Modelado de la Calidad del Aire

Presentando Modelo Gaussiano de dispersión

Marcelo G. Bormioli
mbormio@fi.uba.ar

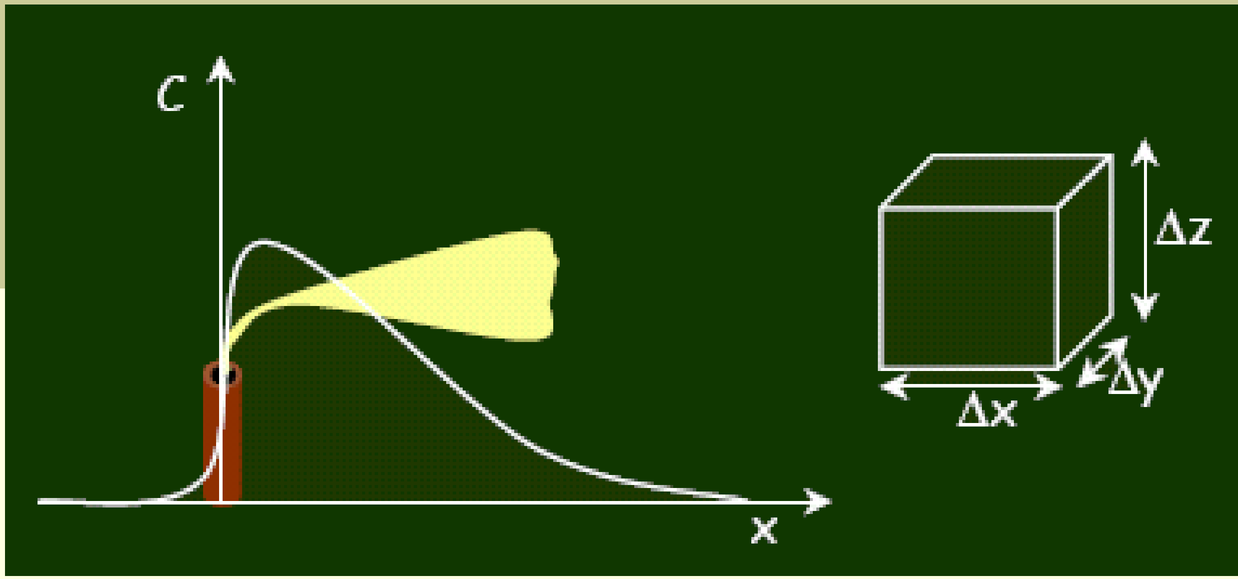
Modelos Gaussianos
Pluma gaussiana

FA-UBA - Lic. Cs. Ambientales

Marcelo G. Bormioli

Fundamentos del modelo gaussiano

- Este tipo de modelo se basa en considerar una grilla de elementos de aire (cajitas de aire una al lado de la otra fijas en el espacio) (modelos Eulerianos). Se para en una y analiza el balance de materia entrando en esos cubo y el saliente con una ecuación similar a la de Difusión molecular de Fick. Luego propaga para cada cubo contiguo.

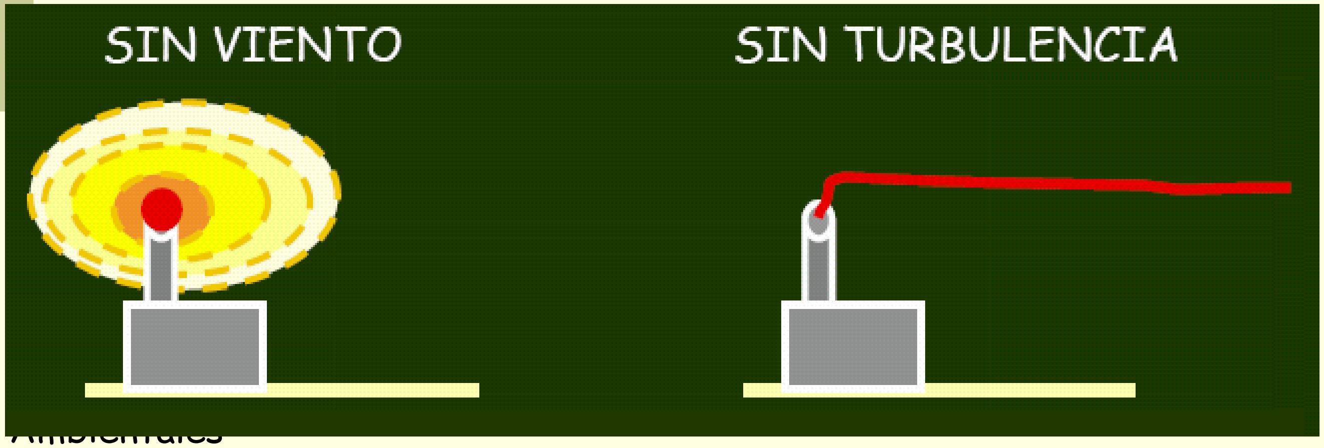


Fundamentos del modelo gaussiano

- Los modelos gaussianos son los que se utilizan más ampliamente para estimar la concentración de un **contaminante no reactivo** producida por una fuente puntual, por ejemplo, la chimenea de una fábrica o el escape de un depósito
- A medida que el contaminante viaja, la pluma se extiende y dispersa en las 3 dimensiones en forma de abanico o similar a un cono.

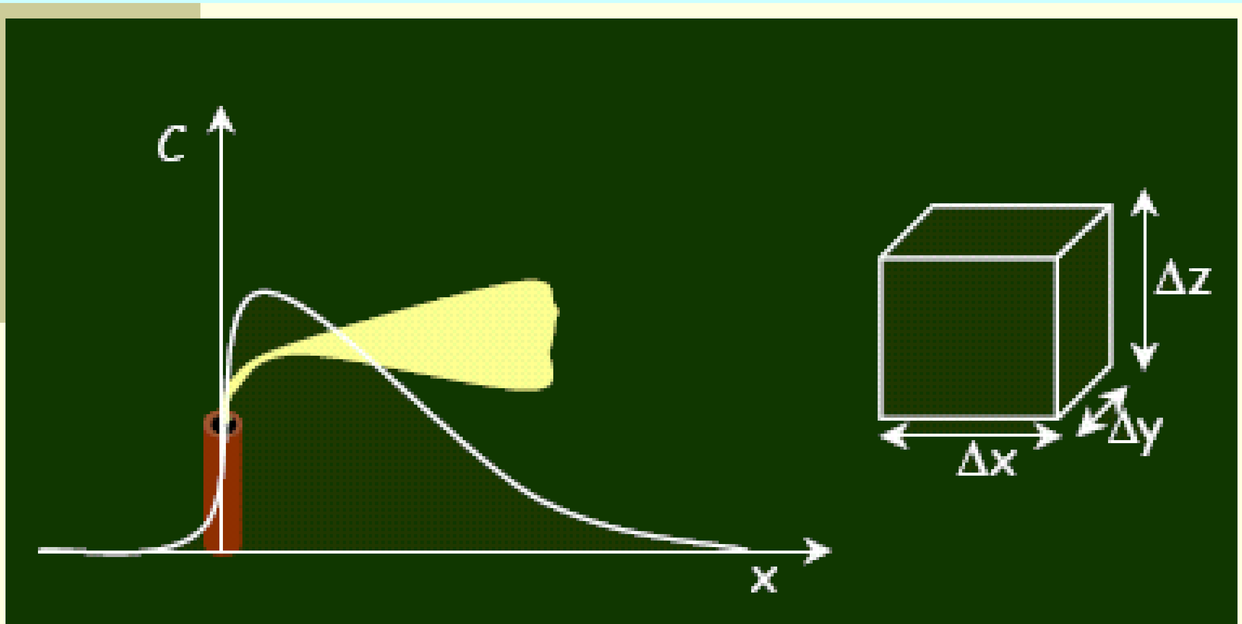
El modelo considera que el transporte del contaminante y su difusión se produce por :

- El ascenso inicial vertical
- Por el viento (movimiento horizontal)
- Por la turbulencia atmosférica (movimiento vertical)



Deducción del modelo

Para separar adecuadamente la influencia de ambos factores (viento y turbulencia), consideremos un elemento de aire de volumen $\Delta x\, \Delta y\, \Delta x$ que se mueve con el viento:

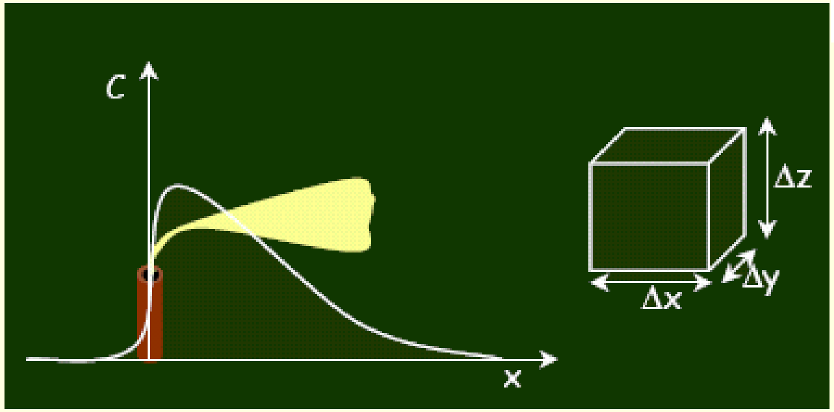


Volumen de la cajita

$V = \Delta X\ \Delta Y\ \Delta Z$

Balance de materia en ese elemento de aire:
Variación de masa de contaminante por unidad de tiempo

FAUBA



Estado estacionario:

la concentración no varía con el tiempo

$$\left(\frac{dc}{dt}=0\right)$$

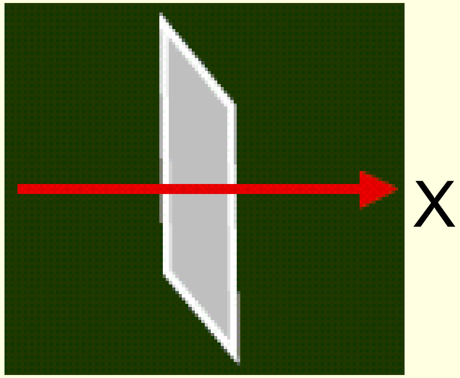
$$\underbrace{\text{Tasa de acumulación}}_{=0} = \text{Tasa de entrada (entorno)} - \text{Tasa de salida} + \text{Tasa de creación} - \text{Tasa de destrucción}$$

Donde la velocidad de acumulación masa es:

$$\frac{\partial m}{\partial t}=\frac{\partial (cV)}{\partial t}=\Delta x.\Delta y.\Delta z\frac{\partial c}{\partial t}$$

V=ΔX ΔY ΔZ

Concen * V= Masa



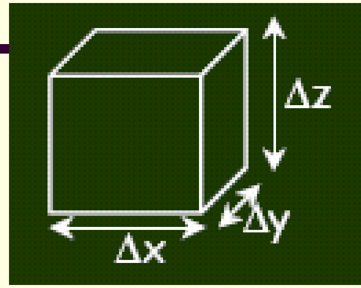
$$Flujo = -K \frac{\partial c}{\partial x}$$

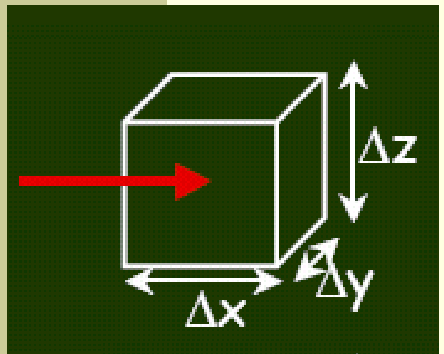
LEY DE DIFUSION DE FICK

El flujo de masa a través de una pared (cantidad de masa por unidad de superficie y unidad de tiempo) es proporcional al gradiente de concentración, cambiado de signo, a través de la pared.

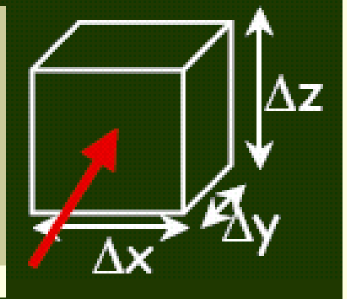
Donde "K" es una constante de proporcionalidad o de difusión.

Cantidad de masa neta por unidad de tiempo que atraviesa las paredes de la caja debido a las turbulencia

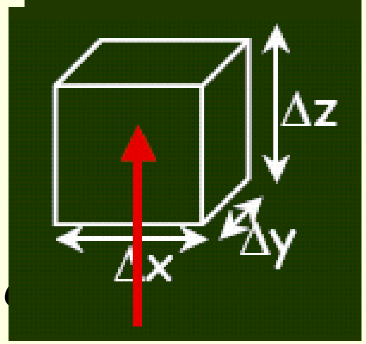




$$Flujo_x = -K_x \frac{\partial c}{\partial x}$$



$$Flujo_y = -K_y \frac{\partial c}{\partial x}$$



$$Flujo_z = -K_z \frac{\partial c}{\partial x}$$

$$Flujo = \frac{masa}{área\ x\ tiempo}$$

Nota:

La ley de Fick fue propuesta originalmente para "difusión molecular". En la atmósfera la dispersión de los contaminantes se produce por turbulencia (+viento), en lugar de difusión, pero se puede suponer que la forma matemática que regula este proceso de turbulencia es análoga a la Ley de FIck modificando los coeficientes K.

Atención en la diversa bibliografía puedes aparecerles las siguientes siglas con el mismo significado de coeficientes de difusión o dispersión

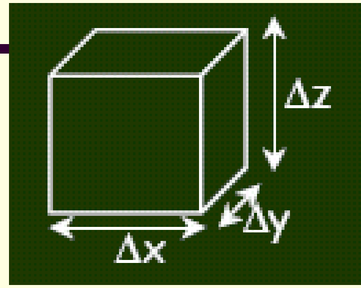
$$K_y \; ; \sigma_y \; ; S_y$$

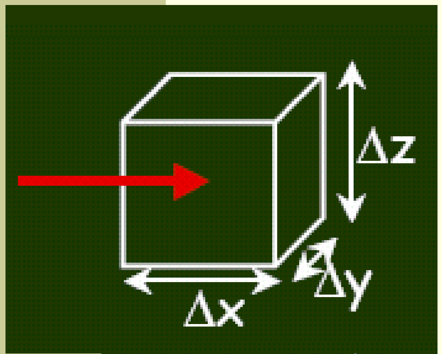
Y son las dispersiones cuadráticas que aparecen en la función gaussiana

Esos coeficientes dependen sus valores, de acuerdo a mejoras que se introducen al modelo para hacerlo mas real. Tienen en cuenta:

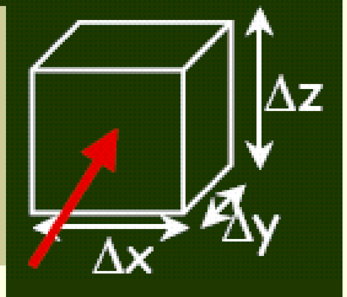
- Las estabilidades atmosféricas
- Rugosidades del terreno
- Otras mejoras

Cantidad de masa neta por unidad de tiempo que atraviesa las paredes de la caja debido a las turbulencia

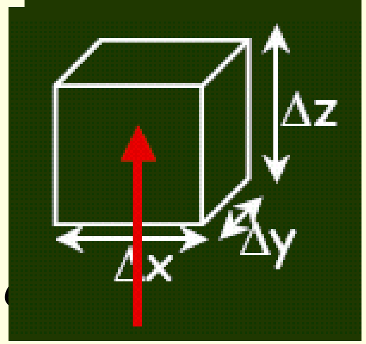




$$Flujo_x = -K_x \frac{\partial c}{\partial x}$$



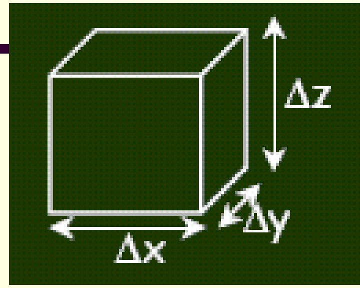
$$Flujo_y = -K_y \frac{\partial c}{\partial x}$$



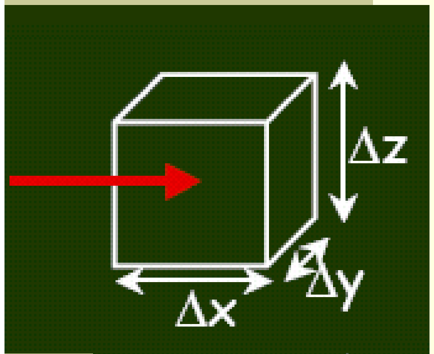
$$Flujo_z = -K_z \frac{\partial c}{\partial x}$$

Esto es lo que entra por cada lado

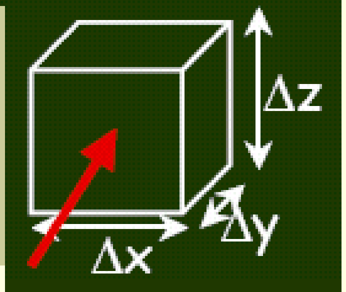
Cuando uno hace el balance de entrada y salida por cada lado del cubo



$$Volumne = \Delta x\ \Delta y\ \Delta z$$

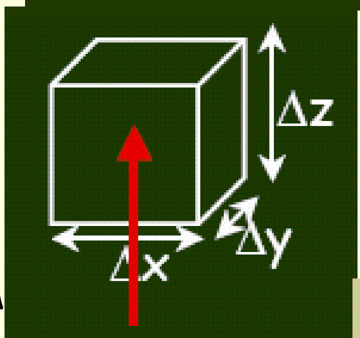


$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[K_x \frac{\partial\ C}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[K_y \frac{\partial\ C}{\partial y}\right] + \frac{\partial}{\partial z}\left[K_z \frac{\partial\ C}{\partial z}\right]$$



En esa ecuación NO HAY VIENTO ni MOVIMIENTO
Si se introduce que pueda haber viento y moverse ➔

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (v_x C)}{\partial x} + \frac{\partial (v_y C)}{\partial y} + \frac{\partial (v_z C)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left[K_x \frac{\partial\ C}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[K_y \frac{\partial\ C}{\partial y}\right] + \frac{\partial}{\partial z}\left[K_z \frac{\partial\ C}{\partial z}\right]$$



Si se introduce que pueda haber creación de contaminante y sumidero en cada celda

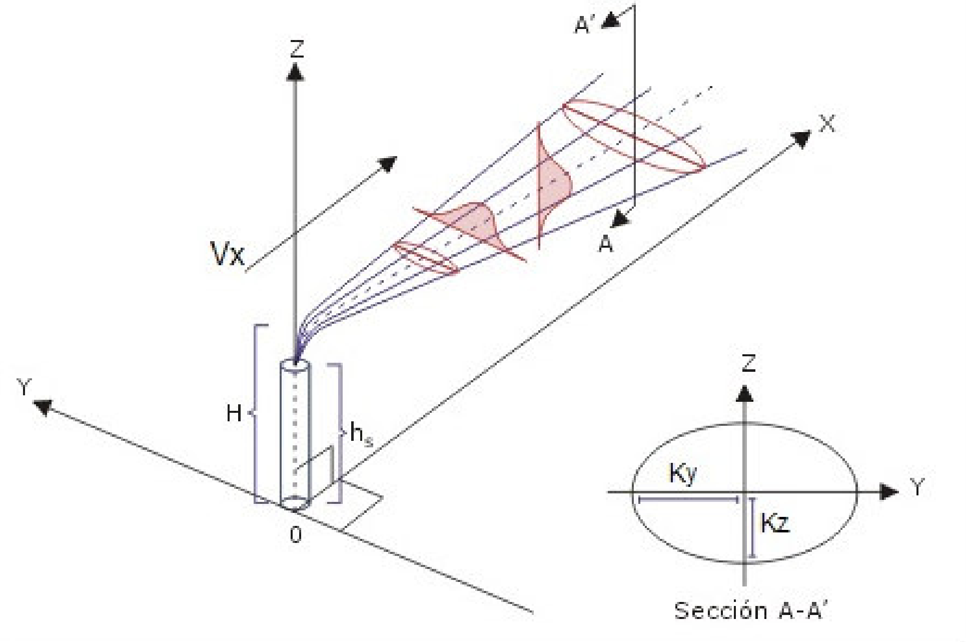
$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (v_x C)}{\partial x} + \frac{\partial (v_y C)}{\partial y} + \frac{\partial (v_z C)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left[K_x \frac{\partial\ C}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[K_y \frac{\partial\ C}{\partial y}\right] + \frac{\partial}{\partial z}\left[K_z \frac{\partial\ C}{\partial z}\right] + T_f - T_S$$

Si el contaminante no reacciona ni se crea ni desparece Tf=Ts=0

En el caso de que el contaminante no reacciona ni se crea ni desparece Tf=Ts=0

La solución en 3 dimensiones son Gaussianas

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



Q caudal de salida de la chimenea (masa/tiempo)

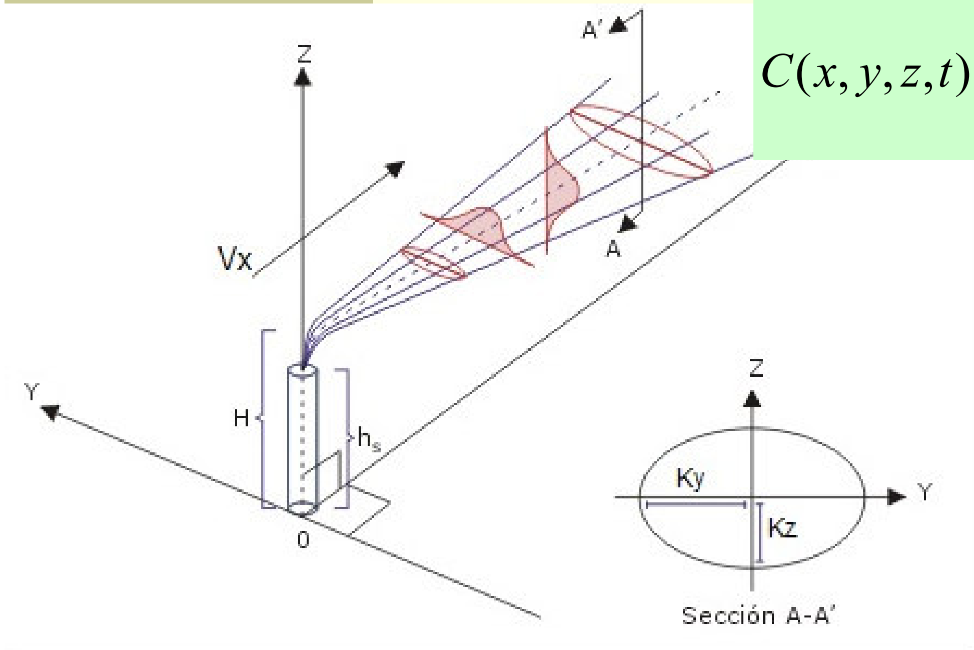
H altura efectiva de la pluma con el empuje

Kx, Ky, Kz coeficientes de turbulencia o constantes de difusión turbulenta.

C(x,y,z,t) La concentración en (x,y,z) en el instante t

El modelo gaussiano si hay una emisión esporádica o instantánea de una cantidad Q durante un tiempo Δt, con viento solo en la dirección x, Si el contaminante no reacciona ni se crea ni desparece Tf=Ts=0

Si el vertido es continuo en el tiempo. Se usa la solución en 2 dimensiones – Una emisión constante de gases desde la chimenea. En x el transporte solo tiene lugar por el viento y no por turbulencias atmosféricas.



$$C(x,y,z,t) = \frac{Q}{4\pi\ x\ \sqrt{K_y K_z}} \exp\left(\frac{y^2\ v_x}{4\ K_y\ x} + \frac{(z-H)^2\ v_x}{4\ K_z\ x}\right)$$

Q caudal de salida de la chimenea (masa/tiempo)

H altura efectiva de la pluma con el empuje

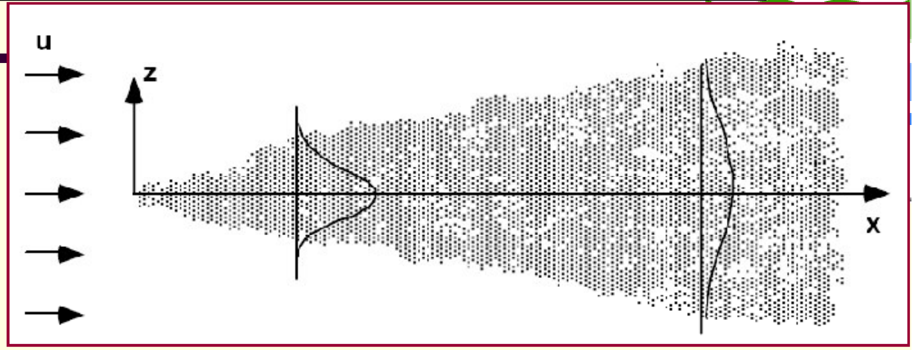
Kx, Ky, Kz coeficientes de turbulencia

C(x,y,z,t) La concentración en (x,y,z) en el instante t

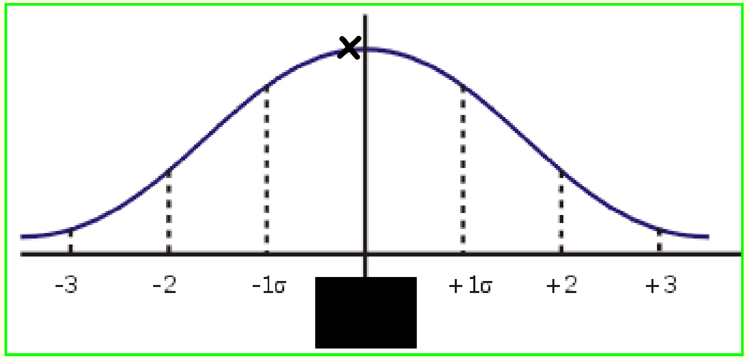
El modelo gaussiano si hay una emisión continua de una cantidad Q, con viento Vx solo en la dirección x,

Modelo gaussiano para contaminantes que no reaccionan

Si ahora suponemos **constantes la tasa de emisión, Q** (masa de contaminante emitida en la unidad de tiempo) y las condiciones atmosféricas, se llega a un estado **estacionario, en la cual el penacho adquiere una forma constante en el tiempo**



La concentración de contaminante es máxima en el eje del penacho, disminuyendo hacia los bordes (distribución normal o de Gauss)



Hipótesis fundamental del modelo gaussiano

La concentración de contaminantes en las direcciones perpendiculares a la del viento puede ser descrita utilizando una distribución normal o de Gauss como la de la figura (campana de Gauss) cuya forma depende de los parámetros **mu** y **sigma**

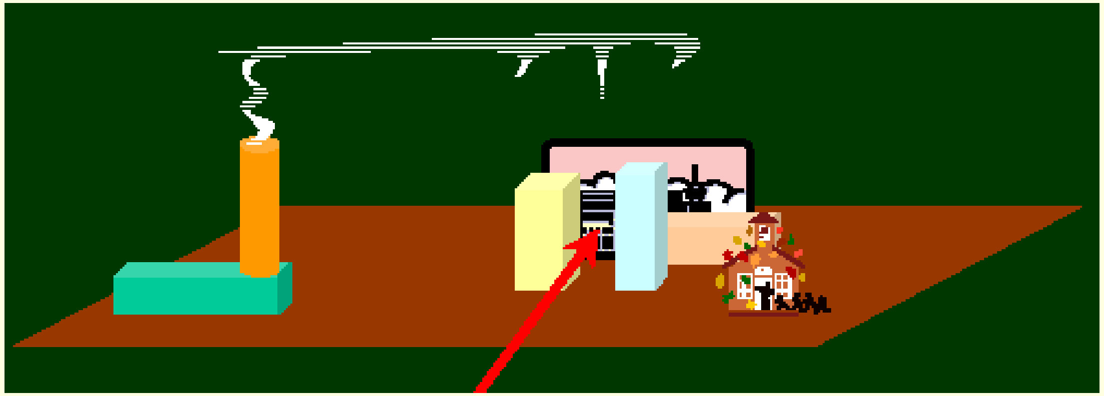
$$f(x) = \frac{1}{\sigma (2\pi)^{1/2}} \exp\left(\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2} \right)$$

Expresión matemática de una distribución de Gauss

— μ (valor medio) indica la posición de la campana (parámetro de centralización)

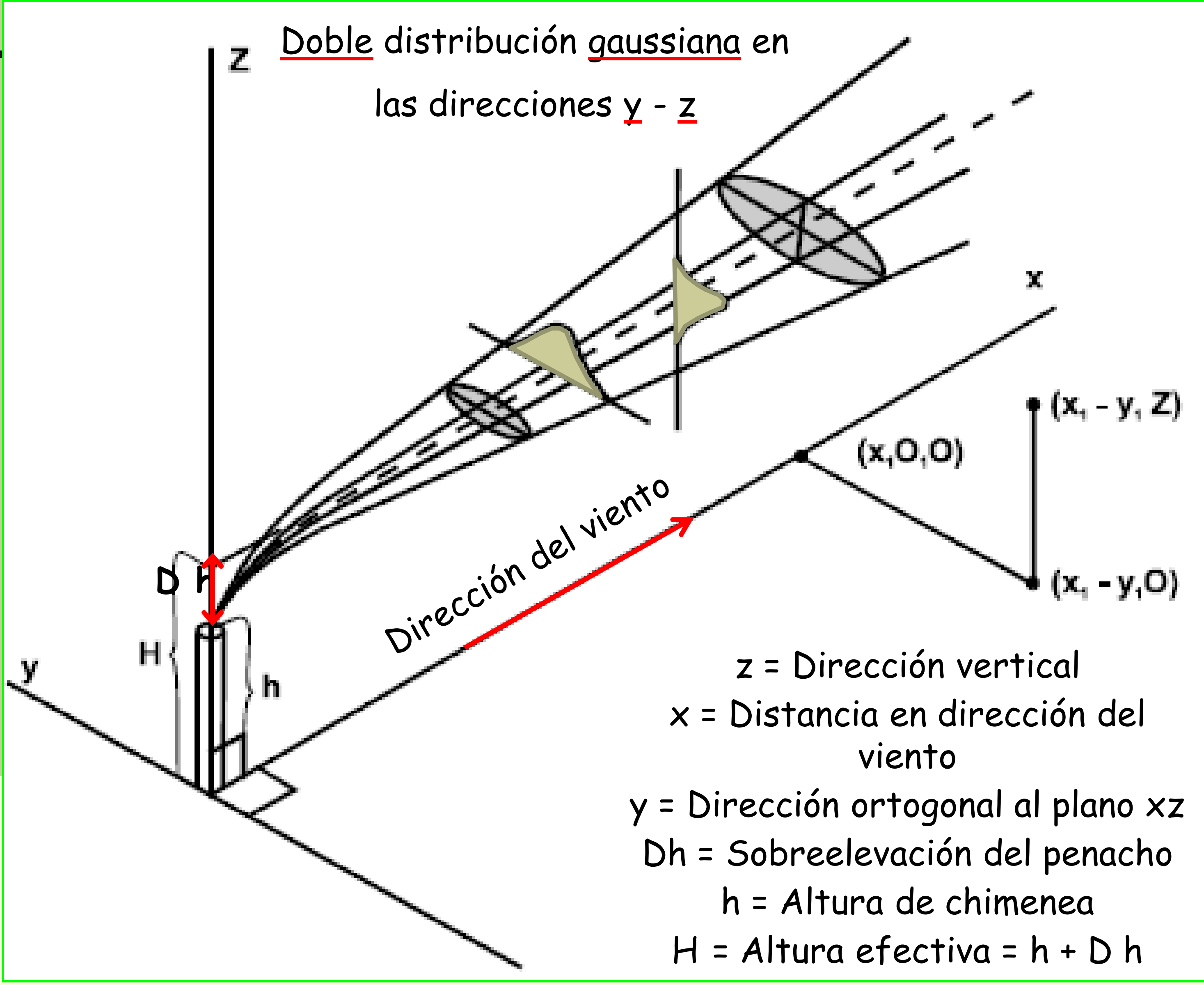
— σ es el parámetro de dispersión o desviación estándar

- ✓ Un modelo gaussiano parte de unas hipótesis y si las condiciones reales se alejan mucho de ellas, sus estimaciones se hacen poco precisas.
- ✓ Es útil para estimar la concentración de un contaminante para distancias ~ 20 km
- ✓ No sirve para problemas como la lluvia ácida, que implican cientos o miles de km
- ✓ El modelo se basa en la resolución de la ecuación de difusión atmosférica.
- ✓ Aunque el modelo gaussiano se aplica a una fuente puntual (chimenea), puede ser usado para considerar fuentes lineales (carreteras), o fuentes superficiales (que se modelan como un gran número de fuentes puntuales).



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

Representación esquemática de una pluma gaussiana (Fuente: Turner 1970)



z = Dirección vertical
x = Distancia en dirección del viento
y = Dirección ortogonal al plano xz
Dh = Sobreelevación del penacho
h = Altura de chimenea
H = Altura efectiva = h + D h

El coeficiente de dispersión se mide en metros e indica cuánto se ha dispersado la masa inicial cuando la pluma alcanzan una distancia dada desde la fuente de emisión

Altura efectiva o equivalente de la chimenea

- Aunque la pluma tiene su origen a una altura h (la de la chimenea), se eleva una altura adicional Dh, debido a la capacidad de flotación de los gases que salen a mayor temperatura que la de su entorno atmosférico y a la cantidad de movimiento cuando salen verticalmente de la chimenea con una velocidad $V_s \Rightarrow$ la pluma aparece como si se originara en una fuente puntual a una altura mayor, H, llamada altura efectiva o equivalente de la chimenea
- H = h + Dh
- El modelo se basa en la difusión de la masa del contaminante en las direcciones y, z cuando un elemento fluido es arrastrado por el viento en la dirección del eje x con una velocidad **u**

Hipótesis del modelo gaussiano

- ✓ Estado estacionario $\Rightarrow C \neq C(t)$ y u = cte (en el tiempo y en altura)
- ✓ La fuente tiene una emisión constante de un contaminante que es conservador (no se descompone, reacciona o sedimenta)
- ✓ El terreno es relativamente plano y no se producen efectos de absorción u otros

Fuente puntual sin reflexión en el suelo

- Concentración de contaminante en un punto de coordenadas (x, y, z) para la emisión de un foco de altura efectiva H (sin considerar reflexiones en el suelo):

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

Los coeficiente de dispersión, s_y y s_z,

s_y y s_z son los coeficientes de dispersión lateral y vertical $\Rightarrow$ forma de la distribución de concentraciones con la distancia lateral (y) y con la vertical (z)

Se miden en metros e indican cuánto se ha dispersado la masa inicial cuando el penacho alcanza una distancia dada desde la fuente de emisión

"sin reflexiones" $\Rightarrow$ extraordinariamente importante

La ecuación anterior nos da la concentración en la dirección del viento hasta llegar a un punto en la dirección x en que la concentración a nivel del suelo (z = 0) sea significativa ya que entonces tendrá lugar una apreciable reflexión del contaminante gaseoso al difundirse regresivamente a la atmósfera desde el nivel del suelo

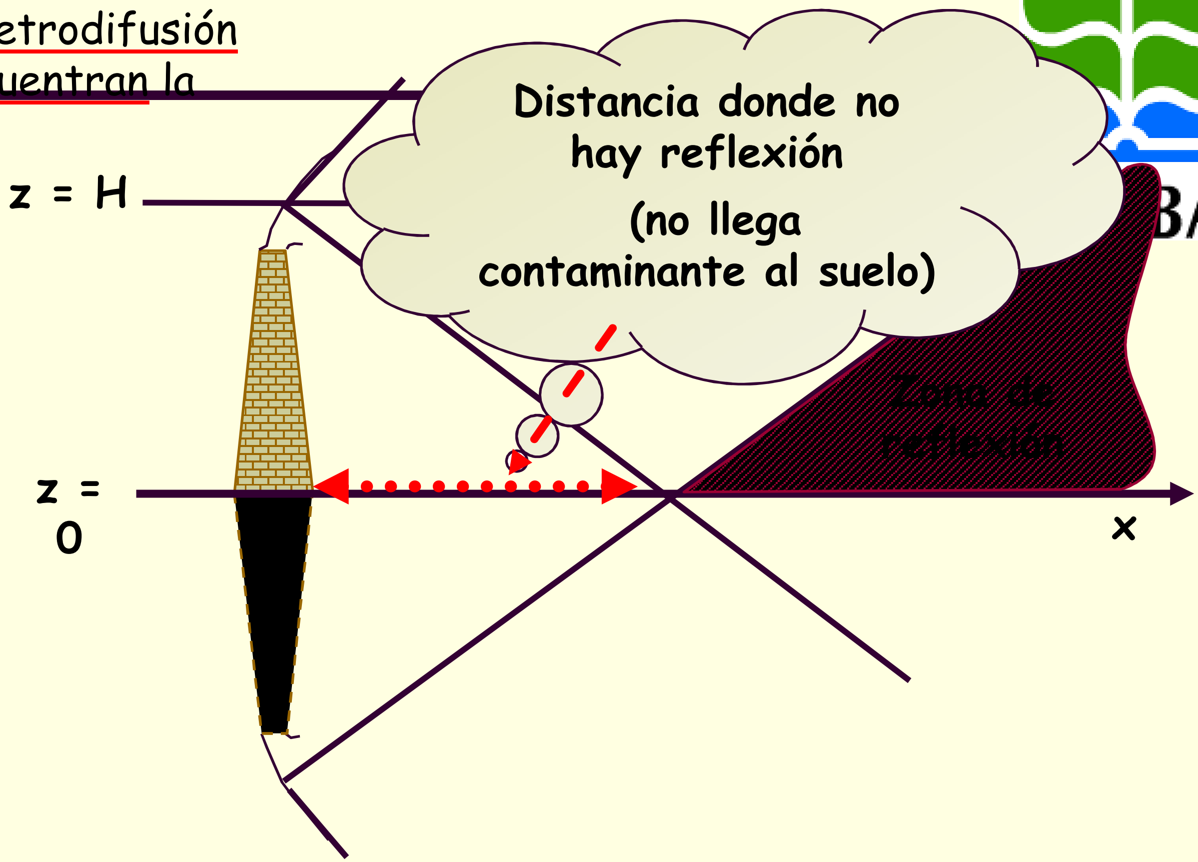
Estos coeficientes de dispersión, σ_y y σ_z, son funciones de la velocidad del viento, de la cubierta de nubes y del calentamiento de la superficie por el sol.

Para la distribución gausiana es necesario que el material en la pluma se mantenga. En otras palabras, se debe dejar que el borde de la pluma se refleje desde el suelo sin perder ninguna contaminación

- La reflexión es un fenómeno de retrodifusión de los contaminantes cuando encuentran la barrera del suelo

Se supone que el suelo no es un sumidero

es decir, que los contaminantes no se absorben por lo que se reflejan volviendo a la atmósfera



Fuente puntual con reflexión en el suelo

Considerar la reflexión en el suelo es equivalente a considerar dos fuentes de contaminación, una situada en $z = +H$ y otra situada en $z = -H$:

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

Las concentraciones a nivel del suelo ($z = 0$) son muy importantes (receptores):

$$C(x,y,0) = \frac{Q}{\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \exp\left(-\frac{H^2}{2\sigma_z^2}\right)$$

A nivel del suelo ($z = 0$), en la línea central ($y = 0$) los receptores reciben los máximos niveles de contaminación:

$$C(x,0,0) = \frac{Q}{\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{H^2}{2\sigma_z^2}\right)$$

- **No puedo insertar el símbolo griego sigma así que aquí uso S (por sigma minúscula)**
- s_y y s_z son función de la posición en la dirección del viento, x, y de la estabilidad atmosférica (requiere la caracterización del tipo de atmósfera en una de las categorías de Turner)
- Estudiar una fuente ⇒ elegir la clase de estabilidad atmosférica **típica** de la región que conduzca al peor episodio de contaminación posible
- A través de numerosas medidas experimentales en la atmósfera, se ha llegado a obtener la correlación de s_y y s_z con la distancia y el tipo de atmósfera
- Hay varios métodos para obtener los coeficientes de dispersión s_y y s_z: describiremos los métodos de **Pasquill** (gráfico y analítico) y el método de **Martin** (analítico) por ser ampliamente usados en la bibliografía del tema

Método Gráfico

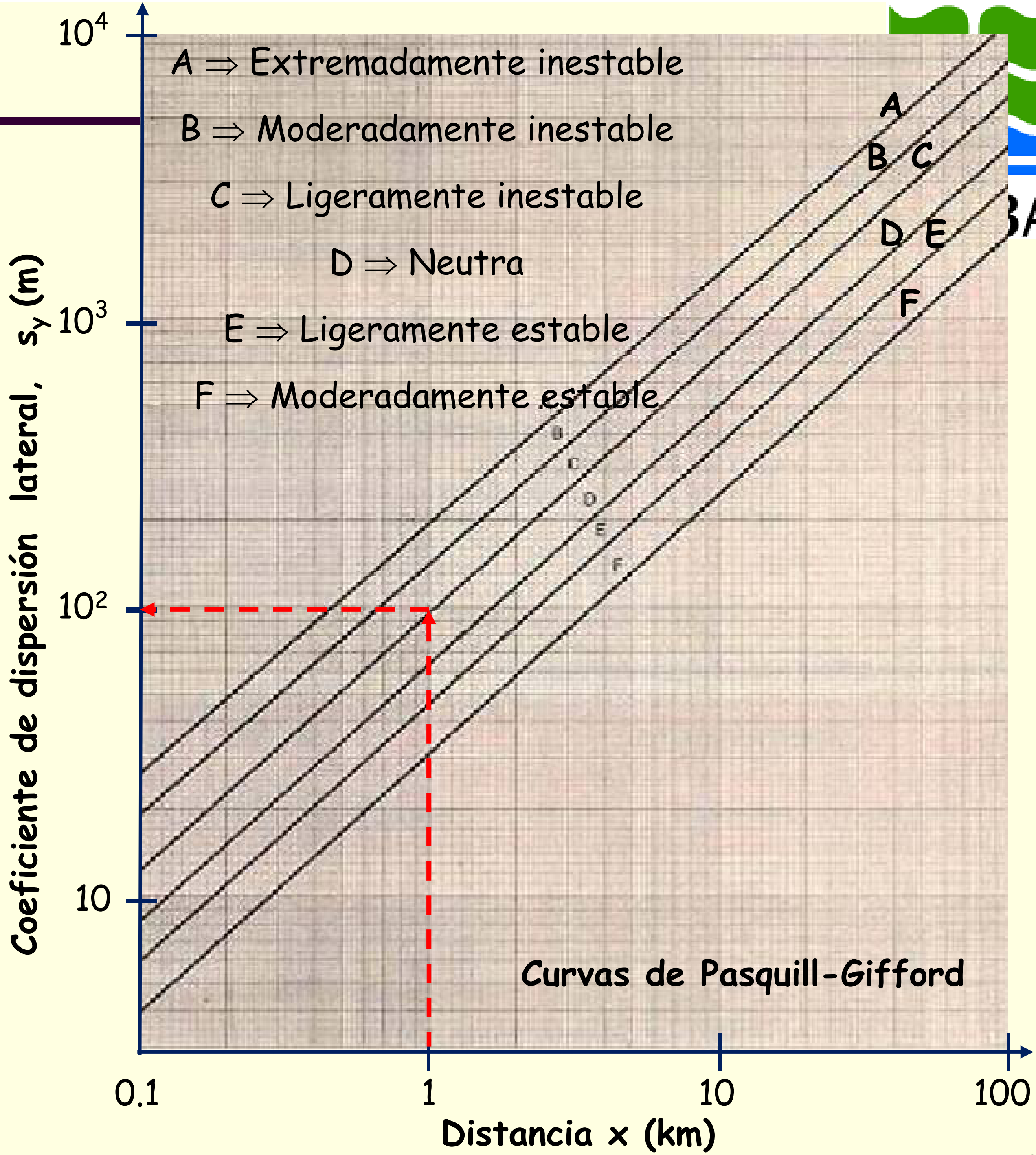
Las curvas de Pasquill-Gifford

Gráficas cuyo objetivo es la estimación de los valores de s_y y s_z

Los valores de s_z tienen mayor error que los de s_y sobre todo para distancias superiores a 1 km en la dirección del viento

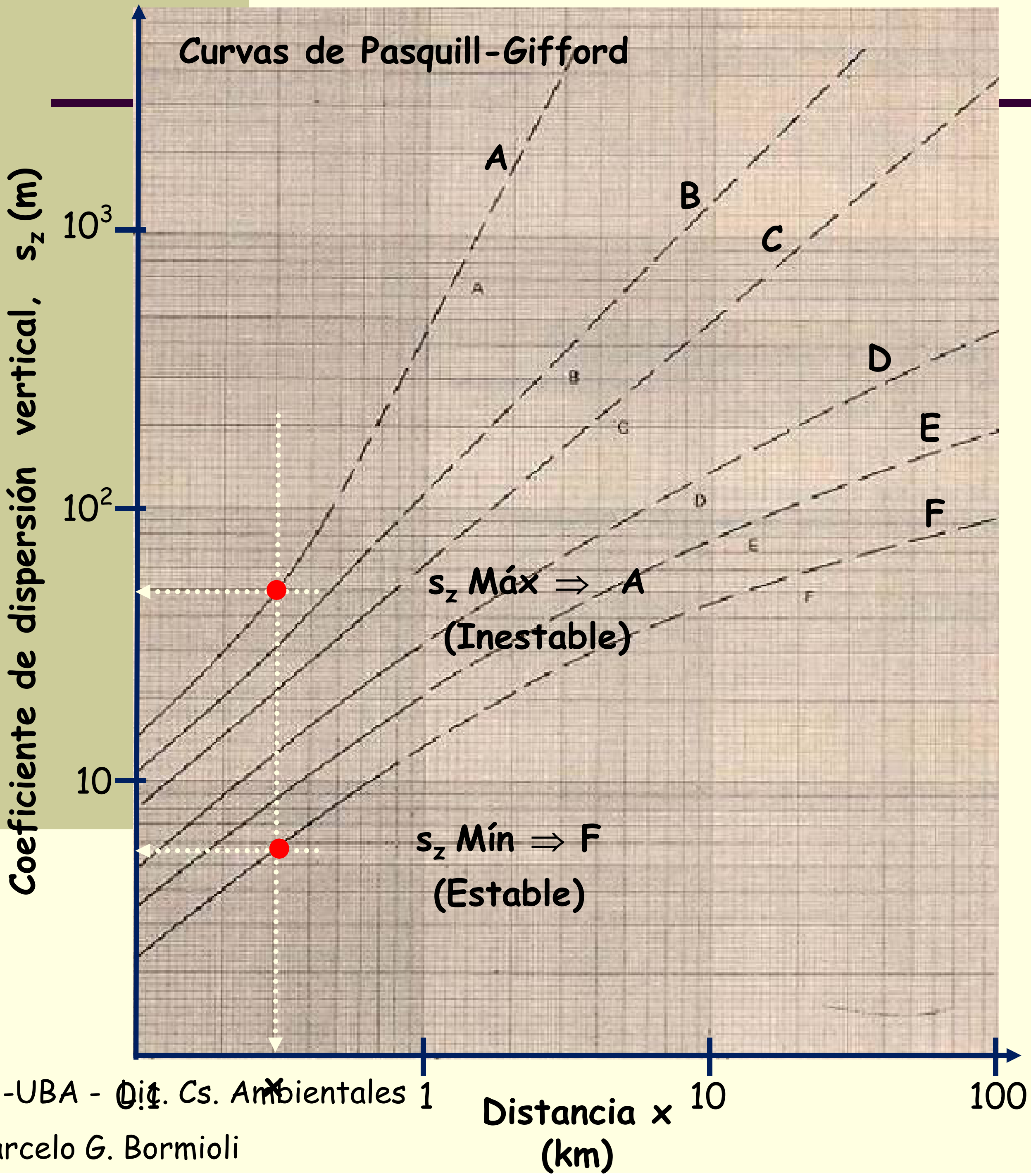
¡¡ Distancia x ⇒ km

s_y , s_z ⇒ m !!



Método Gráfico

Curvas de Pasquill - Gifford



Amplitud del penacho, s_z, para una distancia **x** dada:

s_z Máxima

⇓

inestabilidad atmosférica máxima (A)

s_z Mínima

⇓

atmósfera muy estable (F)

¡¡ Distancia x ⇒ km

s_y , s_z ⇒ **m** !!

Determinación de los coeficientes de difusión gaussiana: Métodos analíticos

- Debido a la dificultad de leer los valores de s_y y s_z en las gráficas se han obtenido los ajustes algebraicos de las mismas (los valores de **s** son promedios sobre un intervalo de 10 minutos)
- **Método de Pasquill**:
- Corrección de s_z por rugosidad del terreno
- Pasquill propuso las ecuaciones que se muestran a continuación y en las cuales aparece una dependencia de un coeficiente de rugosidad del terreno, z_0 ,para el cálculo de s_z
- La rugosidad tiene en cuenta el efecto sobre el coeficiente de dispersión vertical, s_z, de la vegetación exuberante, cultivos, edificios, etc., que cambian la forma vertical del penacho
  - El coeficiente de dispersión lateral, σ_y , **no** se ve afectado por la rugosidad del terreno
- Desviación típica transversal (s_y) y vertical (s_z) en metros, ajustadas para distancias a la fuente, x (m), entre 100 m y 10 km, siguen la ley potencial:
  - $s_y = a\ x^p$ $\qquad$ $s_z = b'\ x^m$ $\rightarrow$ x (metros) y s (metros)!!!
  - **a** y **p** son coeficientes tabulados que dependen solo de la clase de estabilidad
  - **b'** y **m** dependen de la clase de estabilidad y del coeficiente de rugosidad del terreno:
    - $b' = b'(z_0)$ y $m = m(z_0)$

Los valores de z_0 dependen del tipo de superficie y suelen tomarse los siguientes:

Tipo de superficie	Descripción	z_0 (m)
Terreno llano	Áreas abiertas con pocos árboles	0,03
Terreno agrícola	Aeropuertos, tierras arables, áreas abiertas con muchos árboles (se toma este valor por defecto cuando no hay información disponible)	0,10
Terreno cultivado	Invernaderos, áreas abiertas con vegetación densa, casas dispersas, etc.	0,30
Área residencial	Área con alta densidad de casas bajas, áreas arboladas, zonas industriales con obstáculos no demasiado grandes	1,00
Área urbana	Ciudades con edificios elevados, áreas industriales con obstáculos grandes	3,00

- Los coeficientes a, p, b' y m se dan en la tabla siguiente, en función de la rugosidad del terreno y del tipo de atmósfera y son ajustes de valores experimentales con validez estadística

	a	p	b'	m	b'	m	b'	m	b'	m	b'	m
A	0.527	0.865	0.193	0.932	0.28	0.90	0.383	0.873	0.550	0.842	0.760	0.814
B	0.371	0.866	0.160	0.891	0.23	0.85	0.317	0.822	0.455	0.792	0.631	0.763
C	0.209	0.897	0.155	0.830	0.22	0.80	0.308	0.771	0.441	0.740	0.612	0.712
D	0.128	0.905	0.139	0.791	0.20	0.76	0.276	0.732	0.395	0.701	0.548	0.673
E	0.098	0.902	0.104	0.761	0.15	0.73	0.207	0.702	0.296	0.671	0.411	0.643
F	0.065	0.902	0.083	0.701	0.12	0.67	0.164	0.642	0.236	0.611	0.327	0.583

Determinación de los coeficientes de difusión gaussiana: **Métodos analíticos**

Fórmulas de Martin

También se utilizan otras ecuaciones que no hacen corrección de rugosidad del terreno como la propuesta por D. O. Martin:

$s_y = a\,x^b$ $s_z = c\,x^d + f$ → x (kilometros) y s (metros)!!!

Las constantes a, c, d y f dependen de la categoría de estabilidad de Pasquill y b vale siempre 0.894

	x < 1 km				x >1 km		
	a	c	d	f	c	d	f
A	213	440.8	1.941	9.27	459.7	2.094	-9.6
B	156	106.6	1.149	3.3	108.2	1.098	2
C	104	61	0.911	0	61	0.911	0
D	68	33.2	0.725	-1.7	44.5	0.516	-13
E	50.5	22.8	0.678	-1.3	55.4	0.305	-34
F	34	14.35	0.740	-0.35	62.6	0.180	-48.6

Elevación del penacho

La elevación del penacho, Dh, se define como la diferencia entre la altura de la línea central final del penacho y la altura inicial de la fuente y es directamente proporcional al contenido calorífico y a la velocidad de salida del efluente e inversamente proporcional a la velocidad del viento

Existen varios métodos para determinar la elevación del penacho y una de las fórmulas más empleadas para el cálculo de esta elevación es la formula de Holland:

$$\Delta h = \frac{V_s\, d}{u}\left(n + \frac{k\, Q_h}{V_s\, d}\right) \quad \therefore \quad Q_h = Q\, c_p\left(T_s - T_a\right)$$

- Dh = Elevación del penacho por encima de la fuente emisora (m)
- V_s = Velocidad de salida del contaminante ($m\ s^{-1}$)
- d = Diámetro interior del conducto de emisión (m)
- u = Velocidad del viento ($m\ s^{-1}$)
- T_s, T_a = Temperaturas del contaminante y ambiente respectivamente (K)
- n = Constante adimensional = 1.5
- k = Constante = 0.0096 $m^2\ kJ^{-1}$
- Q_h = Tasa de emisión de calor de la chimenea ($kJ\ s^{-1}$)
- Q = Tasa de emisión de gas ($kg\ s^{-1}$)
- c_p = Calor específico del gas emitido ($kJ\ kg^{-1}\ K^{-1}$)

Los valores de Dh obtenidos con la fórmula de Holland deben corregirse multiplicando por un factor, establecido por Pasquill-Gifford-Turner y que es función de las condiciones meteorológicas

Categorías de estabilidad	Factor de corrección de Δh
A, B	1.15
C	1.10
D	1.00
E, F	0.85

También se utiliza la ecuación de Carson y Moses para el cálculo de esta elevación:

$$\Delta h = -0.029 \frac{V_s d}{u} + 2.62 \frac{\sqrt{Q_h}}{u}$$

Perfil de velocidades del viento

Si no se dispone del dato de la velocidad del viento a la altura efectiva de la chimenea, H, sino que solo se conoce la velocidad, u_{ref}, a una altura de referencia h_{ref} (las medidas estándar de velocidad de viento son a 2 y 10 m de altura), se utiliza la expresión de la variación del viento con la altura en la atmósfera

$$u = u_{ref}\left(\frac{H}{h_{ref}}\right)^{p}$$

Los valores del coeficiente p como función de la clase de estabilidad y el entorno en que se mueve el viento son los siguientes:

Categoría de Estabilidad	Exponente para Medio rural	Exponente para Medio Urbano
A, B	0.07	0.15
C	0.10	0.20
D	0.15	0.25
E	0.35	0.40
F	0.55	0.60

FIN Parte B

Gracias por la atención

Marcelo G. Bormioli
mbormio@fi.uba.ar