s=60$ [m], $r_s=3$ [m], $g=9.81$ [m s⁻²], $\Gamma=0.0098$ [K m⁻¹], $R/C_p=0.286$, $n=0.42$, $R=287.04$ [J K⁻¹ kg⁻¹], $z=0$ [m], $p=101325$ [Pa], $z_2=999$ [m],.

En la Tabla 4 se muestran los valores de la velocidad del viento a 10 m de altura (\bar{u}), el gradiente vertical de temperatura potencial del aire sobre el agua (γ), el flujo superficial de calor (H_o), el tipo de estabilidad Pasquill en la zona de emisión, las temperaturas (T , T_2) y presiones parciales de vapor (e , e_2) a las alturas de referencia z y z_2 . Estas variables se determinaron mediante mediciones satelitales y estaciones meteorológicas.

Tabla 4 Variables de entrada correspondientes al 9 de agosto de 2003 a las 12:00 hrs

Variable	Valor	Variable	Valor
\bar{u}	2.4 [m/s]	T	302.55 [K]
γ	0.01 [K m ⁻¹]	T_2	294.85[K]
Estabilidad Pasquill	A	e	4016 [Pa]
H_o	88.9 [W/m ²]	e_2	2597 [Pa]

4.4.2 EES (*Engineering Equation Solver*)

Con el fin de resolver el sistema de ecuaciones y graficar los resultados generados mediante la simulación del Modelo de Pluma Gaussiano, se utilizó el programa EES (<http://www.fchart.com/ees/ees.shtml>).

La función básica para la cual fue utilizado este programa fue la solución de sistemas de ecuaciones algebraicas. Sin embargo, EES también puede resolver ecuaciones diferenciales, ecuaciones con variables complejas, realizar optimaciones, regresiones lineales y no lineales, generar gráficas con calidad de publicación, simplificar análisis de incertidumbre y puede hacer animaciones.

En este programa, se simuló un dominio de cálculo de 20 x 8 km en una malla de 50 x 20 nodos con un espaciamiento entre ellos de 400 m.

En este programa se diseñó una interfase gráfica (Figura 3) mediante la cual, el usuario, es capaz de introducir de manera ordenada y rápida los datos requeridos por el modelo para comenzar la simulación. Al terminar la simulación, los resultados obtenidos también son mostrados en esta interfase. Este programa se incluye en el CD anexo en la tesis.

Las diferencias entre EES y los programas existentes para la resolución numérica de sistemas de ecuaciones fueron explicadas por Navarro, (2008). En este caso EES se muestra particularmente útil para problemas de diseño en el que los efectos de uno o más parámetros deben ser determinados.

En el Apéndice A se muestra y describe el código programado en EES utilizado para obtener los perfiles de concentraciones de NO_x y SO_2 .

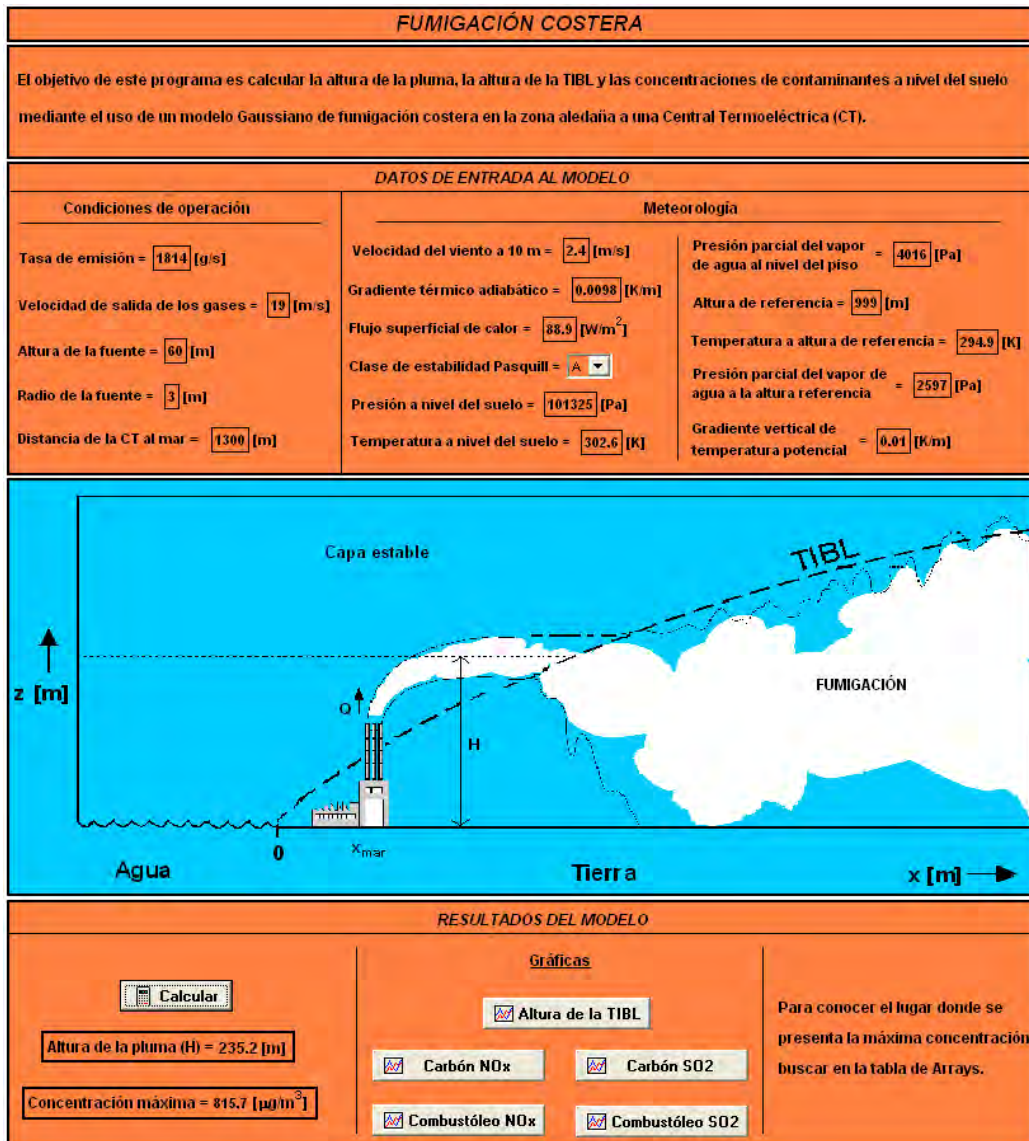


Figura 3. Interfase gráfica EES

4.4.3 Resultados

A continuación se muestran las concentraciones máximas y las distancias a las que éstas ocurren para los dos tipos principales de contaminantes emitidos (NO_x y SO₂), así como las distribuciones de concentración obtenidas.

4.4.3.1 Concentraciones de NO_x

En la Tabla 5 se muestran los valores máximos de las concentraciones de NO_x obtenidas.

Tabla 5 Concentraciones máximas de NO_x.

Unidad (Combustible)	Concentración máxima de NO _x		Distancia a la que se presenta [km]
	[μg/m ³]	[ppm]	
1 - 5 (Carbón)	65.09	0.03459	6.1
6 (Combustóleo)	83.69	0.04447	
Total	409.14	0.21742	

En las Figuras 4 y 5 se muestran los perfiles de concentración a nivel del suelo para las emisiones de NO_x. El eje x corresponde a la distancia tierra adentro en dirección del viento a partir de la fuente, y el eje y corresponde a la distancia en el eje lateral de la pluma.

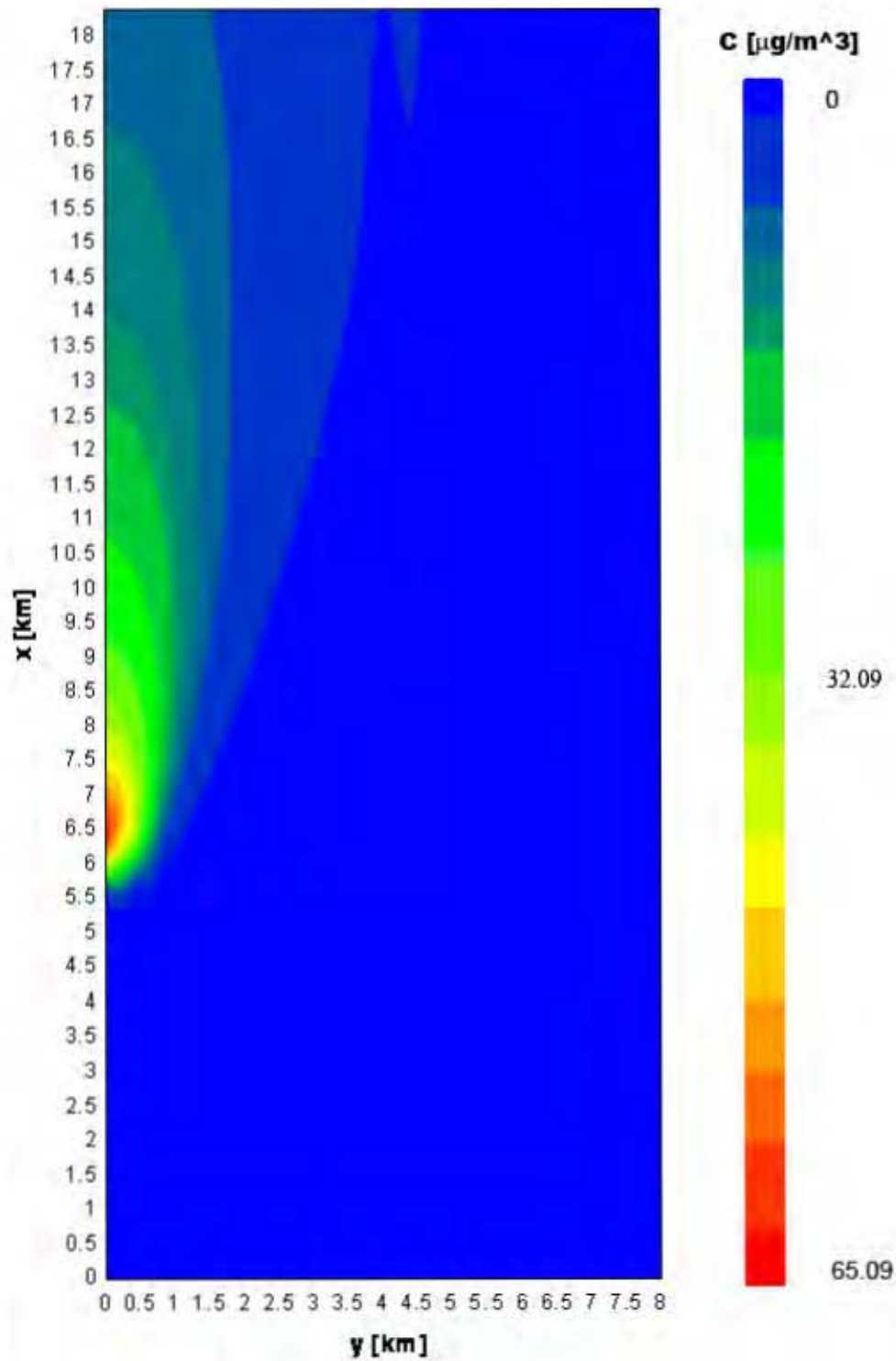


Figura 4 Concentración de NO_x [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] a nivel del suelo debida a las emisiones de una unidad de carbón.

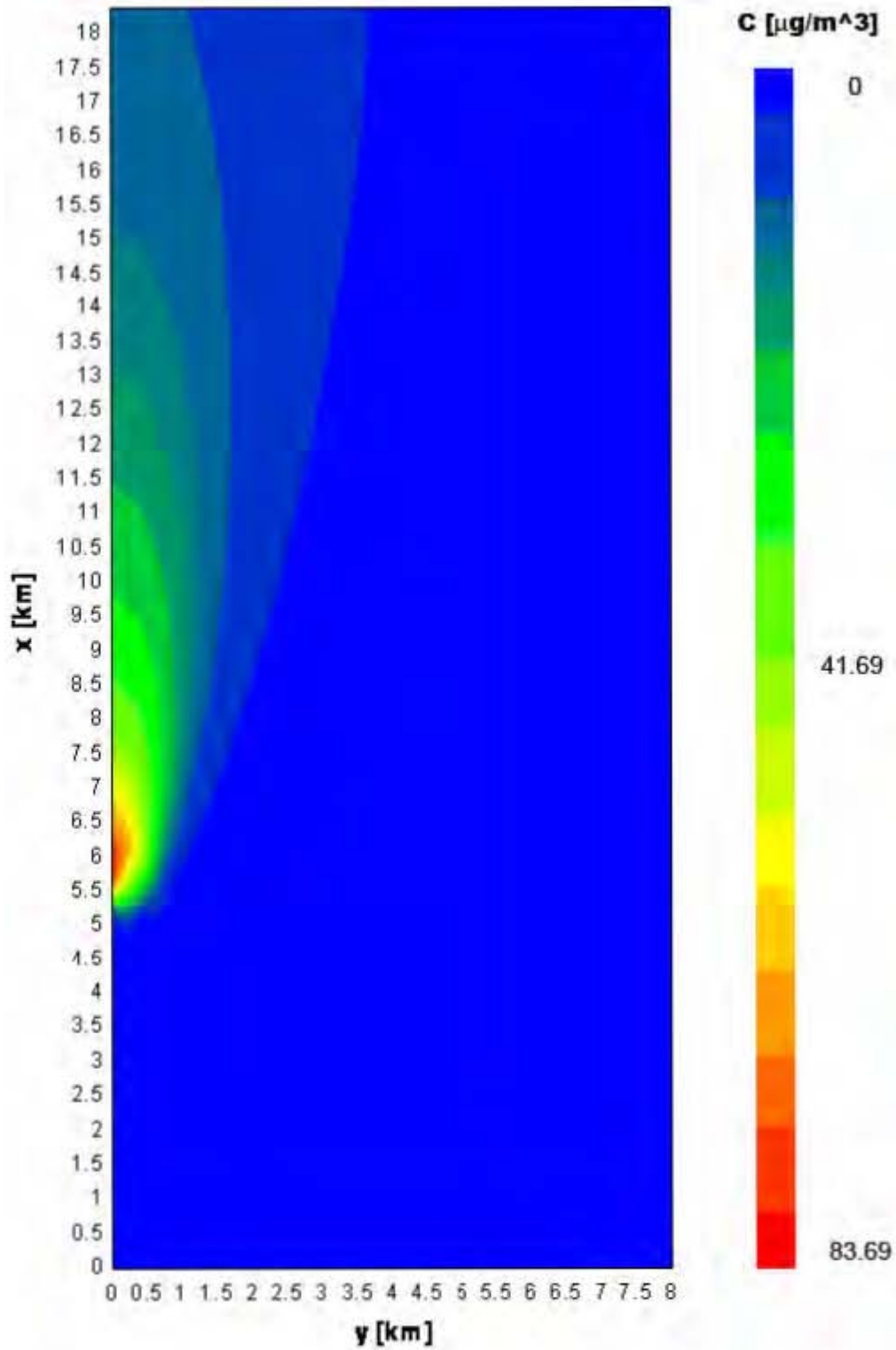


Figura 5 Concentración de NO_x [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] a nivel del suelo debida a las emisiones de la unidad de combustóleo.

4.4.3.2 Concentraciones de SO₂

En la Tabla 6 se muestran los valores máximos de las concentraciones de SO₂ obtenidas.

Tabla 6 Concentraciones máximas de SO₂

Unidad (Combustible)	Concentración máxima de SO ₂		Distancia a la que se presenta [km]
	[µg/m ³]	[ppm]	
1 - 5 (Carbón)	325.4	0.12	6.1
6 (Combustóleo)	840.1	0.32	
Total	2467.1	0.92	

En las Figuras 6 y 7 se muestran los perfiles de concentración a nivel del suelo para las emisiones de SO₂. El eje x corresponde a la distancia tierra adentro en dirección del viento a partir de la fuente, y el eje y corresponde a la distancia en el eje lateral de la pluma.

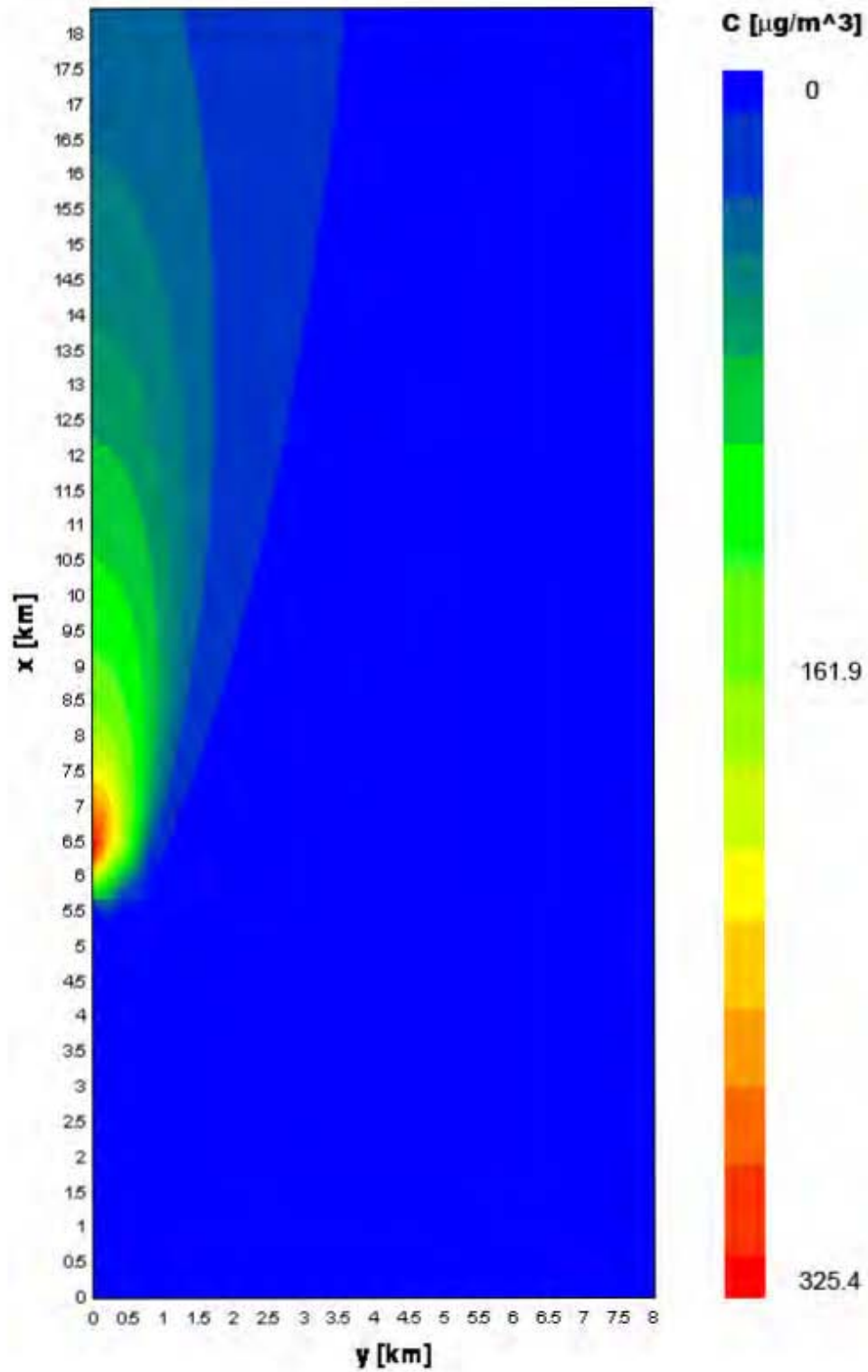


Figura 6 Concentración de SO₂ [µg/m³] a nivel del suelo debida a las emisiones de una unidad de carbón.

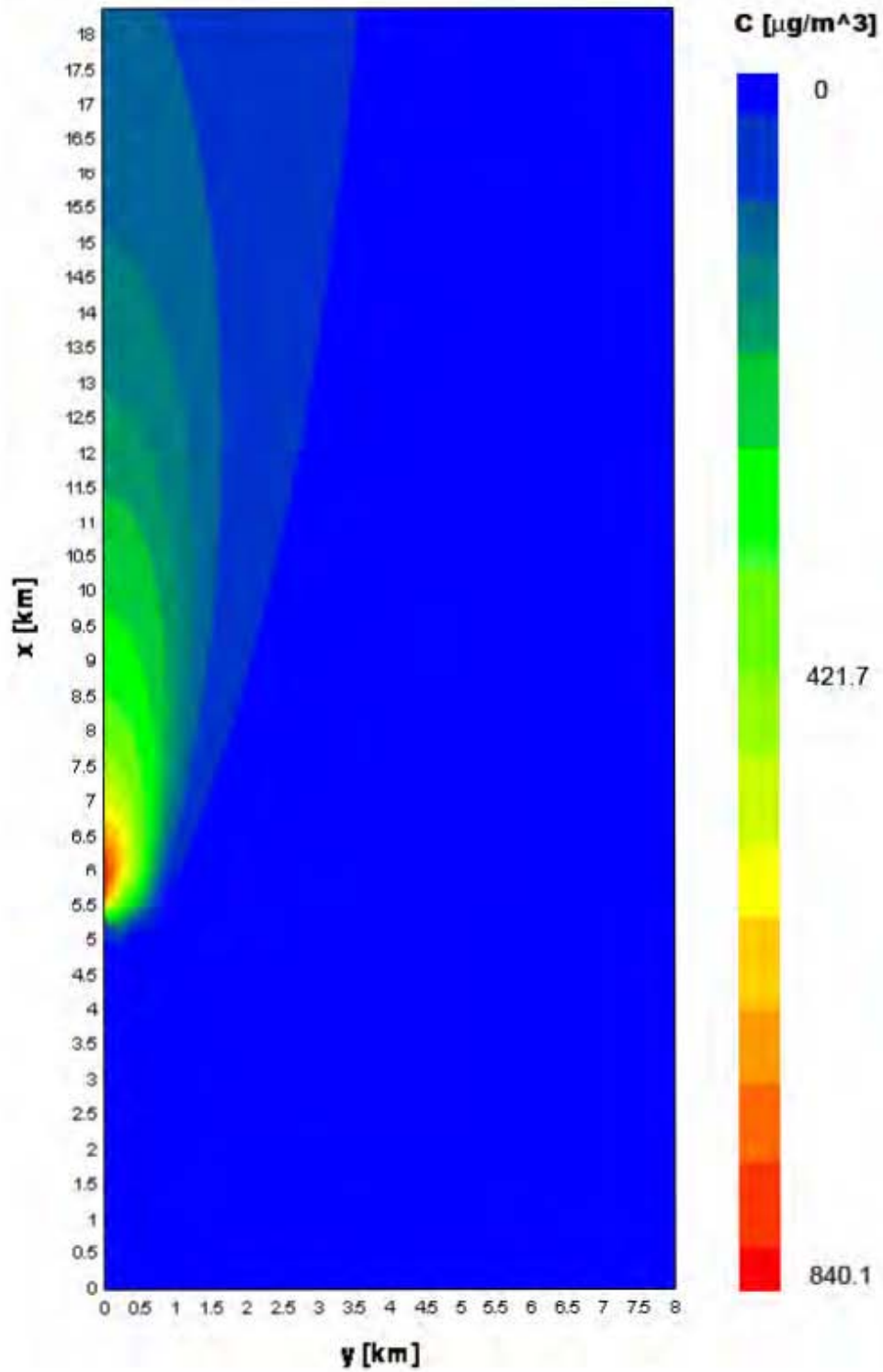


Figura 7 Concentración de SO_2 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] a nivel del suelo debida a las emisiones de la unidad de combustóleo.

4.4.3.3 Resumen de resultados Modelo de Pluma Gaussiano

En la siguiente sección, se muestran, en resumen, los resultados obtenidos por el Modelo de Pluma Gaussiano. Se puede observar de la Tabla 7 que se sobrepasaron los límites establecidos por la Norma Oficial Mexicana NOM-023-SSA1-1993 así como por los estándares de calidad del aire de California, EU.

Tabla 7 Resumen de resultados. Modelo de Pluma Gaussiano.

Unidad (Combustible)	Concentración de NO_x [ppm]	Concentración de SO₂ [ppm]	Distancia a la que se presenta [km]
1 - 5 (Carbón)	0.035	0.12	6.1
6 (Combustóleo)	0.044	0.32	
Total	0.22	0.92	
Concentración máxima según Norma [ppm]			
Norma	0.21	0.25	
% Exceso	105	368	

El tiempo de cálculo para el caso del Modelo de Pluma Gaussiano fue aproximadamente de un minuto en una computadora Pentium D CPU 2.80 GHz con 1 GB de RAM.

4.5 Resultados del modelo SCREEN3

El modelo SCREEN3 fue desarrollado para proveer un método simple para obtener estimados de concentraciones de contaminantes. Al tomar ventaja del rápido crecimiento del uso y disponibilidad de computadoras personales, el modelo SCREEN3 hace accesibles los cálculos a un gran rango de usuarios.

4.5.1 Datos de entrada

EL modelo SCREEN3 ofrece una interfase gráfica que realiza ciertas preguntas con el fin de obtener la información de entrada necesaria para comenzar la simulación.

La primera ventana de esta interfase es la pantalla donde se pregunta el título que se desea poner a la simulación. Esta ventana se puede ver en la Figura 8.



Figura 8 Nombre del modelo

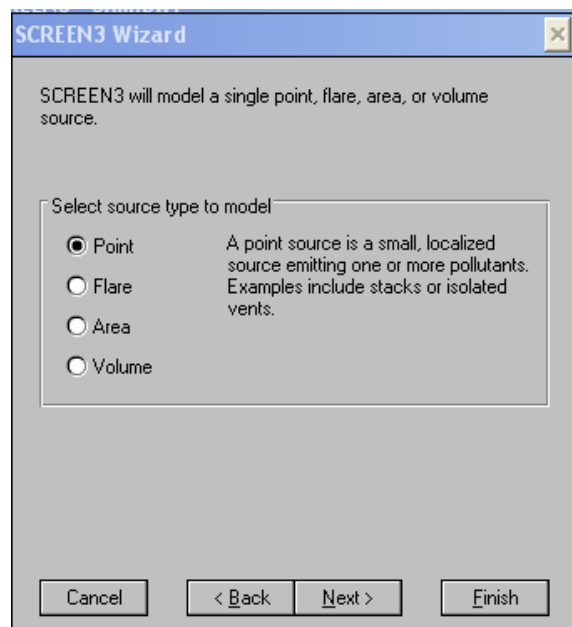


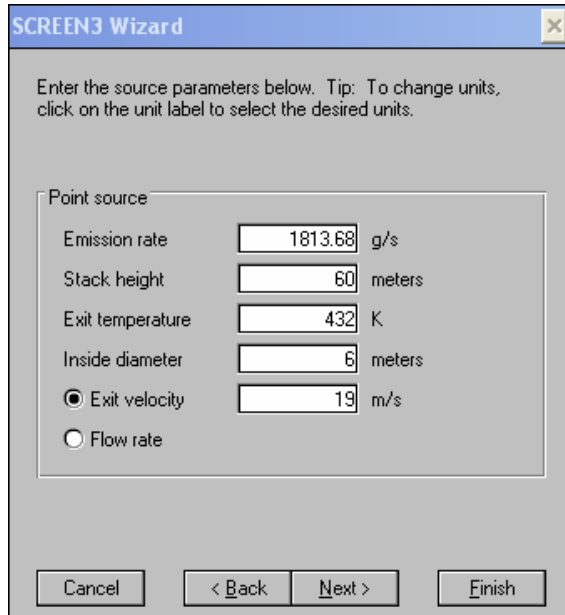
Figura 9 Tipo de fuente

A continuación se pregunta el tipo de fuente que se va a simular (Figura 9). Para esta simulación se seleccionó una fuente de tipo puntual.

Una vez seleccionado el tipo de fuente, el modelo SCREEN3 necesita los parámetros de la fuente. En este caso se introdujeron los datos que corresponden a una chimenea que funciona a base de combustóleo para calcular las concentraciones de SO₂. Estos datos se pueden observar en la Figura 10.

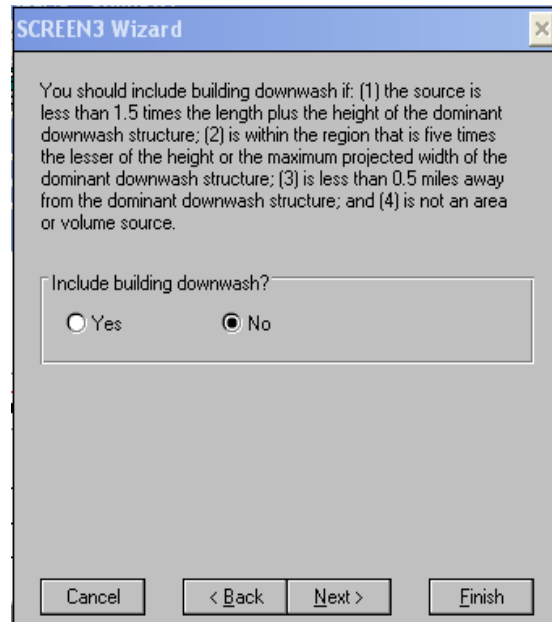
Una vez que están introducidos los parámetros de la fuente, el modelo SCREEN3 pregunta si se desea incorporar los efectos de las edificaciones para los cálculos (Figura 11). En este caso se seleccionó la opción de que no se consideren estos efectos, ya que:

- La altura de la fuente es mayor que 1.5 veces la altura de la estructura dominante.
- La fuente está fuera de la región que es cinco veces la menor de las alturas o el ancho máximo proyectado de la estructura dominante.
- La fuente se ubica a más de 0.5 millas de la estructura dominante.



The screenshot shows the 'SCREEN3 Wizard' dialog box with the title bar. The main text reads: 'Enter the source parameters below. Tip: To change units, click on the unit label to select the desired units.' Below this, there is a section titled 'Point source' containing several input fields: 'Emission rate' with the value '1813.68' and unit 'g/s'; 'Stack height' with the value '60' and unit 'meters'; 'Exit temperature' with the value '432' and unit 'K'; 'Inside diameter' with the value '6' and unit 'meters'; and 'Exit velocity' with the value '19' and unit 'm/s'. There are also radio buttons for 'Exit velocity' (which is selected) and 'Flow rate'. At the bottom, there are buttons for 'Cancel', '< Back', 'Next >', and 'Finish'.

Figura 10 Parámetros de la fuente



The screenshot shows the 'SCREEN3 Wizard' dialog box with the title bar. The main text reads: 'You should include building downwash if: (1) the source is less than 1.5 times the length plus the height of the dominant downwash structure; (2) is within the region that is five times the lesser of the height or the maximum projected width of the dominant downwash structure; (3) is less than 0.5 miles away from the dominant downwash structure; and (4) is not an area or volume source.' Below this text is a section titled 'Include building downwash?' with two radio buttons: 'Yes' and 'No'. The 'No' radio button is selected. At the bottom, there are buttons for 'Cancel', '< Back', 'Next >', and 'Finish'.

Figura 11 Efectos de edificaciones

En siguiente ventana (Figura 12) se selecciona que el programa proponga automáticamente un dominio con cierto número de nodos y con cierta separación o, como fue este caso, la opción de ponerlos manualmente.

La siguiente ventana mostrada, es la ventana donde se seleccionan manualmente las distancias para las que este modelo estimará los valores de las

concentraciones, así como las alturas a las que ocurren (Figura 13). En este caso se seleccionaron 41 nodos con una distancia de separación entre ellos de 500 m al nivel del suelo con el fin de abarcar una distancia total de 20 km a partir de la fuente.

La siguiente información que pide el modelo es la selección de la meteorología. En la Figura 14 se muestran las tres opciones a escoger. En este caso se utilizó la opción de meteorología completa debido a que se desea que SCREEN3 calcule el caso del peor escenario.

A continuación (Figura 15) el modelo SCREEN3 requiere el promedio anual de la temperatura ambiente y la altura del anemómetro (opcional). Este modelo sugiere que en el caso de que no se conozca la temperatura promedio anual se tome ésta como de 273 K. En este caso, debido a que no se conoce esta temperatura, se le asignó el valor de 273 K.

La siguiente información requerida por el modelo, es la selección del tipo de los coeficientes de dispersión. En este caso se seleccionaron de tipo rural (Figura 16).

Como paso siguiente el modelo pregunta el tipo de opción para calcular la altura de mezclado (Figura 17). Para calcular la altura de mezclado basada en la altura de la pluma calculada, la altura del anemómetro y un factor dependiente de la estabilidad que es comparado con la altura mínima de mezclado dependiente de la estabilidad se debe seleccionar la opción de *non-regulatory Brode 2*. Para esta simulación se seleccionó la opción de *Regulatory default*.

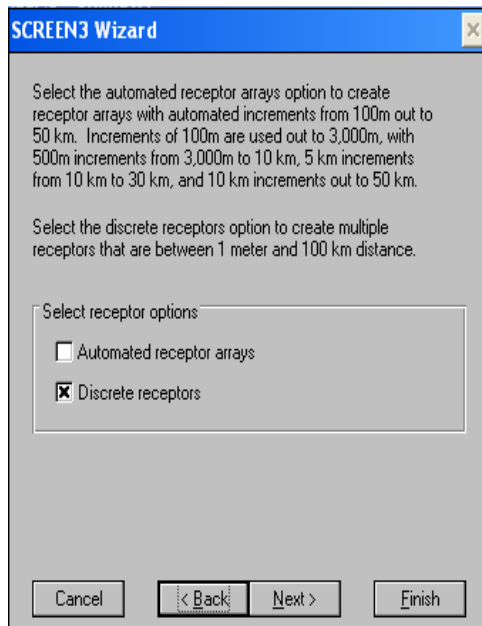


Figura 12 Opciones de los arreglos

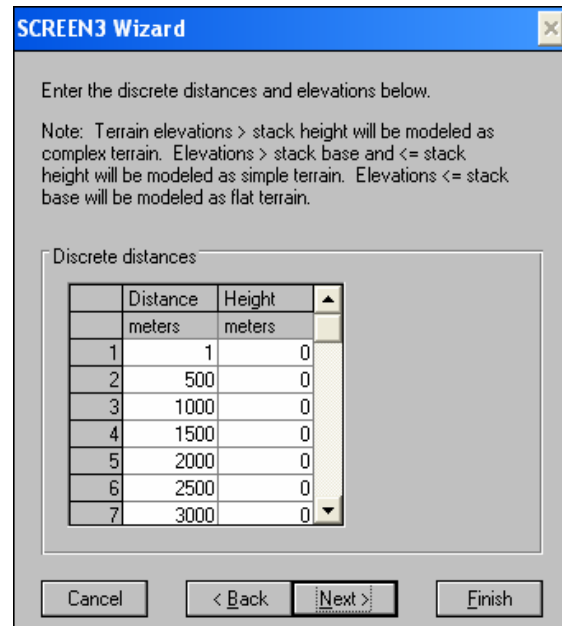


Figura 13 Distancias y alturas a simular

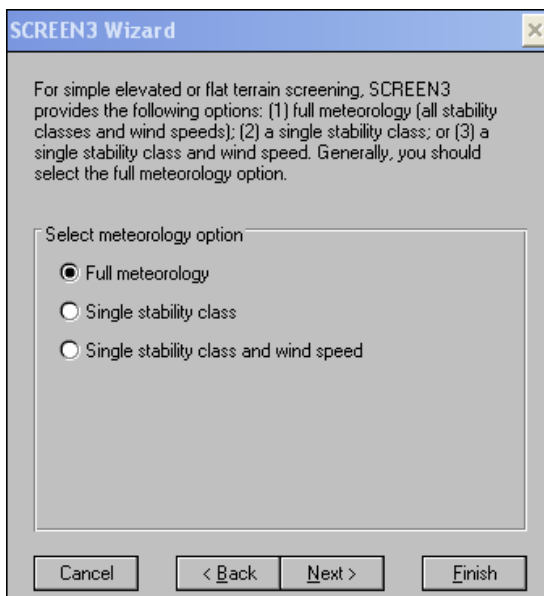


Figura 14 Opciones de la meteorología

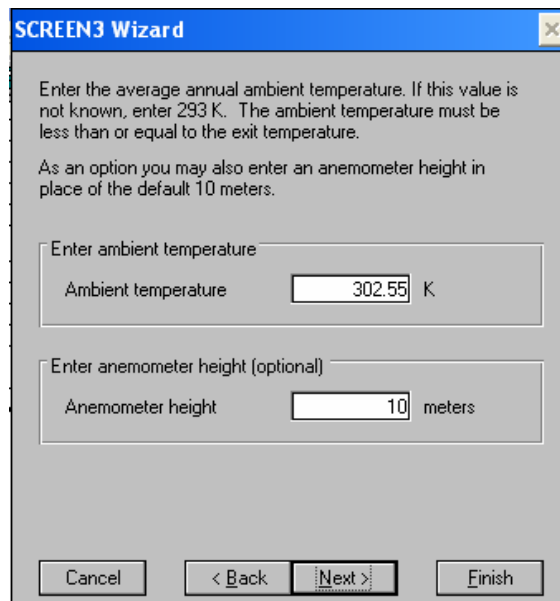


Figura 15 Temperatura promedio

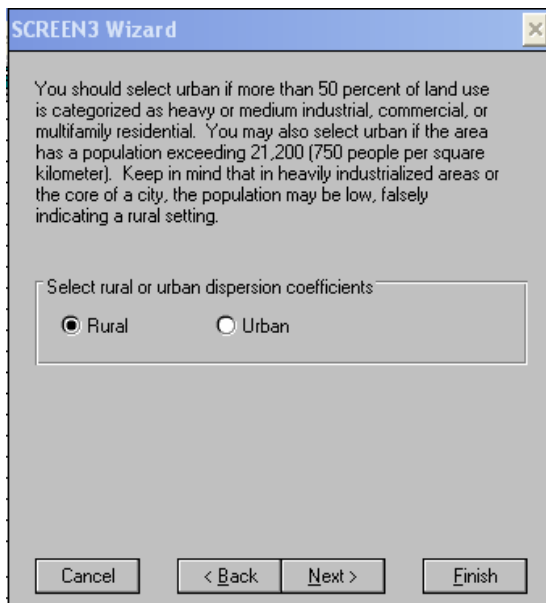


Figura 16 Tipo de coeficientes de dispersión

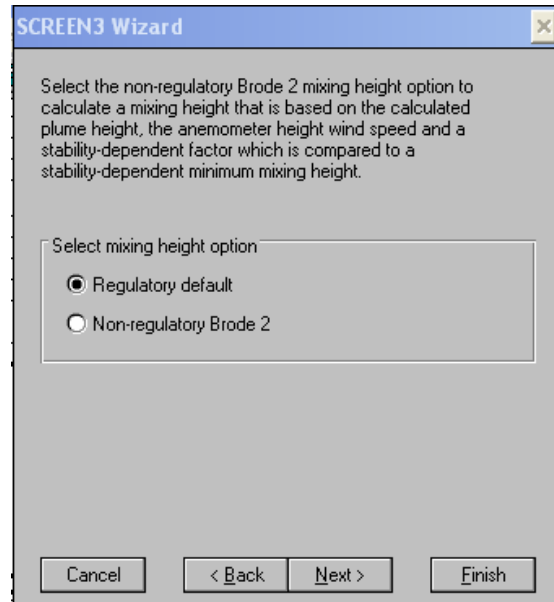


Figura 17 Altura de mezclado

Como paso siguiente, se debe seleccionar el tipo de fumigación (Figura 18). En este caso, al tratarse de un entorno costero donde se cumplen los requisitos para la posible existencia del fenómeno de fumigación costera, se seleccionó esta opción y se introdujo el valor de la distancia de la CTPPEC a la línea costera, la cual para este caso fue de 1300 m.

La última ventana que el modelo SCREEN3 presenta, nos sirve para comenzar la simulación y desplegar los resultados (Figura 19).

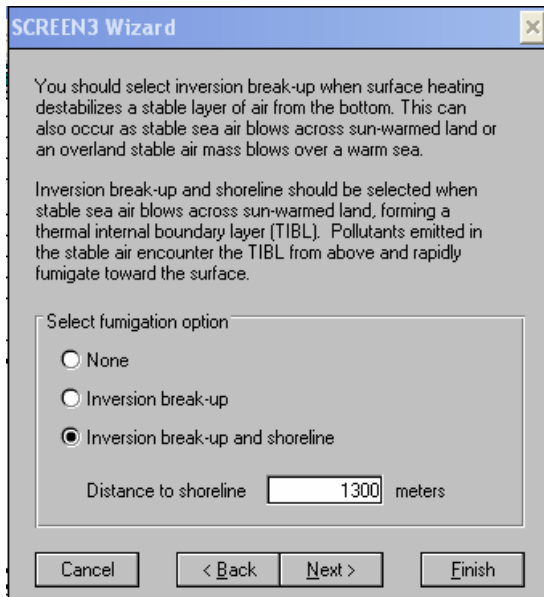


Figura 18 Tipo de fumigación

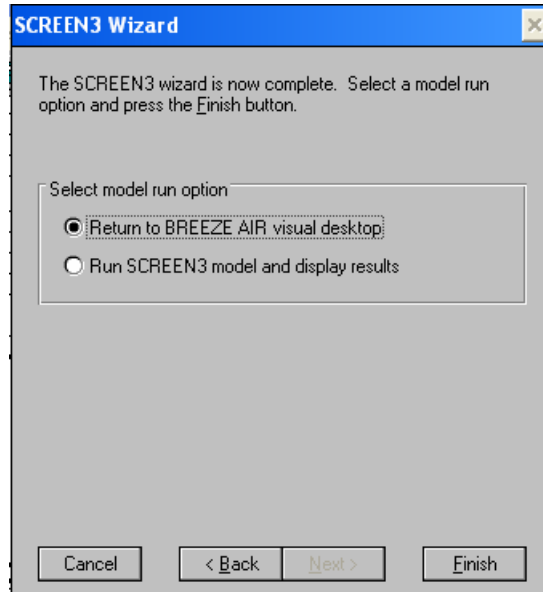


Figura 19 Pantalla final

4.5.2 Resultados

Al simular, el modelo SCREEN3, predice que la altura de la pluma es menor que la altura de la TIBL para una distancia a partir de la costa de 1300 m, lugar que corresponde a la ubicación de la CTPPEC, por lo que no realizó ningún cálculo de fumigación costera. Este resultado es debido a que el factor de la TIBL que contiene las constantes físicas para la parametrización de la TIBL (A) es igual a 6. El valor de A no es conservador en este caso y no representa con realismo el crecimiento que tiene la TIBL con la distancia. Para distancias menores a los 1200 m SCREEN3 es capaz de realizar los cálculos para el fenómeno de Fumigación costera. Se puede concluir que SCREEN3 predice una tasa de crecimiento de la capa límite térmica interna mayor a la que predice el Modelo de Pluma Gaussiano. Por lo anterior, SCREEN3 predecirá la concentración máxima en una distancia menor a lo predicho por el Modelo de Pluma Gaussiano. Para ejemplificar lo anterior, se graficó el perfil de concentraciones de SO_2 a nivel del suelo sobre la línea central de la pluma para una unidad que funciona a base de combustóleo con un valor de $A=6$ en la

Figura 20 (modelo SCREEN3) y con $A=2.887$ en la Figura 21 (Modelo de Pluma Gaussiano).

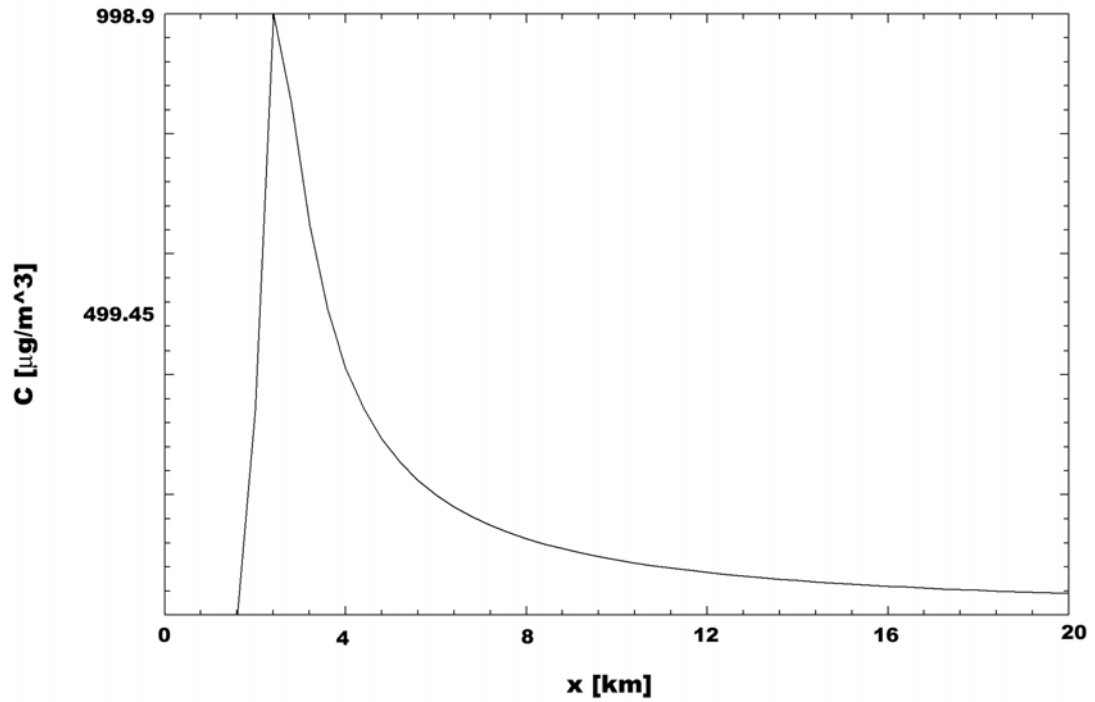


Figura 20 Concentración de contaminantes con $A=6$ (modelo SCREEN3).

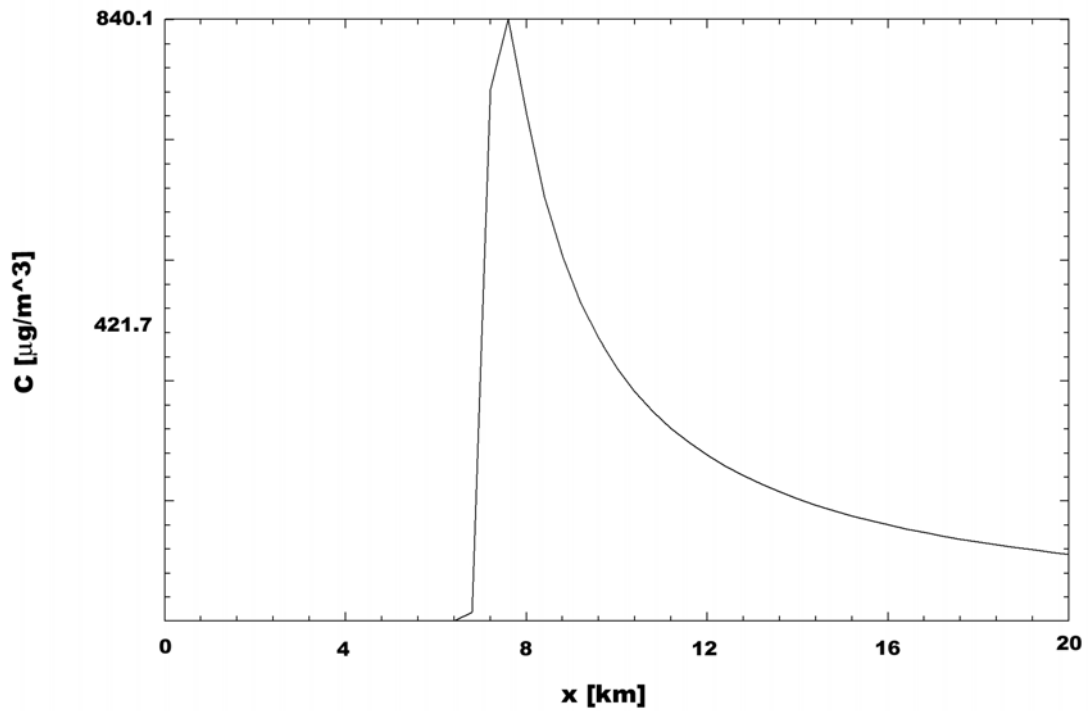


Figura 21 Concentración de contaminantes con $A=2.887$ (Modelo de Pluma Gaussiano).

4.6 Resultados del modelo TAPM

4.6.1 Datos de entrada

Se utilizó la interfase gráfica del modelo TAPM (TAPM_GUI) para introducir las condiciones meteorológicas del sitio, así como las condiciones de operación de la Central Termoeléctrica. En la Figura 22 se puede observar la ventana principal de esta interfase.

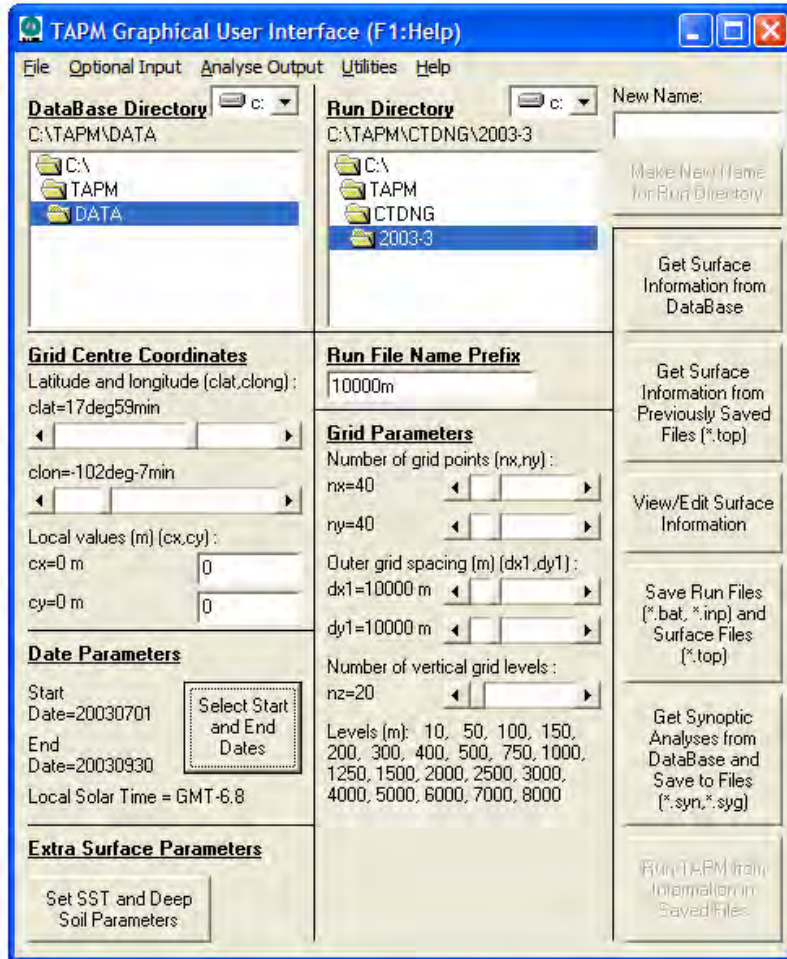


Figura 22 TAPM_GUI.

A continuación se describen las secciones de esta ventana:

- El **DataBase Directory** es donde se guardaron los datos de entrada (terreno, meteorología, etc.).
- La sección de **Grid Centre Coordinates** requiere de la selección de las coordenadas de latitud y longitud correspondientes al centro de las mallas que son puestas en la sección de **Grid Parameters**. En este caso se utilizaron las coordenadas geográficas de la CTPPEC.
- La sección de **Date Parameters** establece las fechas de inicio y final de la simulación. Se corrió el modelo para los 4 trimestres del año

2003 con el fin de acortar el tiempo de la corrida. Se utilizó una computadora Pentium D CPU 2.80 GHz con 1 GB de RAM. La simulación tardó 24 h aproximadamente.

- La sección de **Run Directory** especifica donde se guardan los archivos de entrada puestos en el TAPM_GUI, así como los archivos de salida obtenidos al correr el modelo.
- En la sección de **Run File Name Prefix** se especifica el prefijo usado para nombrar la malla externa en varios archivos de entrada, así como de salida.
- La sección de **Grid Parameters** especifica el número de nodos en la dirección x y y , el espaciamiento de la malla externa (m) en estas direcciones y el número (predeterminado) de nodos en la dirección vertical. Se utilizaron 40 x 40 nodos en el plano horizontal con una separación entre ellos de 10 km, así como 20 nodos en el eje vertical para la malla exterior.
- El botón de **Get Surface Information from Database** extrae la altura del terreno, el tipo de vegetación y el tipo de suelo de los archivos contenidos en el **DataBase Directory**. Alternativamente se puede usar el botón de **Get Surface Information from Previously Saved Files (*.top)** para llamar a esta información.
- El botón de **View/Edit Surface Information** permite ver y editar la información de la superficie.
- El botón de **Save Run Files (*.bat, *.inp) and Surface Files (*.top)** salva estos archivos en el **Run File Directory** usando los prefijos previamente acordados.
- El botón de **Get Synoptic Analyses from Database and Save to Files (*.syn, *.syg)** accede a los análisis de meteorología sinóptica y temperatura de la superficie del mar localizados en el **DataBase Directory**.

Una vez configurada la ventana principal del TAPM_GUI, se procede a configurar las entradas opcionales de meteorología y contaminación del modelo. Las entradas opcionales de la meteorología se pueden ver en la Figura 23.

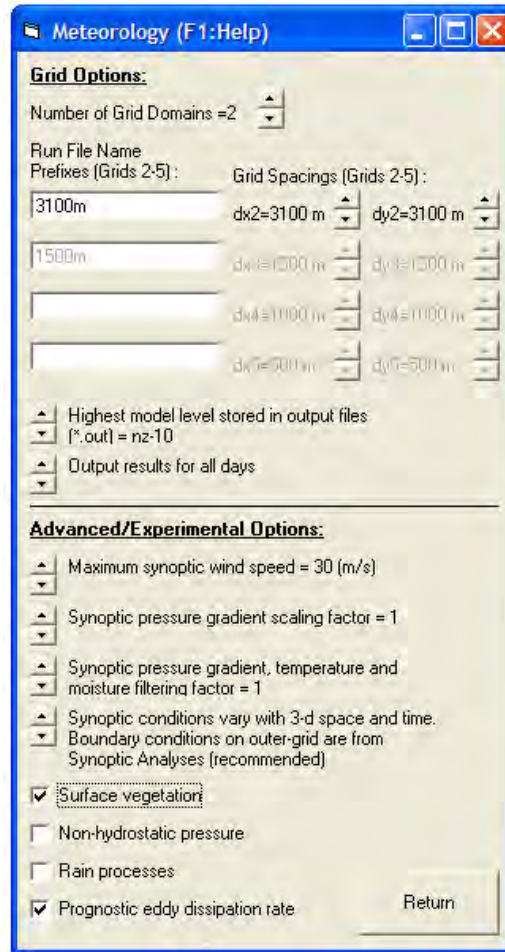


Figura 23 Entradas opcionales de la meteorología.

En la Figura 23 se puede ver la sección de **Grid Options**. Esta sección controla las opciones de anidamiento de malla para una simulación anidada y especifica el número de niveles del modelo a ser guardados en el archivo de salida. En este caso se utilizó una malla anidada con una separación entre nodos de 3.1 km. En la sección **Advanced/Experimental Options** se pueden

observar los controles de algunas características extras del modelo. La primera es la velocidad sinóptica máxima del viento, la cual deberá ser modificada si la velocidad sinóptica del viento mayor a la sugerida (30 m s^{-1}) es importante para la simulación en particular. Las siguientes dos opciones permiten un escalamiento y filtro de los análisis sinópticos y solamente necesitan ser modificadas si los resultados indican que el gradiente sinóptico de presiones necesita ser escalado en magnitud o si la meteorología sinóptica necesita ser filtrada (suavizada) en el tiempo. La siguiente opción controla la manera en que los análisis sinópticos son usados por el modelo. La opción que sigue controla el tipo de suelo a considerar en el esquema de superficie. La opción no-hidrostática necesita ser seleccionada cuando el espaciamiento entre nodos es menor a los 1000 m, si el terreno es escarpado y si los vientos son fuertes. Los procesos de lluvia son importantes si el agua de lluvia o los procesos de deposición húmeda son importantes. Nótese que el agua de lluvia en el modelo no tiene efectos en el contenido de humedad en las capas profundas de la superficie de la tierra. La opción de usar una ecuación para la predicción de la tasa de disipación viscosa en el esquema de turbulencia es la opción predeterminada, sin embargo puede ser desactivada si se prefiere una escala de longitud (Hurley, 2002). El esquema de escala de longitud es más rápido de simular, pero el esquema de pronóstico generalmente provee mejores predicciones de la turbulencia.

Las entradas opcionales de la contaminación se pueden ver en la Figura 24.

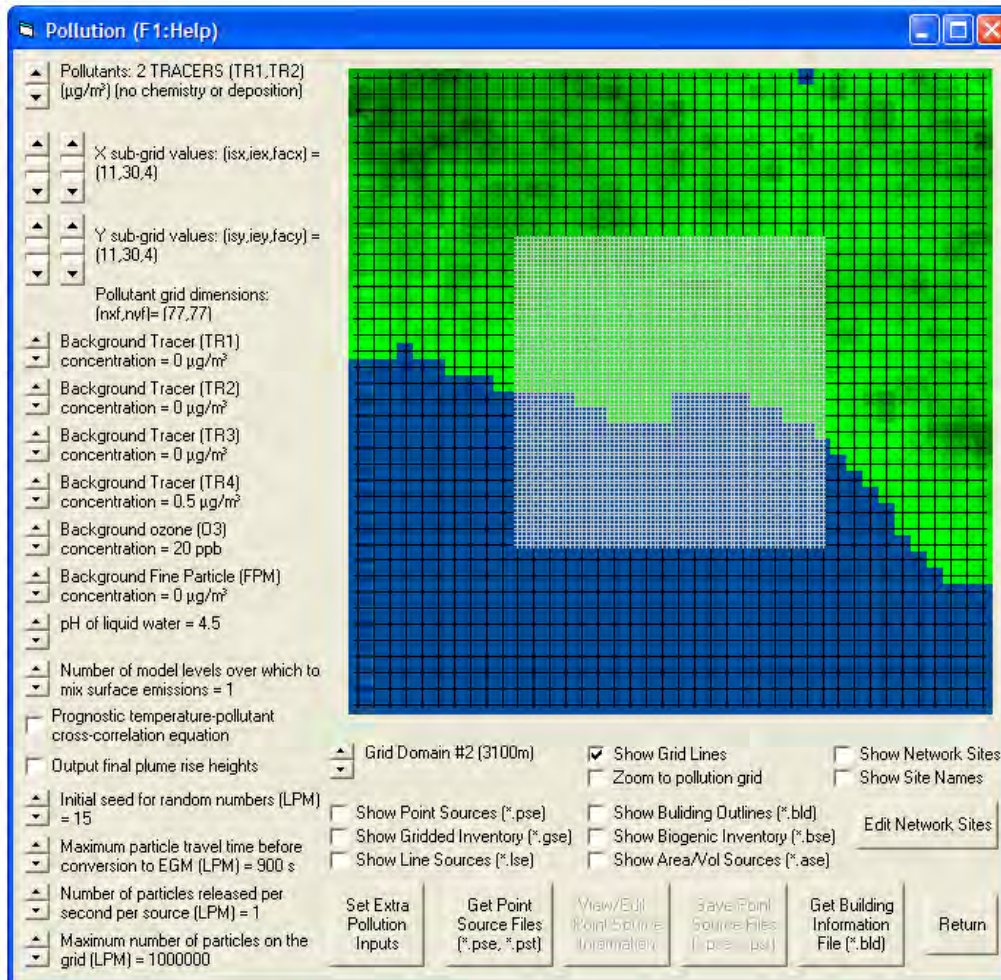


Figura 24 Entradas opcionales de la contaminación.

En la parte superior izquierda de la Figura 24 se muestran los contaminantes que serán simulados por el modelo. En este caso se utilizó el módulo de trazador para dos contaminantes. Este módulo no incluye los procesos de deposición o de reacciones químicas. Las concentraciones de contaminantes predichas son mostradas en $\mu\text{g m}^{-3}$.

El siguiente grupo de opciones mostradas en la Figura 24 permite la selección de la malla de contaminación. Esta malla puede ser la misma que la de meteorología, pero en este caso se utilizó una malla de 77 x 77 nodos con un espaciamiento entre ellos de 775 m para cubrir un área de 60 x 60 km. Lo

anterior es debido a que se requiere conocer la distribución de concentraciones con gran precisión y que las mallas de los 3 modelos sean de orden similar para una comparación directa.

En la parte central izquierda de la Figura 24 se observa que es posible asignar valores para las concentraciones de fondo. Para esta simulación, las concentraciones de fondo se supusieron iguales a cero.

Debajo de los controles para asignar concentraciones de fondo (Figura 24) se encuentra un grupo de cuatro controles. Este grupo es relevante si una o más fuentes son seleccionadas para el uso del Módulo de Malla Lagrangiano (LPM), pero para este caso, se utilizó el Módulo de Malla Euleriano (EGM).

Al obtener los archivos de fuentes puntuales mediante el botón "Get Point Source Files (*.pse, *.pst)" ubicado en la parte inferior de la Figura 24 se obtiene la ventana de **Point Source Emissions** (Figura 25). Esta ventana permite introducir las condiciones de operación de la Central (altura de la chimenea, temperatura y velocidad de los gases de salida, velocidad del viento, radio de la chimenea y la tasa de emisión).

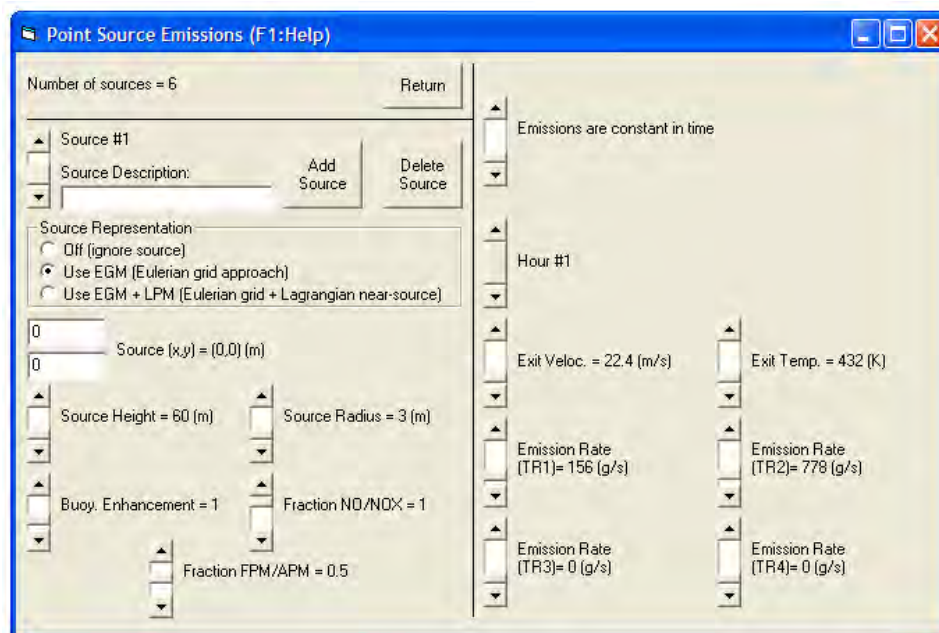


Figura 25 Emisiones de las fuentes puntuales.

4.6.2 Resultados

A continuación se muestran los resultados de la simulación realizada en el programa TAPM.

4.6.2.1 Concentraciones de NO_x

En la Tabla 8 y Figura 26, se muestra el valor máximo de la concentración de NO_x, la distancia a la que ocurrió, los valores máximos permitidos por la norma y el porcentaje en exceso de contaminantes en base a la norma.

Tabla 8 Concentración máxima de NO_x.

Concentración máxima de NO _x		Distancia a la que se presenta [km]
[µg/m ³]	[ppm]	
1321	0.7	6.2
Concentración máxima de NO _x según Norma		Porcentaje de exceso
[µg/m ³]	[ppm]	
395	0.21	

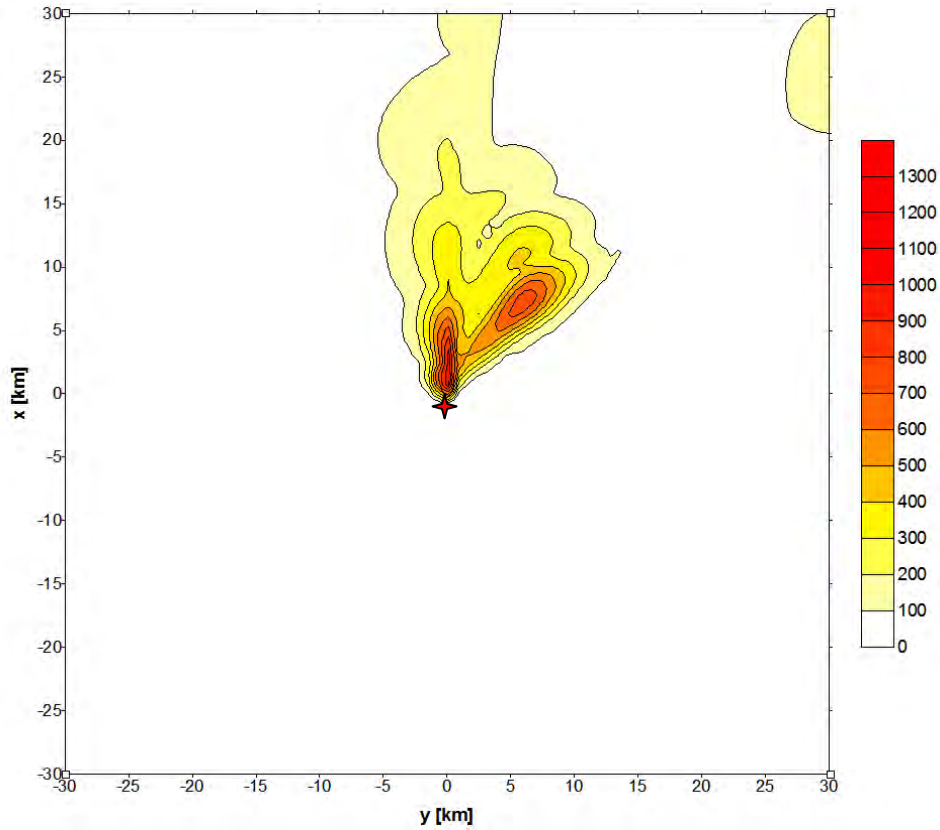


Figura 26 Concentración de NO_x [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] a nivel del suelo. Malla anidada.

4.6.2.2 Concentraciones de SO_2

En la Tabla 9 y Figura 27, se muestra el valor máximo de la concentración de SO_2 , la distancia a la que ocurrió, los valores máximos permitidos por la norma y el porcentaje en exceso de contaminantes en base a la norma.

Tabla 9 Concentración máxima de SO₂.

Concentración máxima de SO ₂		Distancia a la que se presenta [km]
[μg/m ³]	[ppm]	
7861	2.97	6.2
Concentración máxima de NO _x según Norma		Porcentaje de exceso
[μg/m ³]	[ppm]	
655	0.25	
		1200

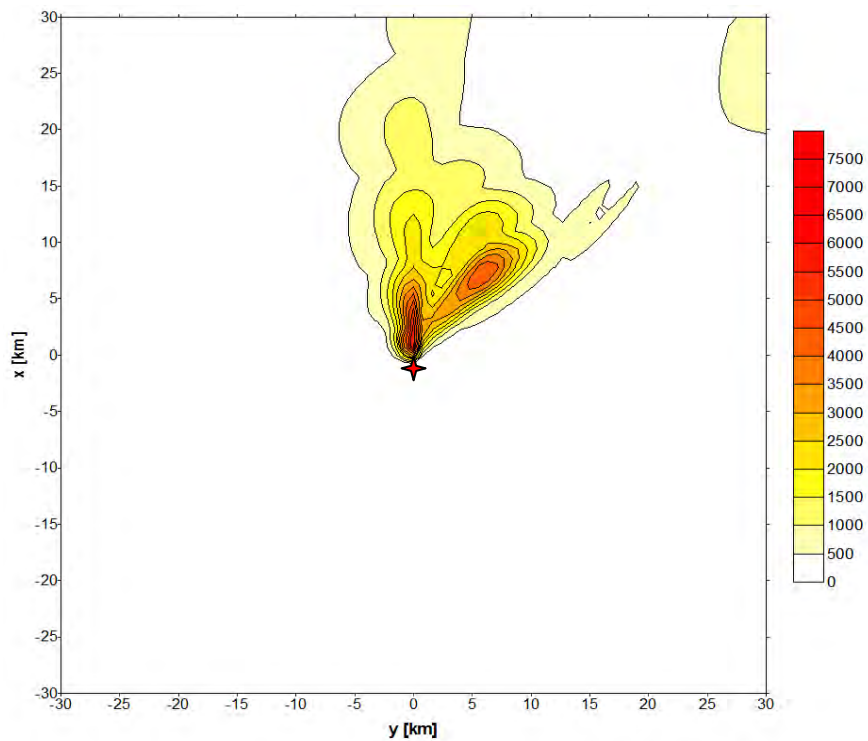


Figura 27 Concentración de SO₂ [μg/m³] a nivel del suelo. Malla anidada.

Se puede observar de la Tablas 8 y 9, que se sobrepasaron los límites establecidos por los estándares de calidad del aire de California, EU.

Para comprender mejor lo mostrado en los contornos generados por TAPM, es necesario comprender que sucedió antes y después de ese tiempo (9 agosto 2003 a las 12 h), por lo que se generó un video del período del 8 al 10 de agosto de 2003 (Apéndice A.2). En el video, la tierra es representada por el color verde, el mar por el color azul, los vectores de velocidad están representados con flechas blancas y los contornos de concentraciones son representados por colores del azul al rojo (azul para concentraciones pequeñas, rojo para las concentraciones máximas).

De este video se extrajeron los perfiles de concentraciones de las 8 am a las 3 pm del día 9 de agosto. Estos perfiles están representados en las Figuras 28 a 35 mostradas a continuación.

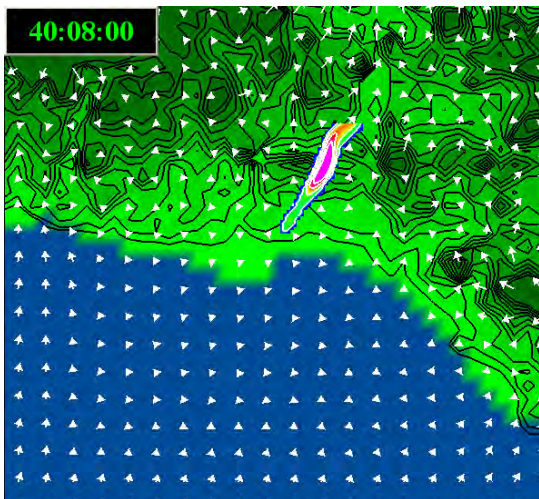


Figura 28 Perfil de concentraciones 8 am.

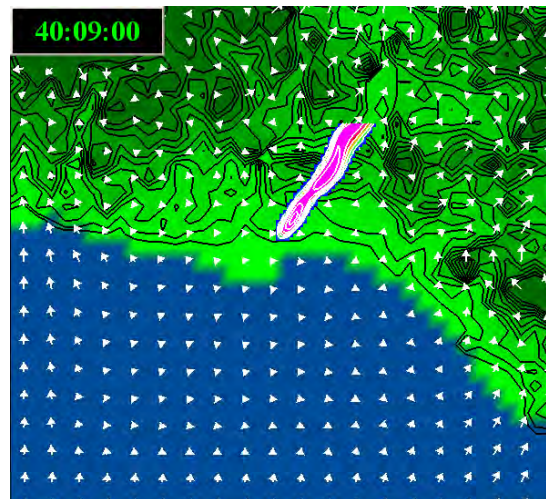


Figura 29 Perfil de concentraciones 9 am

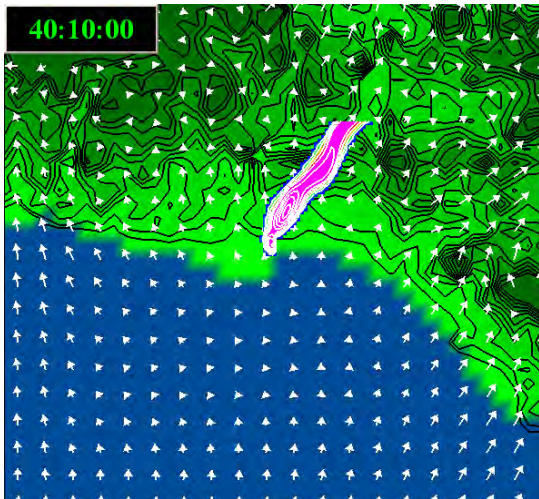


Figura 30 Perfil de concentraciones 10 am

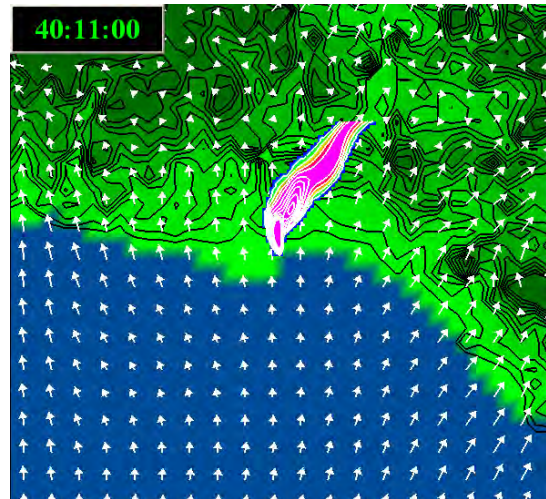


Figura 31 Perfil de concentraciones 11 am

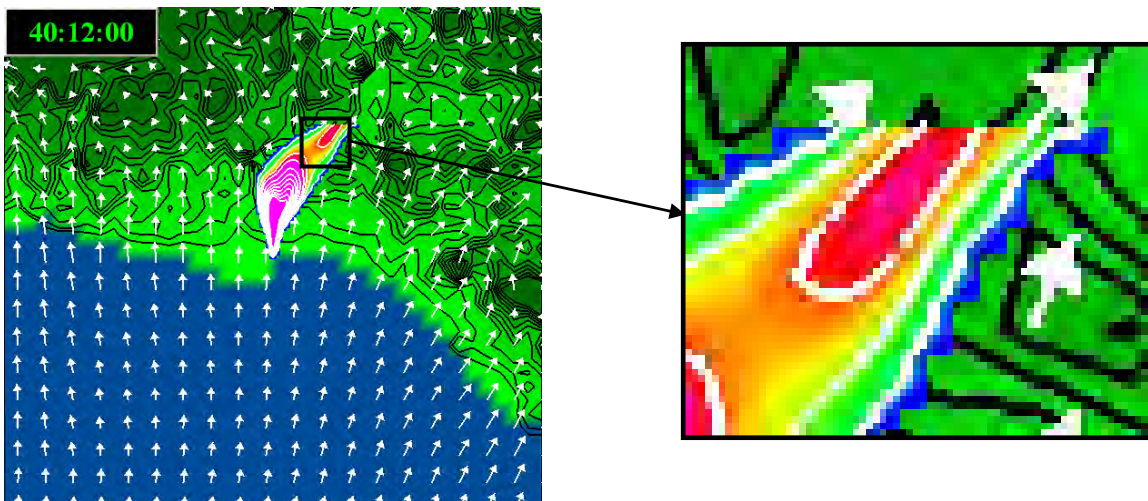


Figura 32 Perfil de concentraciones 12 am con acercamiento.

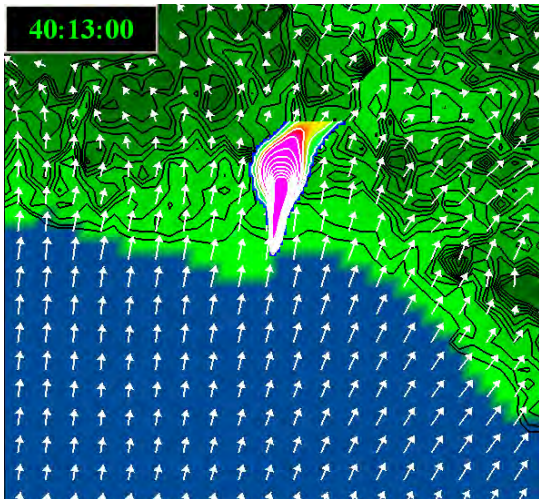


Figura 33 Perfil de concentraciones 1 pm

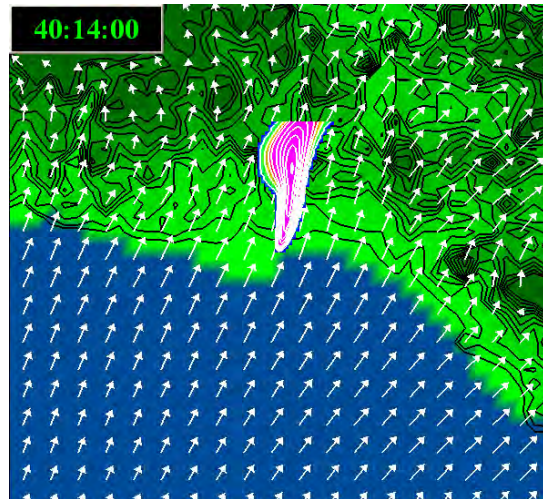


Figura 34 Perfil de concentraciones 2 pm

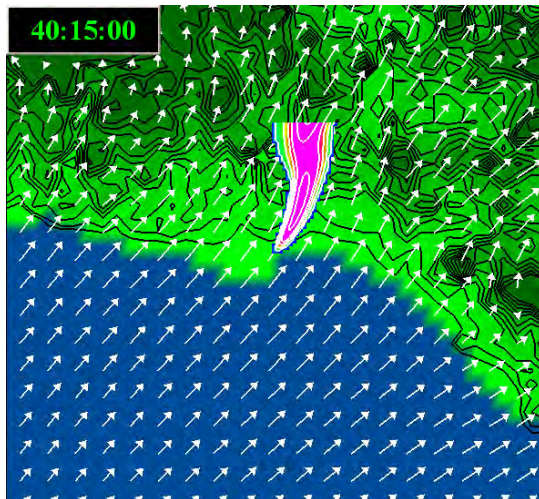


Figura 35 Perfil de concentraciones 3 pm

De estas imágenes se puede concluir que el modelo TAPM es capaz de tomar en cuenta los contaminantes que abandonan la malla anidada. Esto tiene como consecuencia que si existe algún tipo de variación en el ángulo de la dirección del viento, los contaminantes que salieron de la malla anidada pueden regresar a ésta cierto tiempo después, generando así una mayor concentración

de contaminantes en el sitio. Para este caso en particular, esto puede explicar que en la Figura 32 aparezca un contorno de concentraciones altas en la parte superior derecha.

4.7 Comparación de resultados del Modelo de Pluma Gaussiano, TAPM y SCREEN3

El modelo SCREEN3 no pronosticó un escenario de fumigación costera para este caso debido a que el factor que parametriza el crecimiento de la TIBL (A) está fijo y es igual a 6 en este modelo. Por el contrario, el valor de este mismo parámetro sugerido por Stunder y SethuRaman (1985) e incorporado al Modelo de Pluma Gaussiano, es capaz de representar de manera más realista el crecimiento de la TIBL con la distancia. Es por esto que el Modelo de Pluma Gaussiano en este trabajo es más versátil ya que no presenta las limitaciones que el modelo SCREEN3.

A continuación, con el fin de comparar los resultados arrojados por el Modelo de Pluma Gaussiano y el modelo TAPM, se muestran las distribuciones de concentraciones, superpuestas en imágenes satelitales (Figuras 34, 35, 36 y 37). En estas imágenes satelitales se abarca una área aproximada de 37.5 km en la dirección lateral por 33 km en la dirección del viento.

Las Figuras 36 y 37 muestran las concentraciones de NO_x obtenidas por ambos modelos.

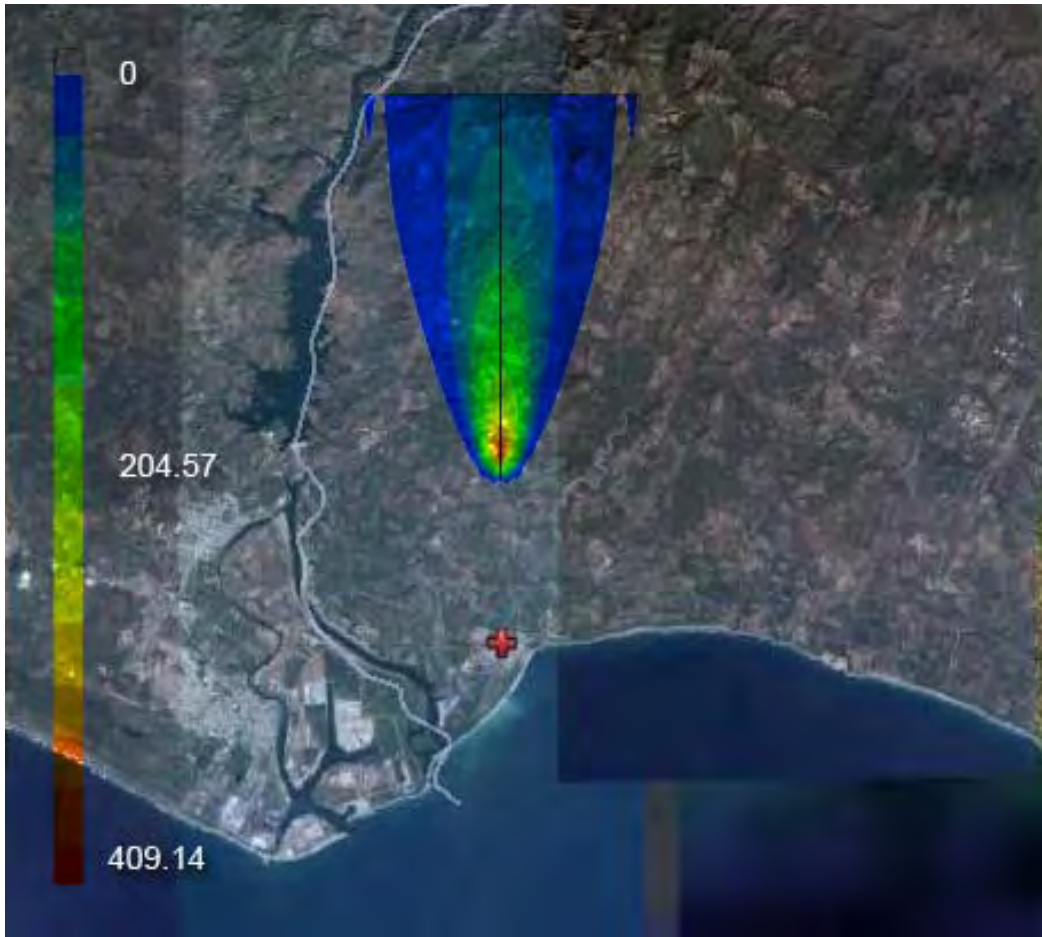


Figura 36 Concentraciones de NO_x [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]. Modelo de Pluma Gaussiano.

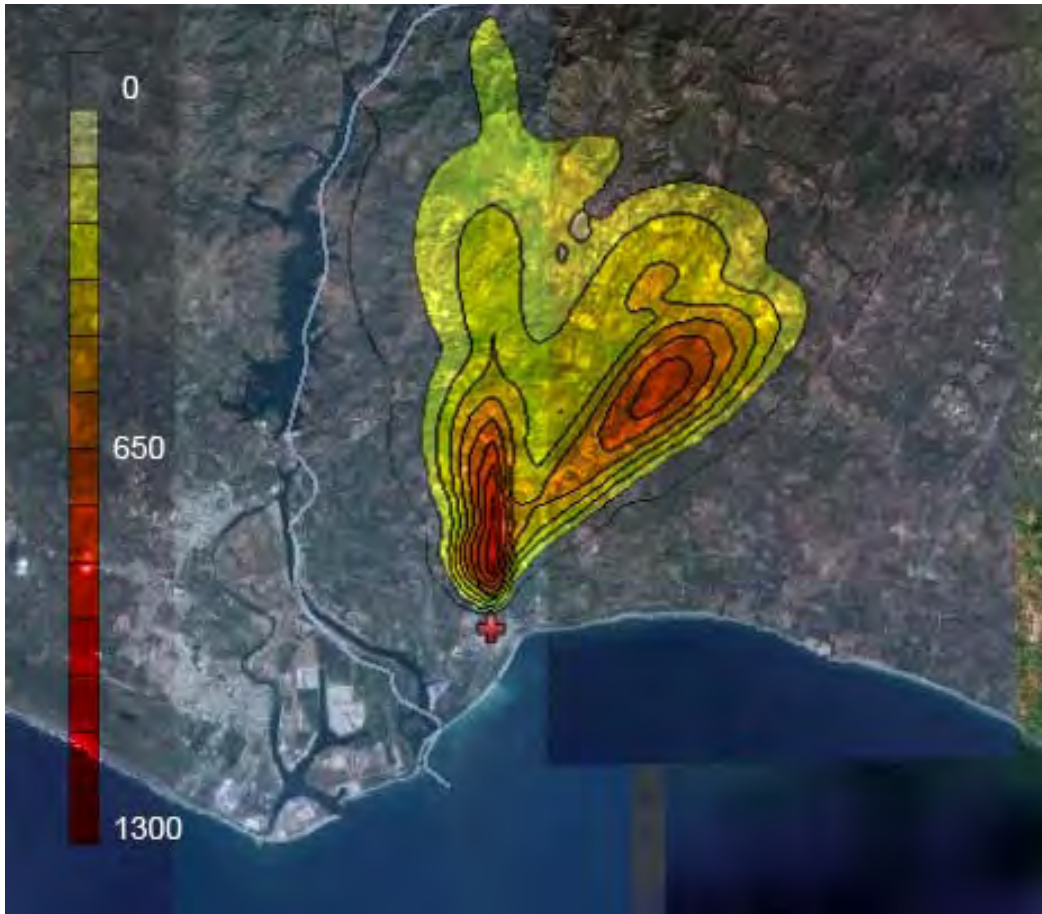


Figura 37 Concentraciones de NO_x [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]. Modelo TAPM.

Las Figuras 38 y 39 muestran las concentraciones de SO_2 obtenidas por ambos modelos.

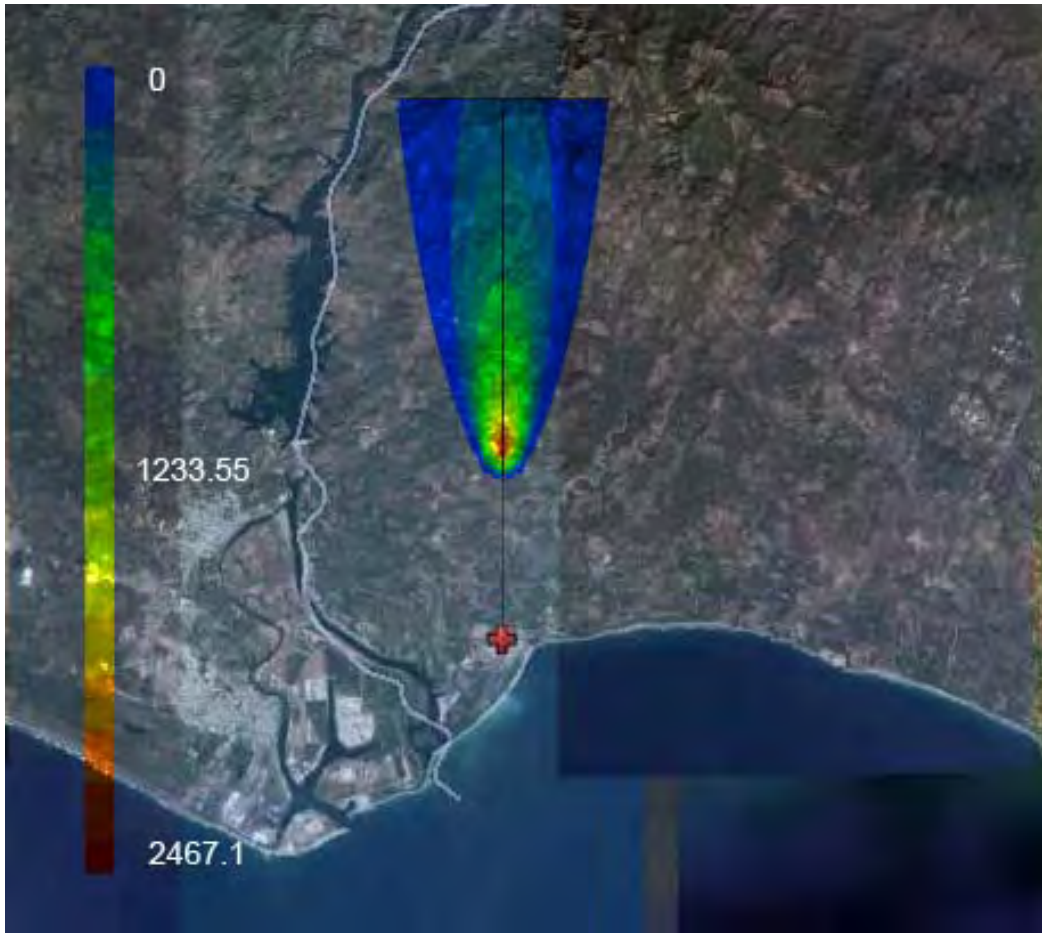


Figura 38 Concentraciones de SO₂ [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]. Modelo de Pluma Gaussiano.

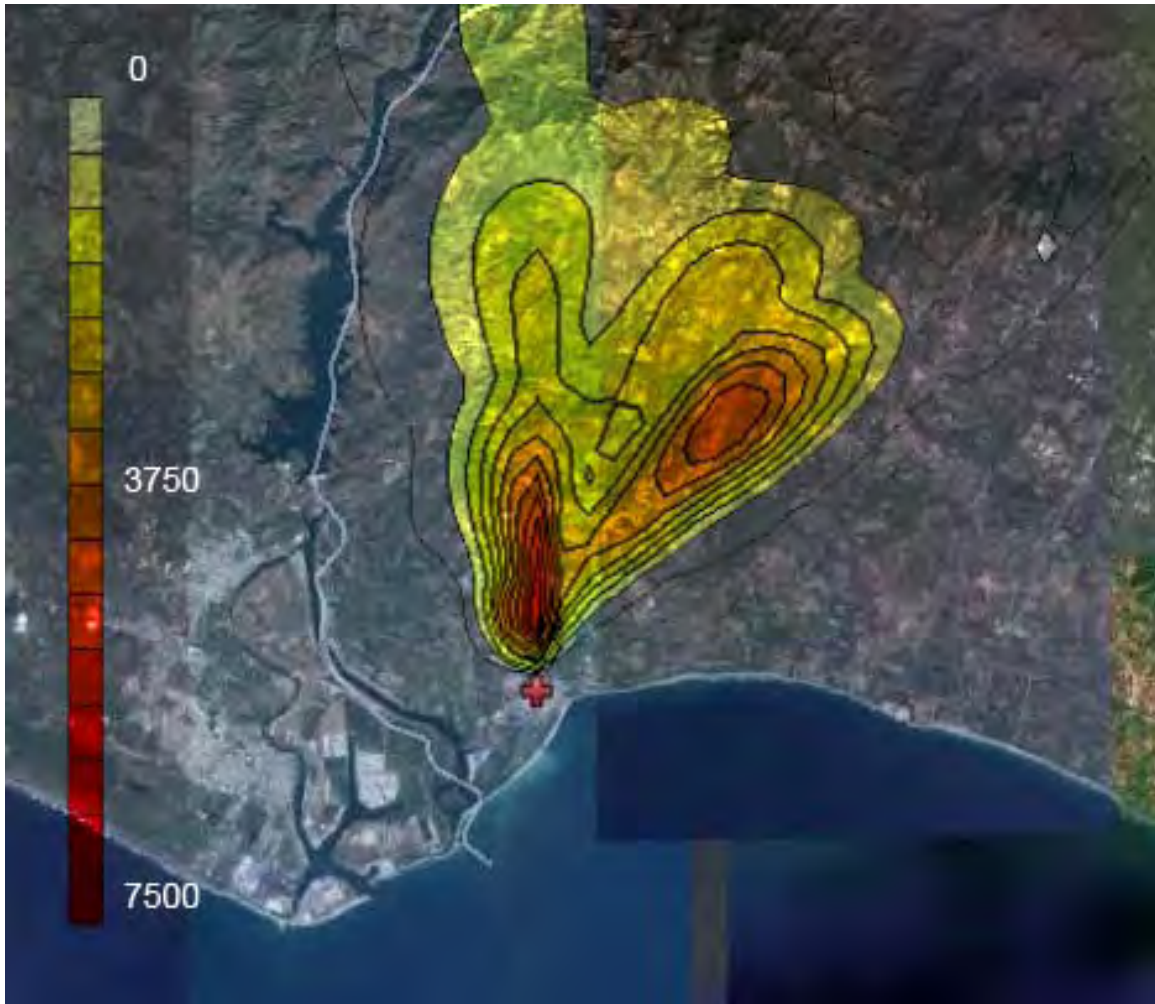


Figura 39 Concentraciones de SO_2 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]. Modelo TAPM.

Se puede observar, al comparar las gráficas de los contornos de concentraciones, que el área de afectación predicha por el modelo TAPM es mayor que la predicha por el Modelo de Pluma Gaussiano. Esto se debe a que el TAPM toma en cuenta la meteorología (fluctuaciones en la dirección del viento, gradientes de temperatura, etc.) con una mayor precisión y la topografía del terreno.

El área de afectación, para concentraciones mayores a $100 \mu\text{g m}^{-3}$ de NO_2 , predicha por el Modelo de Pluma Gaussiano es de aproximadamente de 6.3 km^2 . (0.87 km en el eje lateral y 7.2 km en eje longitudinal), mientras que, el área

de afectación, también para concentraciones mayores a $100 \mu\text{g m}^{-3}$ de NO_2 , predicha por el modelo TAPM es de aproximadamente de 73.5 km^2 (5.78 km en el eje lateral y 12.9 km en eje longitudinal). Como se puede observar la diferencia entre las distancias laterales de ambos modelos es mayor que la diferencia entre las distancias longitudinales. Estos resultados muestran que el modelo TAPM ofrece un mejor modelado de la dispersión en el eje lateral que el Modelo de Pluma Gaussiano ya que, entre otras cosas, calcula un campo de velocidades más apegado a la realidad.

En la Tabla 10 se muestra que las concentraciones calculadas por el modelo TAPM son mayores que las calculadas por el Modelo de Pluma Gaussiano. Esto se debe a que en el modelo TAPM, los contaminantes que abandonan la malla anidada no desaparecen y éstos, como es el caso, regresan a esta malla debido a un cambio en la dirección del viento a nivel del suelo. Con base a lo anterior se confirma que el modelo TAPM es capaz de representar las condiciones atmosféricas en el sitio donde se dispersan los contaminantes con más precisión.

Tabla 10 Comparativa de concentraciones máximas de NO_2 y SO_2 del Modelo de Pluma Gaussiano con el modelo TAPM.

Concentración máxima de NO_x	
Modelo Pluma Gaussiano [ppm]	TAPM [ppm]
0.22	0.7
Concentración máxima de SO_2	
Modelo Pluma Gaussiano [ppm]	TAPM [ppm]
0.92	2.97

Al analizar las Figuras 37 y 39 se puede observar que el modelo TAPM predice que los contaminantes alcanzan el nivel del piso casi inmediatamente después de que salen de la chimenea. Por el contrario, al analizar las Figuras 36 y 38, se observa que el Modelo de Pluma Gaussiano predice que los contaminantes tocan el piso aproximadamente a una distancia, a partir la fuente, de 5.5 km.

Con el fin de explicar el motivo por el que la concentración de contaminantes es máxima a las 12 pm, se graficó la altura de la capa de mezclado, la altura de estabilidad de la pluma y las concentraciones obtenidas mediante la simulación en el modelo TAPM en la Central Termoeléctrica se obtiene la Figura 40:

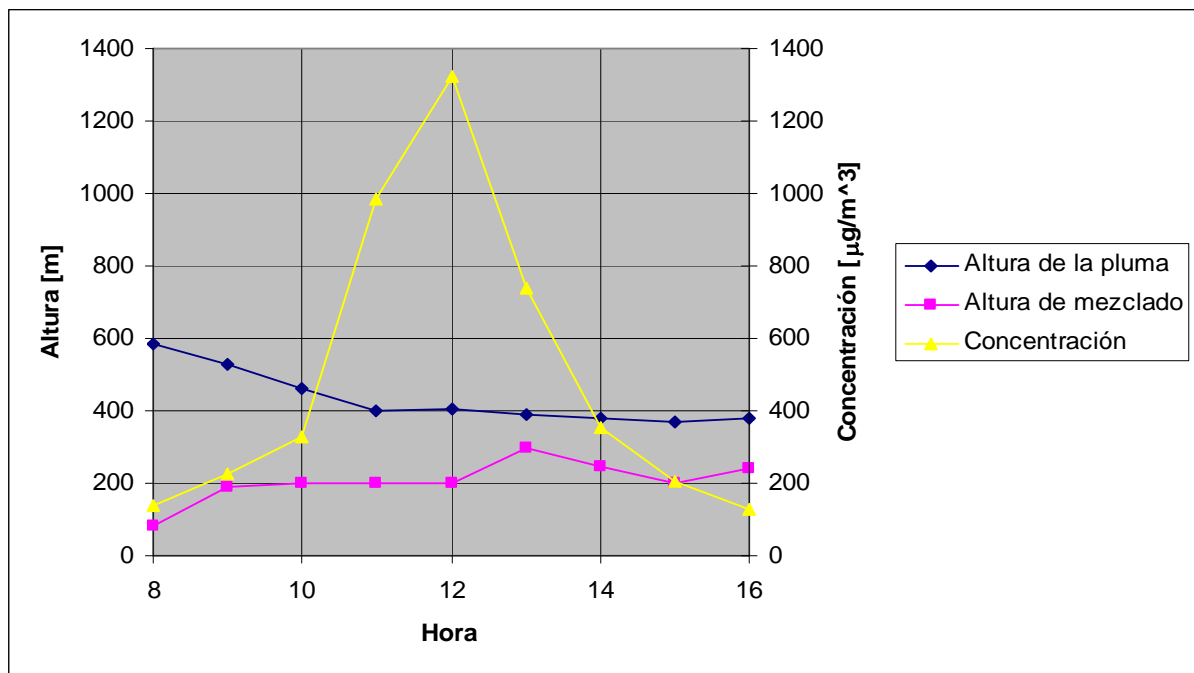


Figura 40 Altura de la pluma, altura de la capa de mezclado y concentraciones de NO_x [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] calculadas por el modelo TAPM.

Al analizar la Figura 40, se puede observar que la concentración de contaminantes a nivel del suelo aumenta drásticamente cuando la distancia

entre la capa de mezclado y la pluma comienza a ser menor a los 300 m aproximadamente. Es decir que cuando la diferencia de alturas entre la capa de mezclado y la pluma comienza a ser menor a los 300 m aproximadamente, los contaminantes que se acumularon en la parte superior de la capa de mezclado (debido a que en las horas de la mañana la velocidad del viento es muy pequeña (Figura 41)), son arrastrados al nivel del piso por los movimientos convectivos generados en la capa de mezclado. Lo anterior justifica la existencia de contaminantes a nivel del suelo en la zona cercana a la CT predicha por el modelo TAPM.

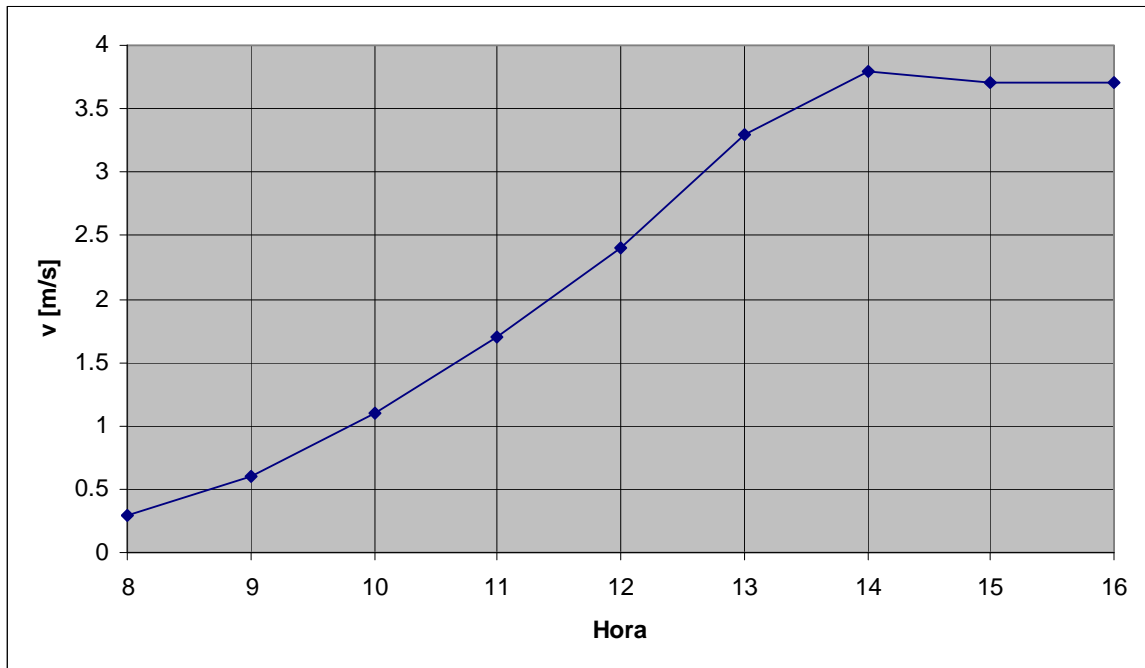


Figura 41 Velocidad del viento. Modelo TAPM.

El Modelo de Pluma Gaussiano, por el contrario, supone que los contaminantes son transportados con muy poca difusión en el eje vertical hasta que éstos alcanzan la TIBL. En este caso, la pluma de contaminantes intercepta

a la TIBL a 5.3 km de la fuente. Por esta razón, el modelo predice que los contaminantes tocan el suelo a una distancia de 5.5 km.

De estudios previos en la zona (Serrano, 2007) se ha observado que el modelo TAPM predice concentraciones de contaminantes ligeramente mayores a las reales. Al comparar las concentraciones de NO_x y SO_2 obtenidas por ambos modelos, se puede observar que las concentraciones obtenidas por el Modelo de Pluma Gaussiano están subestimadas, estas se encuentran dentro de un factor de 3 de las obtenidas por el modelo TAPM. Por lo que se puede suponer que los valores de la concentración obtenidos por el Modelo de Pluma Gaussiano se encuentran también dentro de un factor de 3 de la concentración real.

La diferencia entre las distancias a las que ocurren las máximas concentraciones calculadas por ambos modelos fue de 100 m, por lo que se puede considerar que son casi iguales debido a que la malla que se utilizó para hacer los cálculos en el Modelo de Pluma Gaussiano fue de 50 x 20 nodos con una separación entre ellos de 400 m y para el modelo TAPM fue de 77 x 77 nodos con una separación entre ellos de 775 m.

De este análisis, tanto para el Modelo de Pluma Gaussiano como para el modelo TAPM, se observa que la distancia en la que ocurre la concentración máxima para cada contaminante no depende de la tasa de emisión ni de la velocidad de emisión. La velocidad de emisión no tiene mucha importancia en esta distancia ya que las velocidades de emisión para las unidades de carbón no difieren en mucho de la unidad de combustóleo. Es por esto que, la concentración máxima se da en el mismo lugar para cada contaminante y para cada tasa de emisión.

Con el fin de comparar las ventajas y desventajas entre el Modelo de Pluma Gaussiano y el modelo TAPM, se resumieron, en la Tabla 11, los datos de entrada y de salida para ambos modelos, así como los costos y tiempos de cálculo. De esta tabla se puede observar que para la simulación en Modelo de Pluma Gaussiano se tiene que disponer de información meteorológica obtenida de estaciones en la superficie, mientras que, para el modelo TAPM, la información del terreno y la meteorología viene incluida en el paquete de

instalación. En esta tabla, también se puede observar que el Modelo de Pluma Gaussiano es barato y rápido de usar, sin embargo los datos que se obtienen de su simulación son muy limitados. Por el contrario, el modelo TAPM, es más caro y requiere de tiempos de cálculo muy elevados (a comparación del Modelo de Pluma Gaussiano) pero los resultados, meteorológicos y de contaminación, que arroja son muy indicativos de lo que en realidad esta sucediendo en el sitio de estudio.

Tabla 11 Tabla comparativa entre ambos modelos.

TAPM			
Datos de entrada	Ubicación geográfica, altura y radio de la fuente, velocidad y temperatura de los gases de salida, período del cálculo, tamaño de la malla principal y de las mallas anidadas y tasa de emisión de los contaminantes. La información de terreno y información meteorológica se proporcionan en el software de instalación.		
Datos de salida	Meteorología	Velocidad y dirección del viento, temperatura, humedad relativa, temperatura potencial, humedad específica del vapor de agua, humedad específica del agua de las nubes, energía cinética turbulenta, velocidad escalar del viento, densidad potencial de potencias del viento, radiación solar total, radiación neta, flujo de calor sensible, flujo de calor de evaporación, velocidad convectiva, altura de mezclado, escala de la longitud de Obukhov, tasa de lluvia y lluvia total.	
	Contaminación	Altura de la pluma, concentración en cualquier nodo seleccionado de la malla, máxima concentración en la malla, número de días en que se sobrepasa cierto valor de concentración, concentraciones promedio, la novena concentración más alta, la segunda concentración más alta y las concentraciones máximas.	
Costo	Software TAPM	AUD \$4,000	\$57600 pesos
	CDs Análisis sinópticos anual	AUD \$400	\$5760 pesos
	TOTAL	AUD \$4,400	\$63360 pesos
Tiempo de cálculo	24 h en una computadora Pentium D CPU 2.80 GHz con 1 GB de RAM.		
MODELO DE PLUMA GAUSSIANO			
Datos de entrada	Temperatura y presión parcial del vapor de agua en el aire a nivel del suelo y a cualquier otra altura de referencia, presión a nivel del suelo, velocidad del viento a 10 m, gradiente térmico adiabático, gradiente vertical de temperatura potencial del aire sobre el agua, flujo superficial de calor, clase de estabilidad Pasquill, tasa de emisión, velocidad de salida de los gases, altura y radio de la fuente y distancia de la central al mar.		
Datos de salida	Altura de la pluma, altura de la TIBL, concentración en cualquier nodo seleccionado de la malla y la máxima concentración en la malla.		
Costo	No tiene costo.		
Tiempo de cálculo	Un minuto en una computadora Pentium D CPU 2.80 GHz con 1 GB de RAM.		

Capítulo 5

Conclusiones y recomendaciones

5.1 Conclusiones

Se realizó un estudio de dispersión de contaminantes para la CTPPEC (en operación) con una modificación en la altura de las chimeneas con el fin de modelar con mayor claridad el fenómeno de fumigación costera. Mediante este cambio se buscó reducir la sensibilidad a pequeños cambios en los valores asumidos en la profundidad de la capa límite, la desviación estándar vertical de la nube, y la desviación estándar horizontal de la nube.

Mediante el uso de dos modelos; el propuesto y el modelo TAPM, se obtuvieron las concentraciones máximas de NO_x y SO_2 así como las distancias a las que ocurren.

En este trabajo, se seleccionó el 9 de agosto de 2003, como día de estudio, debido a que al correr la simulación en el modelo TAPM, tal y como se esperaba, uno de los días para el que se encontraron los valores más altos de concentración a nivel de suelo fue el 9 de agosto a las 12 horas.

Para la simulación del Modelo de Pluma Gaussiano, con el fin de no sobreestimar la elevación total de la pluma, únicamente se consideró el efecto de una pluma dominada por los efectos de flotación.

Al observar la formulación del Modelo de Pluma Gaussiano, se puede concluir que a mayor velocidad del viento y/o mayor gradiente vertical de temperatura y/o mayor estabilidad atmosférica, el modelo predecirá una menor concentración de contaminantes a nivel del suelo. Por el contrario, a mayor flujo superficial de calor, se tendrá una mayor concentración de contaminantes.

Se programó el modelo de Pluma Gaussiana en el programa EES con el propósito de permitir al usuario representar, de manera rápida, económica, sencilla y con resultados confiables, el fenómeno de la fumigación costera. EES permite obtener múltiples escenarios críticos, con el fin de que si se rebasan las normas, se justificaría realizar un estudio de mayor envergadura y mayores costos.

El modelo SCREEN3, no fue capaz de representar las condiciones de la fumigación costera para este caso, ya que la parametrización del crecimiento de la TIBL con la distancia tierra adentro no es conservadora. El Modelo de Pluma Gaussiano demostró ser más realista, versátil y menos limitado que el modelo SCREEN3.

Al comparar los resultados de las simulaciones realizadas con el Modelo de Pluma Gaussiano y el modelo TAPM, se observó que el modelo TAPM es capaz de representar de buena manera el fenómeno de fumigación costera.

EL modelo TAPM es capaz de tomar en cuenta los contaminantes que abandonan la malla anidada. Esto tiene como consecuencia que si existe algún tipo de variación en el ángulo de la dirección del viento, los contaminantes que salieron de la malla anidada pueden regresar a ésta cierto tiempo después, generando así una mayor concentración de contaminantes en el sitio. Esto explica que las concentraciones de contaminantes calculadas por el modelo TAPM son mayores que las calculadas por el Modelo de Pluma Gaussiano.

El modelo TAPM predice concentraciones de contaminantes a nivel del piso prácticamente después de que estos salen de la chimenea debido a que la pluma y la cima de la capa de mezclado están muy próximas. Esto provoca que los contaminantes que se estaban acumulando en la atmósfera sean arrastrados al nivel del piso. Por el contrario, el Modelo de Pluma Gaussiano predice que la pluma se transporta con muy poca difusión vertical hasta que esta entra en la TIBL por lo que, según este modelo, los contaminantes tocan el piso a distancias mayores que las predichas por el modelo TAPM.

De estudios previos en la zona (Serrano, 2007), se ha observado que el modelo TAPM predice concentraciones de contaminantes ligeramente mayores a las reales. Al comparar las concentraciones de NO_x y SO_2 obtenidas por ambos modelos, se puede observar que las concentraciones obtenidas por el Modelo de Pluma Gaussiano están subestimadas, estas se encuentran dentro de un factor de 3 de las obtenidas por el modelo TAPM. Se puede concluir entonces, que las concentraciones calculadas por el Modelo de Pluma Gaussiano están también dentro de un factor de 3 de las concentraciones reales.

Al comparar las gráficas de los contornos de concentraciones, se observa que el área de afectación predicha por el Modelo de Pluma Gaussiano es menor que la predicha por TAPM.

La diferencia entre las distancias laterales de ambos modelos es mayor que la diferencia entre las distancias longitudinales. Por lo que se puede comprobar que el modelo TAPM ofrece un modelado más preciso de la dispersión en el eje lateral que el Modelo de Pluma Gaussiano ya que, entre otras cosas, calcula un perfil de velocidades más apegado a la realidad.

El Modelo de Pluma Gaussiano predice que la concentración de contaminantes más alta se da a una distancia de la CTPPEC de aproximadamente 6.1 km, mientras que el modelo TAPM predice que la concentración de contaminantes más alta se da a una distancia de aproximadamente 6.2 km para el escenario propuesto.

Se puede concluir que mediante la simulación con ambos modelos se obtuvo la misma distancia a la que se presentó la máxima concentración de contaminantes, tomando en cuenta que la malla que se utilizó para hacer los cálculos en el Modelo de Pluma Gaussiano fue de 50 x 20 nodos con una separación entre ellos de 400 m y para el modelo TAPM fue de 77 x 77 nodos con una separación entre ellos de 775 m.

Al comparar los resultados obtenidos por ambos modelos con las normas de calidad del aire vigentes en México para el caso de NO₂ y en California, EU para el caso de SO₂, es evidente que hay un exceso de contaminantes a nivel del suelo, por lo que, en el caso de que esta fuera una CT real, se recomendaría realizar modificaciones a las condiciones de operación de la planta o modificaciones en la geometría de las chimeneas.

El tiempo de cálculo para el caso del Modelo de Pluma Gaussiano fue mucho menor que el del modelo TAPM. Sin embargo, aunque ambos modelos ofrecen resultados confiables, el modelo TAPM ofrece resultados más apegados a la realidad.

5.2 Recomendaciones

Para estudios de impacto ambiental, se recomienda el uso del Modelo de Pluma Gaussiano, o en su defecto, un análisis con métodos más precisos y con tiempos de cálculo cortos, como los modelos estocásticos Lagrangianos o el uso de un modelo basado en un enfoque de una función de densidad de probabilidad (e.g. Luhar y Sawford (1995)), para hacer una estimación de la distribución de la concentración de contaminantes. En caso de la concentración de contaminantes rebase el límite máximo normado, entonces se recomienda el uso de modelo TAPM con el fin de determinar con mucha mayor precisión los perfiles de contaminantes a nivel del suelo. De esta manera se podrán realizar las mejoras pertinentes en las instalaciones.

Para obtener resultados más precisos mediante el uso del modelo TAPM, se recomienda anidar otra malla dentro de la malla utilizada, con el fin de abarcar solamente un área de 20 x 10 km ya que como se observó, el área de afectación esta dentro de esta región. También se recomienda el uso del modo LPM en la malla de anidación más interna para obtener una cantidad más detallada de los efectos cercanos a la fuente, incluyendo la elevación gradual de la pluma y la dispersión cercana a la fuente. Así mismo, se recomienda tomar en cuenta la deposición superficial de los contaminantes, así como a las reacciones fotoquímicas.

Se recomienda el uso del Modelo de Pluma Gaussiano en este trabajo, para predecir el perfil de concentración de contaminantes en el caso de una fumigación debida al rompimiento de la capa de inversión térmica, la cual, así como la fumigación costera, es capaz de producir grandes concentraciones de contaminantes a nivel del suelo y por lo que su estudio es de gran importancia.

Referencias

Andren A. (1990). 'Evaluation of a turbulence closure scheme suitable for air pollution applications', *J. Appl. Meteorol.*, **29**, 224-239.

Appendix W to part 51 – Guideline on Air Quality Models, Environmental Protection Agency.

Azzi M., Johnson G.M., and Cope M. (1992). 'An introduction to the generic reaction set photochemical smog mechanism', *Proceedings of the 11th International Clean Air and Environment Conference*, Brisbane, 1992, Clean Air Society of Australia & New Zealand.

Baerenten J. H. and Berkowics R. (1984) Monte Carlo Simulation of plume dispersion in the convective boundary layer. *Atmospheric Environment* 18, 701-712.

Barke, C D, A comparison of Gaussian and diffusivity models of atmospheric dispersion. Berkley, Glos., CEEB Report RD/B/N4405 (1978).

Briggs, G. A. (1968). Momentum and buoyancy effects. In *meteorology and Atomic energy-1968* (D.H. Slade, ed), pp. 189-202. U.S. Department of energy, Technical Information Center, Oak Ridge, TN.

Briggs, G. A. (1973). Diffusion estimation of small emissions. Contribution No. 79, Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory, Oak Ridge, TN.

Briggs, G.A., (1975). Plume Rise Predictions. In: *Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analysis*, Haugen, D.A. (ed.), American Meteorological Society, Boston, MA, pp. 59-111.

Deardorff J. W. and Willis G. E. (1982) Ground-level concentrations due to fumigation into an entraining mixed layer. *Atmospheric Environment* 16, 1159-1170.

Dilley A.C., and O'Brien D.M. (1999). 'Estimating downward clear-sky long-wave irradiance at the surface from screen temperature and precipitable water', *Submitted to Q. J. R. Meteorol. Soc.*

Environmental Protection Agency, 1987b. Analysis and Evaluation of Statistical Coastal Fumigation Models. EPA-450/4-87-002. U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC.

Environmental Protection Agency, 1995b. Industrial Source Complex (ISC3) Dispersion Model User's Guide. EPA-454/B-95-003b. U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC.

Estudio de Monitoreo de la Calidad del Aire para la C.T. Petacalco, Programa Universitario de Medio Ambiente, UNAM 2001.

Gibson M.M., and Launder B.E. (1978). 'Ground effects on pressure fluctuations in the atmospheric boundary layer', *J. Fluid Mech.*, **86**, 491-511.

Gifford, F. A. (1986). Turbulent diffusion-typing schemes: A review. *Nuclear Safety*, 17, 68-85.

Glendening J.W., Businger J.A., and Farber R.J. (1984). 'Improving Plume Rise Prediction Accuracy for Stable Atmospheres with Complex Vertical Structure', *J. Air Pollut. Control Ass.*, **34**, pp. 1128-1133.

Hibberd, M., Luhar, A. (1996) "A Laboratory Study and Improved PDF Model of Fumigation into a Growing Convective Boundary Layer" *Atmos. Environ* 30: 3633-3649

Hurley, P.J. (1994). 'PARTPUFF - A Lagrangian particle/puff approach for plume dispersion modelling applications', *J. Appl. Meteorol.*, **33**, 285-294.

Hurley P.J., and Manins P.C. (1995). 'Plume rise and enhanced dispersion in LADM'. CSIRO Atmospheric Research, ECRU Technical Note No. 4. 4 pp.

Irwin, J. S. (1980). Dispersion estimate suggestion #8: Estimation of Pasquill stability categories. Docket reference No II-B-10. US. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC.

Seinfeld, J. H. (1986). Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution. Wiley-Interscience, New York.

Serrano, Juan, Estudio comparativo de la simulacion de dispersion de contaminantes en la atmosfera para estudios de impacto ambiental. Tesis de Maestría, Instituto de Ingeniería, UNAM, México, D.F., 2007.

Jones, J A, the radiological consequences of accidental release of radioactivity to the atmosphere. Sensitivity to the choice of atmospheric dispersion model. Harwell, NRPB-R88 (1979). (London, HMSO).

Li Z. -K. and Briggs G. A. (1988) Simple PDF models for convectively driven vertical diffusion. *Atmospheric Environment* 22, 55-74.

Luhar A. K. and Britter R. E. (1990) An application of Lagrangian stochastic modeling to dispersion during shoreline fumigation. *Atmospheric Environment* 24A, 871-881.

Luhar, A. K. and Sawford, B. L. (1996). An examination of existing shoreline fumigation models and formulation of an improved model. *Atmospheric Environment* 30, 609--620.

Luhar A. K. and Sawford B. L. (1995) Lagrangian stochastic modeling of the shoreline fumigation phenomenon. *J. appl. Met.* 34, 2259-2279.

Lyons W. A. y Cole H.S. (1973) Fumigation and plume trapping on the shores of Lake Michigan during stable onshore flow. *J. appl. Met.* 12, 494-510.

Mahrer Y., and Pielke R.A. (1977). 'A numerical study of the airflow over irregular terrain', *Beitr. Phys. Atmosph.*, 50, 98-113.

Mellor G.L., and Yamada T. (1982) 'Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems', *Rev. Geophys. Space Phys.*, 20, 851-875.

Misra P. K. (1980) Dispersion from tall stacks into a shore-line environment. *Atmospheric Environment* 14, 397-400.

Misra, P.K. and S. Onlock, 1982. Modelling Continuous Fumigation of Nanticoke Generating Station Plume. *Atmospheric Environment*, 16, 479-482.

Moore, D J, Calculation of ground level concentration for different sampling periods and source locations. In *Atmospheric Pollution*. Amsterdam, Elsevier, P5160 (1976).

Navarro, David, Cálculo de la concentración de contaminantes a nivel del suelo mediante el uso de un modelo de fumigación costera en la zona aledaña a la Central Termoeléctrica Presidente Plutarco Elías Calles (CTPPEC). Tesina de licenciatura, Instituto de Ingeniería, UNAM, México, D.F., 2008.

Stunder M. J. and SethuRaman S. (1985) A comparative evaluation of the coastal internal boundary layer height. *Atmospheric Environment* 32, 177-204.

Pasquill F, The estimation of the dispersion of windborne material. *Met. Mag.*, 90, no. 1063, 33 (1961).

Pal Arya, *Air Pollution Meteorology and Dispersion*. Oxford University Press, New York, 310 pp., 1999.

Physick W.L. (1994). 'Calculation of dry deposition in LADM', CSIRO Atmospheric Research ECRU Technical Note No. 1.

Physick W.L., Noonan J.A., McGregor J.L., Hurley P.J., Abbs D.J., and Manins P.C. (1994). 'LADM: A Lagrangian Atmospheric Dispersion Model', CSIRO Atmospheric Research Technical Paper No. 24. 137 pp.

Pielke, R. A. (1979). Air pollution-a national concern. *Bull. Amer. Meteorol. Soc.*, 60, 1461.

Randerson, D., 1984. Atmospheric Boundary Layer. In: *Atmospheric Science and Power Production*. Randerson, D. (ed.), DOE/TIC-27601, U.S. Department of Energy, Washington, D.C.

R.H.Clarke (1979). A Model for Short and Medium Range Dispersion of Radionucleides Released to the atmosphere.

Rotstayn L. (1997). 'A physically based scheme for the treatment of stratiform clouds and precipitation in large scale models. I: Description and evaluation of the microphysical processes', *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **123**, 1227–1282.

Schulman L., Strimaitis D. and Scire J. (2000). 'Development and evaluation of the PRIME plume rise and building downwash model', *J. Air & Waste Manage. Assoc.*, **50**, 378-390.

Seinfeld J.H., and Pandis S.N. (1998). 'Atmospheric chemistry and physics from air pollution to climate change', Wiley, New York, 1326 pp.

Stephens G.L. (1978). 'Radiation profiles in extended water clouds II: Parameterisation schemes'. *J. Atmos. Sci.*, **35**, 2123-2132.

Stunder M. J. and SethuRaman S. (1985) A comparative evaluation of the coastal internal boundary layer height. *Boundary-Layer Met.* 32, 177-204.

Turner, D. B. (1970). *Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates*, Office of Air Programs Pub. No. AP-26, U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC.

Venkatram A., Karamchandani P., Prasad P., Sloane C., Saxena P., and Goldstein R. (1997). 'The development of a model to examine source-receptor relationships for visibility on the Colorado Plateau', *Journal of the Air and Waste Management Association*, **47**, 286-301.

Venkatram A. (1988) Topics in applied dispersion modeling. In *Lectures on Air Pollution Modeling* (edited by Venkatram A. and Wyngaard J.), pp. 267-324. Amer. Meteorol. Soc., Boston.

Páginas de internet

Página web de EES (*Engineering Equation Solver*).

<http://www.fchart.com/ees/ees.shtml>

Página web de TAPM (*The Air Pollution Model*)

<http://www.csiro.au/products/ps1gu.html#1>

http://www.cmar.csiro.au/e-print/open/hurley_2005b.pdf

Páginas web de EPA (*Environmental Protection Agency*)

http://www.epa.gov/scram001/dispersion_screening.htm

http://www.epa.gov/scram001/dispersion_alt.htm#isc3

Apéndice A

Código programa EES

"FUMIGACIÓN COSTERA"

"El objetivo de este programa es evaluar la concentración de contaminantes a nivel del suelo a partir de una fuente emisora de contaminantes en un ambiente costero, obtener la ubicación donde se presenta la máxima concentración así como el valor de esta."

"Una carboeléctrica que se encuentra a una distancia de la costa (x_{mar}) emite un gas tóxico a una tasa Q con una altura efectiva de la pluma H. La velocidad media de referencia V_{bar_ref} corresponde a la velocidad del viento a los 10 m de altura. La altura de mezclado para esa determinada hora es de h_{TIBL} , el flujo superficial de calor es H_0 , el gradiente de temperatura potencial en el aire sobre el agua es γ y la temperatura ambiente es T."

Cálculo de los coeficientes de dispersión lateral para la capa estable en base a la clase de estabilidad de Pasquill así como a la distancia tierra adentro (Brigs (1973))"

{Declara la función Sys(arreglo)}

Function Sy(x)

\$COMMON EstabilidadPASQUILL\$, x_h, x_vy, tiempo, V_bar

if (EstabilidadPASQUILL\$='A') and (x>x_h-x_vy) then

$sy = ((0.22 * (x - x_h + x_{vy}) * (1 + 0.0001 * (x - x_h + x_{vy}))^{-1/2})^2 + (0.065 * (7 * tiempo / V_{bar})^{1/2} * (x - x_h + x_{vy})^2)^{1/2})$

ELSE

 if (EstabilidadPASQUILL\$='B') and (x>x_h-x_vy) then

$sy = ((0.16 * (x - x_h + x_{vy}) * (1 + 0.0001 * (x - x_h + x_{vy}))^{-1/2})^2 + (0.065 * (7 * tiempo / V_{bar})^{1/2} * (x - x_h + x_{vy})^2)^{1/2})$

 ELSE

 if (EstabilidadPASQUILL\$='C') and (x>x_h-x_vy) then

$sy = ((0.11 * (x - x_h + x_{vy}) * (1 + 0.0001 * (x - x_h + x_{vy}))^{-1/2})^2 + (0.065 * (7 * tiempo / V_{bar})^{1/2} * (x - x_h + x_{vy})^2)^{1/2})$

 ELSE

 if (EstabilidadPASQUILL\$='D') and (x>x_h-x_vy) then

$sy = ((0.08 * (x - x_h + x_{vy}) * (1 + 0.0001 * (x - x_h + x_{vy}))^{-1/2})^2 + (0.065 * (7 * tiempo / V_{bar})^{1/2} * (x - x_h + x_{vy})^2)^{1/2})$

 ELSE

 sy = 1

 endif

endif

endif

endif

Sy=sy

end

"Cálculo de los coeficientes de dispersión vertical para la capa estable en base a la clase de estabilidad de Pasquill así como a la distancia tierra adentro (Brigs (1973))."

{Declara la función Sz (arreglo)}

Function Sz(x)

\$COMMON EstabilidadPASQUILL\$, x_h, x_vz

if (EstabilidadPASQUILL\$='A') and (x>x_h-x_vz) then

$sz = 0.20 * (x - x_h + x_{vz})$


```

ELSE
  if (EstabilidadPASQUILL$='B') and (x>x_h-x_vz) then
    sz=0.12*(x-x_h+x_vz)
  ELSE
    if (EstabilidadPASQUILL$='C') and (x>x_h-x_vz) then
      sz=0.08*(x-x_h+x_vz)*(1+0.0002*(x-x_h+x_vz))^(1/2)
    ELSE
      if (EstabilidadPASQUILL$='D') and (x>x_h-x_vz) then
        sz =0.06*(x-x_h+x_vz)*(1+0.0015*(x-x_h+x_vz))^(1/2)
      ELSE
        sz =1
      endif
    endif
  endif
end
Sz=sz
end
*****
"Cálculo de las concentraciones de contaminantes a nivel del suelo (modelo de pluma Gaussiana
con y=0, z=0)."

{Declara la función Con(arreglo)}
Function Con(i,y)
z=0
$COMMON Q, V_bar, sigma_y[0..50], sigma_z[0..50], H, x_h, h_TIBL[0..50]
if (sigma_z[i]=1) or (sigma_y[i]=1) then
"Concentración para cuando la pluma aun no toca la TIBL"
  c =0
ELSE
  if (sigma_z[i]<h_TIBL[i]) {and (sigma_z[i]>1) and (sigma_y[i]>1)} then
    "Concentración para cuando la pluma cruza la TIBL"
    "Suponiendo la reflexión de contaminantes debido a la TIBL y al suelo así como una
concentración verticalmente uniforme"
    c =Q/(2*PI* V_bar * sigma_y[i]*sigma_z[i]) * EXP(- y^2 / ( 2 * sigma_y[i]^2 ))*(EXP(-( z-
H)^2 / ( 2 * sigma_z[i]^2 ))+EXP(-( (z+H)^2 / ( 2 * sigma_z[i]^2 )))+EXP(-( (2*h_TIBL[i]+z+H)^2 / ( 2
* sigma_z[i]^2 )))+EXP(-( (2*h_TIBL[i]+z-H)^2 / ( 2 * sigma_z[i]^2 )))+EXP(-( (2*h_TIBL[i]-z+H)^2 / ( 2
* sigma_z[i]^2 )))+EXP(-( (2*h_TIBL[i]-z-H)^2 / ( 2 * sigma_z[i]^2 ))))
  ELSE
    if (sigma_z[i]>h_TIBL[i]) {and (sigma_z[i]>1) and (sigma_y[i]>1)} then
"Concentración para cuando la pluma aun no toca la TIBL"
    c =Q/((2*PI)^(1/2) * V_bar * sigma_y[i] * h_TIBL[i])*EXP(- y^2 / ( 2 * sigma_y[i]^2 ))
    endif
  endif
end
Con=c
end
*****
"Constantes"
rho=1.194 [kg/m^3]
cp=1005[J/(Kg*K)]
tiempo=1 [h]
{x_mar=1300 [m]}
{h_s=60 [m]}
{r_s=3 [m]}

```

"Selección de salida de los gases: 22.37[m/s] para las 5 chimeneas de carbón, 19 [m/s] para la de combustóleo"
 {w_s=19 [m/s]}

{"Selección de la tasa de emisión:
 155.6[g/s] para NOx, 777.6 [g/s] para SO2 para unidad a base de Carbón"
 "181.2 [g/s] para NOx, 1813.68[g/s] para SO2 para unidad a base de combustóleo"}
 {tasaemision=1813.68 [g/s]}

g=9.81 [m/s^2]
 {lapsrate=0.0098 [K/m]}
 {T=302.55 [K]}
 {p=101325 [Pa] "a nivel del mar"}
 {e=4016 [Pa] "de tablas"}
 z=0
 {T_z= 294.85 [K]}
 {z_z=999 [m]}
 {e_z= 2597 [Pa] "de tablas"}
 k=0.286
 {V_bar_ref=2.4 [m/s]}
 {gamma=0.01 [K/m]}
 {H_0= 88.9 [W/m^2]}
 {EstabilidadPASQUILL\$='A'}

Q=tasaemision*(1 [kg]/1000 [g])

"Cálculo de velocidad media de transporte (V_bar) a la altura de estabilidad de la pluma (H).
 V_ref es la velocidad del viento a los 10 m"

"Ecuación para calcular la velocidad media del viento (ley de potencias) (ec.4.58 pag. 99)"
 $V_{bar}/V_{bar_ref}=(H/z_{ref})^m$

"Velocidad a la altura de la chimenea"
 $V_{bar_s}/V_{bar_ref}=(h_s/z_{ref})^m$

"Altura de referencia a los 10 m"
 $z_{ref} = 10$

"Exponente para la ec. de la ley de potencias para la velocidad media del viento"
 $m = 0.42$

"Cálculo de la elevación de la pluma y altura efectiva de la pluma"

$\Delta H = 2.6 * (F_b / V_{bar})^{1/3} * s^{-1/3}$
 $F_b = (1 - \rho_s / \rho) * g * r_s^2 * w_s$
 $\rho_s = (Q) / (w_s * area)$
 $area = \pi * r_s^2$
 $s = (g / T_v) * ((\Delta T_v / \Delta z) + lapsrate)$
 $\Delta T_v = ABS(T_v - T_{v_z})$
 $T_v = T * (1 + 0.61 * q_v)$
 $q_v = 0.622 * (e/p)$
 $T_{v_z} = T_z * (1 + 0.61 * q_{v_z})$
 $q_{v_z} = 0.622 * (e_z / p_z)$
 $T_z = T * (p_z / p)^k$
 $\Delta z = ABS(z - z_z)$

H=deltaH+h_s

"Cálculo de x_{vy} y_{x_vz} a partir de la igualdad de los coeficientes de dispersión para la capa estable con los correspondientes en la capa límite en el punto donde la pluma toca la capa límite"

```

$IF EstabilidadPASQUILL$='A'
    0.22*(x_vy)*(1+0.0001*x_vy)^(-1/2)=0.04*(x_h-x_mar)*(1+0.0001*(x_h-x_mar))^(1/2)
    0.20*x_vz=0.016*(x_h-x_mar)*(1+0.0003*(x_h-x_mar))^(1/2)
$ELSE
$IF EstabilidadPASQUILL$='B'
    0.16*(x_vy)*(1+0.0001*x_vy)^(-1/2)=0.04*(x_h-x_mar)*(1+0.0001*(x_h-x_mar))^(1/2)
    0.12*x_vz=0.016*(x_h-x_mar)*(1+0.0003*(x_h-x_mar))^(1/2)
$ELSE
$IF EstabilidadPASQUILL$='C'
    0.11*(x_vy)*(1+0.0001*x_vy)^(-1/2)=0.04*(x_h-x_mar)*(1+0.0001*(x_h-x_mar))^(1/2)
    0.08*x_vz*(1+0.0002*x_vz)^(-1/2)=0.016*(x_h-x_mar)*(1+0.0003*(x_h-x_mar))^(1/2)
$ELSE
$IF EstabilidadPASQUILL$='D'
    0.08*(x_vy)*(1+0.0001*x_vy)^(-1/2)=0.04*(x_h-x_mar)*(1+0.0001*(x_h-x_mar))^(1/2)
    0.06*x_vz*(1+0.0015*x_vz)^(-1/2)=0.016*(x_h-x_mar)*(1+0.0003*(x_h-x_mar))^(1/2)
$ENDIF
$ENDIF
$ENDIF
$ENDIF

```

"Cálculo de la distancia (x_h), a la que la línea media de la pluma toca la TIBL"

```

H=A_0*x_h^(1/2)
A_0=(2.7*H_0 / (rho*cp*gamma*V_bar_ref))^(1/2)

```

"Traspaso de funciones al programa principal y cálculo de $h_{TIBL[i]}$ "

```

n=50
duplicate i=0,n                               "Inicia n elementos de arreglos"
"La distancia en x será tomada cada 400 m hasta cubrir una distancia de 20 km"
    x[i]=i*400 [m]
    y[i]=i*400 [m]
"Traspaso de la función Sys(i) al programa principal con el nombre de sigma_ys[i]"
    sigma_y[i]=Sy(x[i])
"Traspaso de la función Szs(i) al programa principal con el nombre de sigma_zs[i]"
    sigma_z[i]=Sz(x[i])
"Cálculo de la altura de la capa límite térmica"
    h_TIBL[i]=A_0*x[i]^(1/2)
"Traspaso de la función Con(i) al programa principal con el nombre de C[i]"
    duplicate j=0,50
        C[i,j]=Con(i,y[j])
    end
end

```

"Cálculo de la concentración máxima a nivel del suelo (C_{max}) así como de la distancia (x_{max}) a la que se presenta"

```

"Concentración máxima"
    C_max= MAX(C[1..n, 0])

```

"Conversión de unidades"

```

    x_TIBL= x_h *(1[km]/1000[m])
    GLC_max=C_max*(1000000000 [micro g]/1 [kg])

```

"EL PROGRAMA EES SE ENCUENTRA EN EL CD ANEXO EN LA TESIS."

Apéndice B

Descripción técnica modelo TAPM

B.1 El módulo meteorológico

El módulo meteorológico de TAPM es un modelo de ecuaciones incompresibles para un terreno con coordenadas verticales para simulaciones en tres dimensiones. Este componente incluye parametrizaciones para los procesos micro-físicos de lluvia, nieve y nubes, cerradura en las ecuaciones de la turbulencia, flujos radiativos, dosel vegetativo y suelo urbano. La solución del modelo para la velocidad del viento, temperatura potencial virtual y humedad específica es débilmente aumentada con un tiempo de 24 horas hacia los valores de entrada en escala sinóptica de estas variables. El dominio horizontal del modelo debe de ser restringido a un tamaño menor de 1500 km x 1500 km ya que las ecuaciones del modelo desprecian la curvatura de la tierra y suponen una distancia uniforme de la malla a lo largo del dominio de cálculo.

La velocidad promedio del viento es determinada para las componentes horizontales u y v (m/s) de las ecuaciones de conservación de la cantidad de movimiento y la velocidad vertical del viento es calculada mediante la ecuación de continuidad. La temperatura potencial virtual se determina de una ecuación que combina la conservación de energía y vapor de agua.

La función de presión de Exner $\pi = \pi_H + \pi_N$ ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$) se determina de la suma del componente hidrostático π_H y no-hidrostático π_N .

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial \overline{w'u'}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} - \theta_v \left(\frac{\partial \pi}{\partial x} + \frac{\partial \pi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) + fv + F(u) - N_z(u - u_z) \quad (16)$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{\partial \overline{w'v'}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} - \theta_v \left(\frac{\partial \pi}{\partial y} + \frac{\partial \pi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) - fu + F(v) - N_z(v - v_z) \quad (17)$$

$$\frac{\partial \dot{\sigma}}{\partial \sigma} = - \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + u \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) + v \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \quad (18)$$

$$\frac{d\theta_v}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial \theta_v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial \theta_v}{\partial y} \right) - \frac{\overline{\partial w' \theta_v'}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} + S_{\theta_v} + F(\theta_v) - N_s (\theta_v - \theta_{vs}) \quad (19)$$

$$\frac{\partial \pi_H}{\partial \sigma} = -\frac{g}{\theta_v} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^{-1} \quad (20)$$

$$\sigma = z_T \left(\frac{z - z_s}{z_T - z_s} \right) \quad (21)$$

$$\frac{d\phi}{dt} \equiv \frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \sigma \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \quad (22)$$

$$S_{\theta_v} = \frac{\theta_v}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_{\text{RADIATION}} - \frac{\lambda}{c_p} S_{q_v} \quad (23)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \left(\frac{\sigma - z_T}{z_T - z_s} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x}, \quad \frac{\partial \sigma}{\partial y} = \left(\frac{\sigma - z_T}{z_T - z_s} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y}, \quad \frac{\partial \sigma}{\partial z} = \left(\frac{z_T}{z_T - z_s} \right) \quad (24)$$

donde

t = tiempo (s)

x, y, σ = los componentes del sistema coordenado

z = coordenada cartesiana vertical

z_T = altura de la capa superior del modelo

z_s = altura del terreno

K_H = coeficiente de difusión horizontal

$\overline{w' \theta'}$ = Flujo vertical de ϕ

$F(\phi)$ = filtro horizontal de ϕ

f = parámetro de Coriolis ($4 \pi_c \sin(\text{lat}) / (24 \cdot 3600)$) (s^{-1})

$\pi_c = 3.14159265$,

lat = latitud ($^\circ$)

u_s, v_s, θ_{vs} = temperatura virtual potencial de los vientos sinópticos a gran escala

N_s = Coeficiente de impulso a gran escala

T = temperatura (K)

g = constante de gravitación (9.81 m/s^2)

λ = Calor latente de vaporización del agua (2.5×10^6 J/kg)

C_p = calor específico a presión constante (1006 J/(kg K))

El componente opcional no-hidrostático de la función de presión de Exner se determina tomando las derivadas espaciales de las tres ecuaciones de conservación de la cantidad de movimiento y de la derivada temporal de la ecuación de continuidad, y eliminando todas las derivadas temporales en la ecuación de continuidad por sustitución. Es posible despreciar los términos de aceleración de Coriolis y gradientes de terreno, así como los términos de turbulencia y variación sinóptica. La ecuación resultante para π_N es:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 \pi_N}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial \sigma}{\partial x} \frac{\partial^2 \pi_N}{\partial x \partial \sigma} + \frac{\partial^2 \pi_N}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial \sigma}{\partial y} \frac{\partial^2 \pi_N}{\partial y \partial \sigma} + \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial^2 \pi_N}{\partial \sigma^2} \\ & + C_x \frac{\partial \pi_N}{\partial x} + C_y \frac{\partial \pi_N}{\partial y} + C_\sigma \frac{\partial \pi_N}{\partial \sigma} = R_\pi, \end{aligned} \quad (25)$$

con coeficientes

$$\begin{aligned} C_x &= \frac{1}{\theta_v} \left(\frac{\partial \theta_v}{\partial x} + \frac{\partial \theta_v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right), \quad C_y = \frac{1}{\theta_v} \left(\frac{\partial \theta_v}{\partial y} + \frac{\partial \theta_v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right), \\ C_\sigma &= \frac{1}{\theta_v} \left(\frac{\partial \theta_v}{\partial x} \frac{\partial \sigma}{\partial x} + \frac{\partial \theta_v}{\partial y} \frac{\partial \sigma}{\partial y} + \frac{\partial \theta_v}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \right) + \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \sigma}{\partial y^2}, \\ R_\pi &= \frac{1}{\theta_v} \left(\frac{\partial R_u}{\partial x} + \frac{\partial R_v}{\partial y} + \frac{\partial R_\sigma}{\partial \sigma} - R_u \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) - R_v \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \right), \\ R_u &= -u \frac{\partial \dot{u}}{\partial x} - v \frac{\partial \dot{u}}{\partial y} - \dot{\sigma} \frac{\partial \dot{u}}{\partial \sigma} + f v - \theta_v \frac{\partial \pi_H}{\partial x} + g \frac{\partial \sigma}{\partial x} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^{-1}, \\ R_v &= -u \frac{\partial \dot{v}}{\partial x} - v \frac{\partial \dot{v}}{\partial y} - \dot{\sigma} \frac{\partial \dot{v}}{\partial \sigma} - f u - \theta_v \frac{\partial \pi_H}{\partial y} + g \frac{\partial \sigma}{\partial y} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^{-1}, \\ R_\sigma &= -u \frac{\partial \dot{\sigma}}{\partial x} - v \frac{\partial \dot{\sigma}}{\partial y} - \dot{\sigma} \frac{\partial \dot{\sigma}}{\partial \sigma} - \theta_v \left(\frac{\partial \pi_H}{\partial x} \frac{\partial \sigma}{\partial x} + \frac{\partial \pi_H}{\partial y} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \\ & \quad + u^2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} + 2uv \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x \partial y} + v^2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial y^2} + 2\dot{\sigma} \left(u \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) + v \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \right), \end{aligned}$$

y

$$\frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) = \left(\frac{1}{z_T - z_s} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) = \left(\frac{1}{z_T - z_s} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y},$$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} = \left(\frac{\sigma - z_T}{z_T - z_s} \right) \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x \partial y} = \left(\frac{\sigma - z_T}{z_T - z_s} \right) \frac{\partial^2 z_s}{\partial x \partial y}, \quad \frac{\partial^2 \sigma}{\partial y^2} = \left(\frac{\sigma - z_T}{z_T - z_s} \right) \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2}.$$

Las ecuaciones de continuidad se resuelven para la humedad específica (kg/kg) $q = q_v + q_c + q_l$ (representando la suma de vapor de agua, agua de las nubes y hielo de las nieves respectivamente), humedad específica (kg/kg) de agua de lluvia q_R y la humedad específica (kg/kg) de la nieve q_s :

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial q}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial q}{\partial y} \right) - \frac{\partial \overline{w'q'}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} + S_{q_v} + S_{q_c} + S_{q_l} - N_{syn} (q - q_{syn}) \\ \frac{dq_R}{dt} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial q_R}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial q_R}{\partial y} \right) - \frac{\partial \overline{w'q'_R}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} + S_{q_R} - V_{TR} \frac{\partial q_R}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} \\ \frac{dq_s}{dt} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial q_s}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial q_s}{\partial y} \right) - \frac{\partial \overline{w'q'_s}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} + S_{q_s} - V_{TS} \frac{\partial q_s}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} \end{aligned} \quad (26)$$

con

$S_{q_v}, S_{q_c}, S_{q_l}, S_{q_R}, S_{q_s}$ = términos de fuentes micro-físicas

q_{syn} = humedad específica de escala sinóptica del vapor de agua más el hielo y agua de las nubes

V_{TR}, V_{TS} = velocidad terminal de la lluvia / nieve

la humedad específica del vapor de agua q_v y la humedad específica saturada q_{vs} se determinan de

$$q_V = \min(q, q_{VS}),$$

$$q_{VS} = \frac{0.622e_{VS}}{(p - 0.378e_{VS})}, \quad (27)$$

p = presión (Pa), y

$$e_{VS} = 610 \exp\left(\frac{\lambda}{R_v} \left(\frac{1}{273.15} - \frac{1}{T}\right)\right),$$

$$\lambda = \begin{cases} L_v, & \text{if } T \geq 273.15 \\ L_s, & \text{if } T < 273.15 \end{cases} \quad (28)$$

Se supone que el agua y hielo de las nubes coexisten solo entre los -15°C y 0°C con una relación lineal usada entre estos dos límites (Rotstayn (1997)).

$$q_C = \left(1 + \left(\frac{T - 273.15}{15}\right)\right)(q - q_V),$$

$$q_I = q - q_V - q_C. \quad (29)$$

Los términos fuente en las ecuaciones de conservación son

$$S_{q_V} = -P_{VC} - P_{VI} - P_{VR} - P_{VS},$$

$$S_{q_C} = P_{VC} - P_{CI} - P_{CR} - P_{CS},$$

$$S_{q_I} = P_{VI} + P_{CI} - P_{IR} - P_{IS}, \quad (30)$$

$$S_{q_R} = P_{VR} + P_{CR} + P_{IR} - P_{RS},$$

$$S_{q_S} = P_{VS} + P_{CS} + P_{IS} + P_{RS}.$$

Los términos usados por este programa para calcular los términos micro-físicos de producción son:

$$\begin{aligned}
P_{VC} &= \left(\frac{q_V - q_{VS}}{\Delta t} \right) \left(1 + \frac{L_V}{c_p} \frac{dq_{VS}}{dT} \right)^{-1} \\
P_{VI} &= \left(\frac{q_V - q_{VS}}{\Delta t} \right) \left(1 + \frac{L_S}{c_p} \frac{dq_{VS}}{dT} \right)^{-1} \\
P_{CI} &= 0 \\
P_{IR} &= 0 \\
P_{CR} &= P_{CR1} + P_{CR2} \\
P_{CR1} &= \frac{0.104 E_{CR1} g}{\mu} H(q_C - q_{C0}) \left(\frac{\rho^4 q_C^7}{N_C \rho_W} \right)^{1/3} \\
P_{CR2} &= \frac{\pi}{4} E_{CR2} a_R N_{R0} \Gamma(3.5) \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{1/2} q_C \lambda_R^{-3.5} \\
P_{CS} &= \frac{\pi}{4} E_{CS} a_S N_{S0} \Gamma(3.25) \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{1/2} q_C \lambda_S^{-3.25} \\
P_{IS} &= P_{IS1} + P_{IS2} \\
P_{IS1} &= 0.005 E_{IS} (q_I - q_{I0}) H(q_I - q_{I0}) \\
P_{IS2} &= \frac{\pi}{4} E_{IS} a_S N_{S0} \Gamma(3.25) \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{1/2} q_I \lambda_S^{-3.25} \\
P_{VR} &= \min\left(0, \frac{q_V}{q_{VS}} - 1\right) \frac{q_R \lambda_R^2}{\rho_W} \left(\frac{0.5 + \frac{0.349}{\mu^{1/2}} \left(\frac{\rho_W g \rho}{\lambda_R^3} \right)^{1/4}}{\frac{L_V^2}{KR_V T^2} + \frac{R_V T}{e_{VS} D_V}} \right) \\
P_{VS} &= \frac{2\pi}{\rho} \min\left(0, \frac{q_V}{q_{VS}} - 1\right) \left(\frac{0.78}{\lambda_S^2} + \frac{0.31 \Gamma(2.625) a_S^{1/2}}{\nu^{1/2} \lambda_S^{2.625}} \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{1/4} \right) \left(\frac{L_S^2}{KR_V T^2} + \frac{R_V T}{e_{VS} D_V} \right) \\
P_{RS} &= -q_S / \Delta t \quad T > 275.15.
\end{aligned} \tag{31}$$

donde H es la función de Heaviside,

$$\begin{aligned}
\lambda_R &= \left(\frac{\pi \rho_R N_{R0}}{\rho q_R} \right)^{1/4}, \quad \lambda_S = \left(\frac{\pi \rho_S N_{S0}}{\rho q_S} \right)^{1/4}, \\
a_R &= 141.5, \quad a_S = 4.84, \\
q_{C0} &= \frac{4}{3} \pi \rho_W r_C^3 N_C \rho^{-1}, \\
q_{CI} &= \begin{cases} \rho 2.316 \times 10^{(-6.0 - 0.0413(T - 273.15))}, & \text{if } T > 255.65 \\ \rho 1.158 \times 10^{(-4.0 + 0.0519(T - 273.15))}, & \end{cases}, \\
E_{CR1} &= 0.55, \quad E_{CR2} = 0.7, \quad E_{CS} = 0.7, \quad E_{IS} = \exp(0.025(T - 273.15)).
\end{aligned} \tag{32}$$

otras constantes son

$$\begin{aligned}
L_V &= 2.5 \times 10^6 \text{ J kg}^{-1}, \quad L_S = 2.83 \times 10^6 \text{ J kg}^{-1}, \\
N_C &= 3 \times 10^8 \text{ m}^{-3}, \quad r_{C0} = 1 \times 10^{-5} \text{ m}, \quad N_{R0} = 8 \times 10^6 \text{ m}^{-4}, \quad N_{S0} = 3 \times 10^6 \text{ m}^{-4}, \\
\rho_W &= 1000 \text{ kg m}^{-3}, \quad \rho_S = 100 \text{ kg m}^{-3}, \quad R_V = 461.5 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}, \\
\mu &= 1.8 \times 10^{-5} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}, \quad \nu = 1.35 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \\
K &= 0.025 \text{ J m}^{-1} \text{ s}^{-1}, \quad D_V = 2.5 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}.
\end{aligned}$$

Para cerrar las ecuaciones de la turbulencia en las ecuaciones promedio se utiliza un enfoque de gradiente de difusión que depende de un coeficiente de difusión K y de los gradientes de las variables promedio. Usando una notación tensorial cartesiana los flujos quedan como

$$\begin{aligned}
\overline{u'_i u'_j} &= \frac{2}{3} E \delta_{ij} - K \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \\
\overline{u'_i \theta'_v} &= -K \left(\frac{\partial \theta_v}{\partial x_i} - \gamma e_v \right), \\
\overline{u'_i \phi'} &= -2.5K \frac{\partial \phi}{\partial x_i},
\end{aligned} \tag{33}$$

donde i, j son subíndices para las tres direcciones coordenadas. u_i, u_j representan a las velocidades,

$$\delta = \begin{cases} 1 \dots \text{si} \dots i = j \\ 0 \dots \text{si es lo contrario} \end{cases}$$

$$\gamma_{e_v} = 0.00065 \text{ K m}^{-1}$$

ϕ representa un escalar.

El modelo resuelve las ecuaciones de energía cinética (E) y la tasa de disipación viscosa (ε)

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial E}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial E}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(K \frac{\partial E}{\partial \sigma} \right) + P_s + P_b - \varepsilon, \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon}{dt} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(c_{\varepsilon 0} K \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} \right) \\ & + \frac{\varepsilon}{E} (c_{\varepsilon 1} \max(P_s, P_s + P_b) - c_{\varepsilon 2} \varepsilon), \end{aligned} \quad (35)$$

donde

$$\begin{aligned} P_s = & 2K \left(\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \right) \\ & + K \left(\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)^2 \right) \\ & + K \left(\left(\frac{\partial u}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right)^2 \right), \quad (36) \\ P_b = & -\frac{g}{\theta_v} K \left(\frac{\partial \theta_v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} - \gamma_{e_v} \right), \end{aligned}$$

con

$$w = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^{-1} \left(\dot{\sigma} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} - v \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right), \quad (37)$$

$$K_H = \max(10, K), \quad K = c_m \frac{E^2}{\varepsilon}, \quad c_m = 0.09, \quad c_{z0} = 0.69, \quad c_{z1} = 1.46, \quad \text{and} \quad c_{z2} = 1.83.$$

La energía cinética y la tasa de disipación viscosa son mejoradas para la cima de la capa límite convectiva donde los niveles de turbulencia pueden ser subestimados usando el los enfoques generales.

La radiación en la superficie se utiliza para el cálculo de las condiciones de frontera de la superficie y de las variables de escalamiento con el componente de onda corta de Mahrer y Pielke (1977).

$$R_{sw(clear-sky)}^{in} = \begin{cases} (a_g - a_w(z_s)) S_{\text{slope}} S_0 \cos \chi; & \text{for } \cos \chi > 0 \\ 0; & \text{for } \cos \chi \leq 0 \end{cases} \quad (38)$$

y el componente de onda corta para cielo despejado de Dilley and O'Brien (1999)

$$R_{sw(clear-sky)}^{in} = \left(59.38 + 113.7 \left(\frac{T(\sigma_1)}{273.15} \right)^6 + 96.96 \left(\frac{r(\sigma_1)}{25} \right)^{1/2} \right) \cos \alpha, \quad (39)$$

con

$$\begin{aligned} a_g &= 0.485 + 0.515 \left(1.014 - 0.16 / \sqrt{\cos \chi} \right) \\ a_w(\sigma) &= 0.039 \left(\frac{r(\sigma)}{\cos \chi} \right)^{0.3}, \end{aligned} \quad (40)$$

$r(\sigma) = \int_{\sigma}^{z_T} \rho q d\sigma$ es la magnitud de la columna de vapor de agua (kg/m^2 o mm) entre z_T y σ , χ es el ángulo de cenit, y S_0 es la constante solar (1367 W/m^2).

La inclinación solar, el cenit y los ángulos de elevación del terreno se calculan usando

$$\begin{aligned}
\sin \delta_s &= \sin(23.5\pi_c / 180) \sin(2\pi_c \text{ day} / 365), \\
\cos \chi &= \cos(\text{lat}) \cos \delta_s \cos(\pi_c (\text{hour} - 12) / 12) + \sin(\text{lat}) \sin \delta_s, \\
S_{\text{slope}} &= \frac{\cos i}{\cos \chi}, \quad \cos i = \cos \alpha \cos \chi + \sin \alpha \sin \chi \cos(\beta - \eta), \\
\alpha &= \tan^{-1} \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right), \quad \eta = \tan^{-1} \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^{-1} \right) - \frac{\pi_c}{2}, \\
\beta &= \sin^{-1} (\cos \delta_s \sin(\pi_c (\text{hour} - 12) / 12) / \sin \chi),
\end{aligned} \tag{41}$$

donde lat es la latitud, day es el día del año, $hour$ es la hora del día y $\pi_c = 3.14159265$.

Estos componentes son modificados para tomar en cuenta un cielo nublado usando un enfoque basado en Stephens (1978). Este método supone que las contribuciones de un cielo despejado y cielo nublado pueden ser tratadas por separado.

La radiación solar entrante de onda corta es

$$R_{sw}^{in}(\sigma) = R_{sw}^{in}(\text{clear-sky}) \Psi_{\text{Transmission}}, \tag{42}$$

donde

$$\begin{aligned}
\Psi_{\text{Transmission}} &= \begin{cases} \exp(-16W^{in} + 13W^{in^2}), & W^{in} \leq 0.11 \\ 0.2; & W^{in} > 0.11 \end{cases}, \\
\Psi_{\text{Absorption}} &= \begin{cases} 0.3W^{in^{1/2}}; & W^{in} \leq 0.11 \\ 0.1; & W^{in} > 0.11 \end{cases}.
\end{aligned} \tag{43}$$

La radiación entrante de onda larga es

$$\begin{aligned}
R_{iw}^{in}(\sigma) &= R_{iw(clear-sky)}^{in} (1 - \varepsilon_{iw}^{in}(\sigma)) + \varepsilon_{iw}^{in}(\sigma) \sigma_{SB} T^4(\sigma), \\
\varepsilon_{iw}^{in}(\sigma) &= \min(0.9, 1 - \exp(-158W^{in})),
\end{aligned}
\tag{44}$$

con el camino de agua líquida entrante dado por

$$W^{in} = \int_{\sigma}^{\sigma_T} \rho_a \min(0.0003, q_c) d\sigma.
\tag{45}$$

El calentamiento y enfriamiento radiativo en cada nivel del modelo es tomado en cuenta mediante el termino fuente en la ecuación para la temperatura con

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{RADIATION} = \left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{RADIATION(clear-sky)} + \frac{1}{\rho c_p} \frac{\partial \Psi_{Heat}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z},
\tag{46}$$

donde

$$\Psi_{Heat}(\sigma) = R_{iw(clear-sky)}^{in} \Psi_{Absorption} + R_{iw}^{in}(\sigma) - R_{iw}^{out}(\sigma),
\tag{47}$$

con los componentes de onda corta y larga entrantes de las expresiones anteriores y con la radiación de onda larga saliente de

$$\begin{aligned}
R_{iw}^{out}(\sigma) &= R_{iw(clear-sky)}^{out} (1 - \varepsilon_{iw}^{out}(\sigma)) + \varepsilon_{iw}^{out}(\sigma) \sigma_{SB} T^4(\sigma), \\
\varepsilon_{iw}^{out}(\sigma) &= \min(0.9, 1 - \exp(-130W^{out})),
\end{aligned}
\tag{48}$$

con el camino de agua líquida saliente

$$W^{out} = \int_{z_g}^{\sigma} \rho_a \min(0.0003, q_c) d\sigma . \quad (49)$$

El modelo es inicializado en cada punto de la malla con valores interpolados para u_s , v_s , θ_{vs} , q_s de análisis sinópticos. Las iso-líneas de estos valores son orientadas para ser paralelas a un nivel medio del mar. Los niveles de turbulencia son puestos a sus valores mínimos y el modelo es inicializado a media noche. Los valores de la temperatura y humedad de la superficie son puestos a los valores de suelo profundo especificados con la temperatura de superficie ajustada a la altura del terreno usando la tasa sinóptica. En la cima de frontera todas las variables son puestas en sus valores sinópticos.

B.2 El módulo de contaminación atmosférica

El *Eulerian Grid Module* (EGM por sus siglas en inglés) consiste en soluciones basadas en una descripción Euleriana para mallas anidadas de las ecuaciones de concentración media y, opcionalmente, de las ecuaciones de varianza que representan la advección, difusión, reacciones químicas y emisiones. En este módulo se incluyen también los procesos de deposición seca y húmeda.

La ecuación para la concentración χ es similar a las ecuaciones para la temperatura potencial virtual, y humedad específica, e incluye los términos de advección y difusión, así como los términos que representan las emisiones de contaminantes S_χ y reacciones químicas R_χ .

$$\frac{d\chi}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{Hx} \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{Hy} \frac{\partial \chi}{\partial y} \right) - \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right) \frac{\partial}{\partial \sigma} (\overline{w' \chi'}) + S_\chi + R_\chi . \quad (50)$$

El flujo vertical de la concentración incluye flujos de contra-gradiente como sigue

$$\overline{w'\chi'} = -K_x \frac{\partial \chi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} + \frac{(1-c_{\chi 3}) E g}{c_{\chi 1} \varepsilon \theta_v} \overline{\theta'_v \chi'} \quad (51)$$

con

$$\begin{aligned} \frac{d\overline{\theta'_v \chi'}}{dt} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{Hx} \frac{\partial \overline{\theta'_v \chi'}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{Hy} \frac{\partial \overline{\theta'_v \chi'}}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(K_x \frac{\partial \overline{\theta'_v \chi'}}{\partial \sigma} \right) \\ & + (K + K_x) \left(\left(\frac{\partial \theta_v}{\partial x} + \frac{\partial \theta_v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial x} + \frac{\partial \chi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial \theta_v}{\partial y} + \frac{\partial \theta_v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial y} + \frac{\partial \chi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \right) \\ & - \overline{w'\theta'_v} \frac{\partial \chi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} - \overline{w'\chi'} \frac{\partial \theta_v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} - \frac{2}{c_x} \frac{\varepsilon}{E} \overline{\theta'_v \chi'}. \end{aligned} \quad (52)$$

donde $C_{\chi 1} = 3.0$, $C_{\chi 3} = 0.5$, $C_x = 1.6$.

Inicialmente χ es puesta con el valor de la concentración del ambiente. Los valores de $\overline{\theta'_v \chi'}$ son inicializados a cero si las condiciones son térmicamente estables, y si los contra-gradientes son despreciables para una simulación en particular, la solución de la ecuación anterior se omite y $\overline{\theta'_v \chi'}$ es igualada a cero.

En el módulo de trazador, para SO₂ en el modo de química, la varianza de la concentración $\overline{\chi'^2}$ puede ser calculada usando la siguiente ecuación

$$\frac{d\overline{\chi'^2}}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{Hx} \frac{\partial \overline{\chi'^2}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{Hy} \frac{\partial \overline{\chi'^2}}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(K_x \frac{\partial \overline{\chi'^2}}{\partial \sigma} \right) + P_V - \varepsilon_V + S_V, \quad (53)$$

con el termino de producción:

$$P_V = \begin{cases} 2K_x \left(\left(\frac{\partial \overline{\chi}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\chi}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \overline{\chi}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{\chi}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \overline{\chi}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \right), & \overline{\chi} \text{ in EGM} \\ 2c_{\chi(LPM)} K \left(\left(\frac{\partial \overline{\chi}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\chi}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \overline{\chi}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{\chi}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \overline{\chi}}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} \right)^2 \right), & \overline{\chi} \text{ in LPM} \end{cases} \quad (54)$$

la tasa de disipación de la varianza de a concentración

$$\varepsilon_x = \frac{2}{c_x} \frac{\varepsilon}{E} \overline{\chi'^2}, \quad (55)$$

y el término de fuente

$$S_V = 2I_E \left(\overline{\chi'^2} \right)^{1/2} S_x, \quad (56)$$

con la intensidad de la fluctuación de la emisión de concentración $I_E = 0.5$ para todas las fuentes.

Los cálculos de la concentración pico-a-media se realizan cuando la contaminación es post-procesada. La concentración, en promedios horarios, es mejorada para obtener los períodos promedios estimados para 10 minutos, 3 minutos, un minuto y un segundo. Las concentraciones pico son calculadas usando la relación de la ley de potencias, pero con un exponente que depende de la intensidad de la fluctuación de la concentración I_C (obtenida de la media y de la varianza de los valores obtenidos de la concentración por el modelo).

$$C_{MAX}(t) = C_{MAX}(3600) \left(\frac{3600}{t} \right)^{\min(0.1+0.25I_C^{1/3}, 0.4)}, \quad (57)$$

con t siendo el período promediado (s), y

$$I_C = \left(\frac{\overline{\chi'^2}}{\overline{\chi}^2} \right)^{1/2}. \quad (58)$$

Es importante notar que el enfoque pico-a-media es válido solo para series de tiempos grandes y es típicamente usado para obtener buenos resultados en corridas de modelos anuales.

El modelo puede ser corrido en modo trazador, modo de química, o modo de polvo. En el modo de trazador la única reacción química es un decaimiento exponencial, donde la tasa de decaimiento es una entrada en el modelo. En el modo de química, la fotoquímica de la fase gaseosa se basa en el mecanismo semiempírico llamado "Set de Reacciones Genéricas (GRS por sus siglas en inglés) de Azzi et al. (1992) con la modificación del peróxido de hidrógeno de Venkatram et al. (1997). También se incluyen reacciones de fases gaseosas y líquidas con dióxido de azufre y partículas, con las reacciones de fases líquidas basadas en Seinfeld y Pandis (1998). En el módulo de polvo se calcula la concentración de contaminantes para cuatro rangos de tamaño de partícula: $PM_{2.5}$, PM_{10} , PM_{20} , PM_{30} . Los cálculos en el modelo en realidad están hechos para $PM_{2.5}$, PM_{10} , PM_{10-20} , PM_{20-30} . Esta categorización permite que los tamaños representativos de las partículas sean usados para tomar en cuenta la deposición seca y húmeda. Se permite también el decaimiento exponencial de las partículas, tal y como es permitido en el módulo de trazador, pero no se incluyen transformaciones químicas o procesos de crecimiento de partículas.

La formulación de la deposición seca para los contaminantes en forma gaseosa es tal que todos los escalares se comportan como calor en términos de longitud de rugosidad y función de estabilidad (Physick (1994)). La deposición húmeda en el modo de química o de polvo es importante únicamente para gases altamente solubles y aerosoles. Los únicos contaminantes removidos por procesos húmedos son SO_2 , y H_2O_2 , $PM_{2.5}$, PM_{10} , PM_{30} .

El módulo de partícula Lagrangiana (LPM por sus siglas en inglés) puede ser usado en la anidación más interna para fuentes puntuales para permitir una cantidad más detallada de los efectos cercanos a la fuente, incluyendo la elevación gradual de la pluma y la dispersión cercana a la fuente. EL LPM utiliza un enfoque PARTPUFF como lo describe Hurley (1994), donde la masa es representada como una nube en la dirección horizontal, y como partícula en la dirección vertical. Esta configuración ha sido exitosamente utilizada en el Modelo

Lagrangiano de Dispersión Atmosférica (LADM por sus siglas en inglés, Physick et al., 1994). La química es tomada en cuenta para un acoplamiento directo con el EGM, sin la necesidad de convertir la concentración del contaminante secundario de nuevo a una masa de partícula. Esto es realizado al rastrear las emisiones primarias para una fuente en particular con el LGM y considerando el EGM para las reacciones. Los procesos de deposición son despreciados en el LPM. Una vez que las partículas han viajado por una cierta cantidad de tiempo (entrada en el modelo), la partícula ya no es rastreada y su masa es convertida a concentración y puesta dentro del mallado del EGM.

En las direcciones horizontales, la posición de la partícula es actualizada a través de la advección por el viento del ambiente con la difusión tomada en cuenta mediante la relación de amplitud de una nube basada en la teoría estadística de difusión

$$\frac{d\sigma_y^2}{dt} = 2(\sigma_u^2 + \sigma_{up}^2) T_{Lu} \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{T_{Lu}}\right) \right), \quad (59)$$

donde σ_u^2 , σ_{up}^2 son varianzas de las velocidades horizontales del medio ambiente y de la altura de la puma respectivamente,

$$\sigma_u^2 = \min\left(0.01, E - \frac{1}{2} w'^2\right), \quad (60)$$

donde la escala horizontal de tiempo Lagrangiana del ambiente es

$$T_{Lu} = \frac{2\sigma_u^2}{C_0 \varepsilon} \quad (61)$$

y $C_0 = 3.0$

En la dirección vertical se actualiza la posición de la partícula usando

$$\frac{d\sigma_{particle}}{dt} = \dot{\sigma} + \dot{\sigma}' + \dot{\sigma}'_p, \quad (62)$$

donde $\sigma_{particle}$ es la posición de la partícula en las coordenadas del terreno, $\dot{\sigma}$ es la velocidad vertical media del medio ambiente, $\dot{\sigma}'$ es la perturbación de la velocidad vertical debido a la turbulencia en el ambiente, $\dot{\sigma}'_p$ es la perturbación de la velocidad vertical debido a los efectos de la elevación de la pluma.

La perturbación de la velocidad vertical debido a la turbulencia en el ambiente se determina con

$$\begin{aligned} \sigma' &= w' \frac{\partial \sigma}{\partial z}, \\ dw' &= (a_0 + a_1 w' + a_2 w'^2) dt + b_0 \xi, \end{aligned} \quad (63)$$

donde ξ es un número aleatorio de una distribución Gaussiana con media cero y varianza uno, y

$$\begin{aligned} b_0 &= \sqrt{C_0 \varepsilon dt}, \\ a_2 &= \frac{\frac{1}{3} \left(\frac{\partial \overline{w'^3}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{w'^4}}{\partial z} \right) - \frac{\overline{w'^3}}{2\overline{w'^2}} \left(\frac{\partial \overline{w'^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{w'^3}}{\partial z} - C_0 \varepsilon \right) - \overline{w'^2} \frac{\partial \overline{w'^2}}{\partial z}}{\frac{\overline{w'^4}}{w'^4} - \frac{(\overline{w'^3})^2}{\overline{w'^2}} - (\overline{w'^2})^2}, \\ a_1 &= \frac{1}{2\overline{w'^2}} \left(\frac{\partial \overline{w'^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{w'^3}}{\partial z} - C_0 \varepsilon - 2\overline{w'^3} a_2 \right), \\ a_0 &= \frac{\partial \overline{w'^2}}{\partial z} - \overline{w'^2} a_2. \end{aligned} \quad (64)$$

La varianza vertical $\overline{w'^2}$ puede ser obtenida de la ecuación dada por Gibson y Launder (1978) y Andren (1990) cuando todos los términos de advección y

difusión son despreciados y se hacen las suposiciones de capa límite (Mellor and Yamada,1982).

$$\overline{w'^2} = \left(\frac{2}{3} E + \frac{E}{c_{\epsilon 1} \epsilon} \left((2 - c_{\epsilon 2} - c_{w2} \frac{l}{kz}) P_s + (2 - c_{\epsilon 3} - c_{w3} \frac{l}{kz}) P_b - \frac{2}{3} \epsilon \right) \right) \left(1 + \frac{c_{w1} l}{c_{\epsilon 1} kz} \right)^{-1}, \quad (65)$$

con constantes de Rodi (1985)

$$c_{\epsilon 1} = 2.20, c_{\epsilon 2} = 1.63, c_{\epsilon 3} = 0.73, c_{w1} = 1.00, c_{w2} = 0.24, c_{w3} = 0.0.$$

Los momentos de orden superior de la distribución vertical de la velocidad $\overline{w'^3}$ y $\overline{w'^4}$ se determinan de la varianza de la velocidad vertical usando

$$\begin{aligned} \overline{w'^3} &= 0.0, \\ \overline{w'^4} &= 3.0 \left(\overline{w'^2} \right)^2. \end{aligned} \quad (66)$$

La perturbación de la velocidad vertical debido a los efectos de la elevación de la pluma se determina utilizando un enfoque de caminata aleatoria

$$\dot{\sigma}'_p = \left(w_p + \xi \sigma_{wp} \right) \frac{\partial \sigma}{\partial z}, \quad (67)$$

donde ξ es un número aleatorio de una distribución Gaussiana con media cero y varianza uno.

Para calcular la concentración total de contaminantes para los cálculos en el módulo de química así como en el promediado del tiempo, las partículas son convertidas a concentraciones en los puntos de la malla del EGM usando la ecuación para el incremento de la concentración de una partícula en un punto de la malla

$$\Delta\chi = \frac{\Delta m}{2\pi_c \sigma_y^2 \Delta z} \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma_y^2}\right), \quad (68)$$

donde Δm es la masa de la partícula, σ_y es la desviación estándar lateral de la pluma, Δz es el espaciamiento vertical de la malla, r es la distancia horizontal desde la posición de la partícula hasta el punto de la malla.

Las ecuaciones para calcular la elevación media de la pluma para una fuente puntual se basan en el modelo de Glendening *et al.* (1984) y simplificadas por Hurley y Manins (1995)

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dt} &= 2R(\alpha w_p^2 + \beta u_a w_p), \\ \frac{dF}{dt} &= -\frac{sM}{u_p} \left(\frac{M}{M_{eff}} u_a + w_p \right), \\ \frac{dM}{dt} &= F, \\ \frac{dx_p}{dt} &= u, \\ \frac{dy_p}{dt} &= v, \\ \frac{dz_p}{dt} &= w_p, \end{aligned} \quad (69)$$

con

$$\begin{aligned} G &= \frac{I_a}{I_p} u_p R^2, \\ F &= g u_p R^2 \left(1 - \frac{I_a}{I_p} \right), \\ M &= \frac{I_a}{I_p} u_p R^2 w_p, \\ w_p &= \frac{M}{G}, \\ R &= \sqrt{\frac{(G+F/g)}{u_p}}, \end{aligned}$$

$$u_p = \sqrt{u_a^2 + w_p^2},$$

$$u_a = \sqrt{u^2 + v^2},$$

donde

G, F, M = volumen de la pluma, flujo de flotación, flujo de cantidad de movimiento

R = radio de la pluma

u, v, w = componentes cartesianos x, y, z de la velocidad

T = temperatura

s = frecuencia de la flotación

subíndice a se refiere a variables del medio ambiente, subíndice p se refiere a variables de la pluma

$\alpha = 0.1, \beta = 0.6$

$\frac{M}{M_{eff}} = \frac{1}{2.225}$, g = constante gravitacional (9.81 m/s²).

Las condiciones iniciales para estas ecuaciones son

$$G_o = \frac{T_a}{T_s} w_s R_s^2, F_o = N_E g w_s R_s^2 \left(1 - \frac{T_a}{T_s}\right), M_o = \frac{T_a}{T_s} w_s^2 R_s^2, R_o = \sqrt{\frac{w_s}{\sqrt{u_s^2 + v_s^2}}}, \quad (70)$$

donde N_E es el factor de corrección de la flotación y el subíndice s representa las condiciones de salida de la chimenea.

La elevación de la pluma es finalizada cuando la tasa de disipación de la pluma decrece a niveles ambientales.

En el módulo EGM, la elevación de la pluma para una fuente puntual se toma en cuenta al soltar contaminantes a la altura efectiva de la pluma mediante el uso de las ecuaciones anteriores con una profundidad de la pluma que supone una forma horizontal a vertical 2:1 y que el radio de la pluma, para la concentración, es dos tercios del radio visual R . Las emisiones de contaminantes son entonces distribuidas uniformemente a los puntos de la malla

dentro de la profundidad de la pluma en el punto horizontal de la malla más cercano.

En el módulo LPM, se utiliza el enfoque de una elevación gradual de la pluma con un componente aleatorio que depende de la desviación estándar de la velocidad vertical debido a los efectos de la elevación de la pluma y una dispersión mejorada en la dirección horizontal. Las desviaciones estándar de la velocidad suponen una forma ligeramente más simplificada de la ecuación anterior para G , una forma horizontal a vertical de 2:1, un radio de la pluma para la concentración de dos tercios del radio visual R , y una desviación estándar de la mitad del radio. Esto resulta en las siguientes ecuaciones

$$\sigma_{wp} = \frac{\alpha w_p^2 + \beta u_a w_p}{3\sqrt{2}u_p}, \text{ and } \sigma_{wp} = 2\sigma_{wp}. \quad (71)$$

El efecto de las estelas de edificaciones en la elevación y dispersión de la pluma se basa en el modelo PRIME de Schulman et al. (2000). El modelo PRIME utiliza un sistema de coordenadas particular tal que cada edificio para empezar debe de ser transformado a este sistema. Las dimensiones efectivas de los edificios, cavidades y dimensiones de las estelas son entonces calculadas para cada edificio y usadas para determinar la meteorología combinada con las estelas y la turbulencia. La elevación de la pluma es afectada por la meteorología y turbulencia modificadas para las fuentes puntuales en los modos EGM y LPM, mientras que la dispersión es influenciada solamente para las plumas en el modo LPM. Los cálculos en el modo LPM se realizan tanto para las regiones de estelas como para las de cavidades, en vez de especificar una concentración uniforme en la cavidad como se hace en PRIME.

La influencia de las estelas de los edificios en la dispersión en el modo EGM permite que no solo sean incluidas para fuentes puntuales, sino también para fuentes lineales y de área o volumen.

Apéndice C

Video del 8 al 10 de agosto de 2003. Simulación TAPM

El video del periodo del 8 al 10 de agosto de 2003 se encuentra en el CD anexo en la tesis.