Práctica 1

Dispersión de contaminantes atmosféricos: Modelo gaussiano de la columna de humo.

1. Introducción

Un contaminante emitido a la atmósfera es transportado en la dirección del viento predominante y dispersado por movimientos de aire perpendiculares al viento así como por turbulencia. La predicción de la concentración de dicha sustancia en la zona que rodea al punto de emisión es un tema de gran interés en contaminación atmosférica. En esta práctica haremos uso de un modelo gaussiano de dispersión que permite calcular las concentraciones de un contaminante a nivel del suelo. El contaminante es emitido por una chimenea que se encuentra en un terreno llano. El modelo nos permite variar las condiciones meteorológicas (clase de estabilidad según las categorías definidas por Pasquill), la intensidad del viento y la temperatura. Para ello haremos uso del modelo gaussiano simplificado ISC3 (www.epa.gov).

2. Método: modelo gaussiano de dispersión.

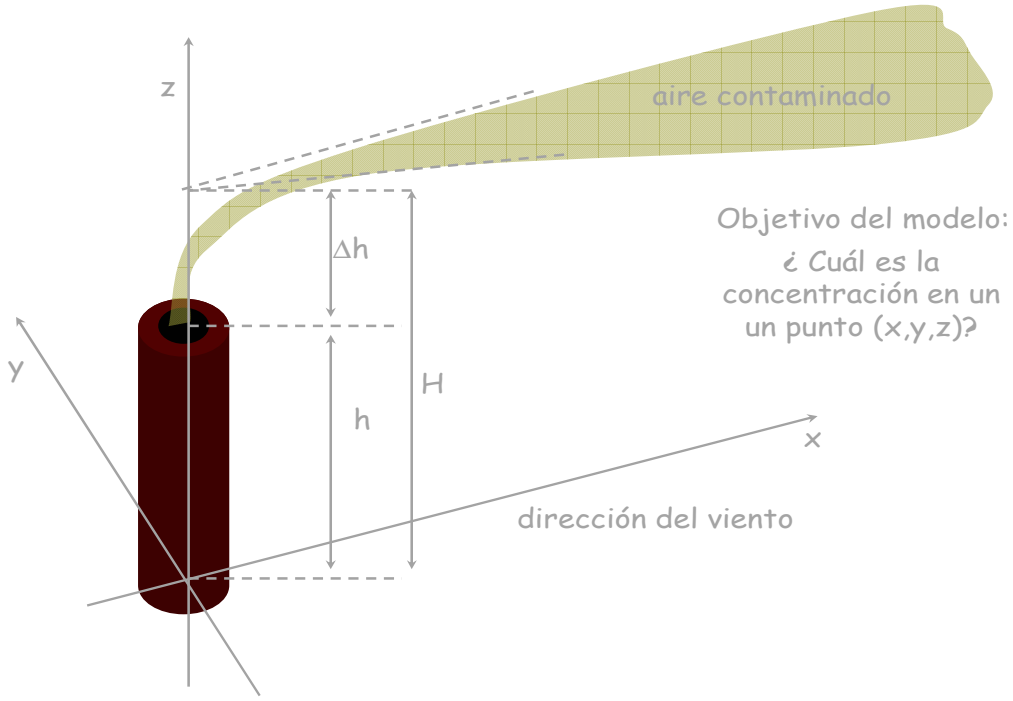
El modelo de la columna de humo gaussiana se basa en las siguientes hipótesis

1- La columna de humo emitida por la chimenea se eleva hasta cierta altura efectiva, H, que es la suma de la altura de la chimenea, h, más el ascenso, Δh, debido al momento inicial del humo así como a la diferencia de temperaturas entre el gas saliente y el aire que le rodea.
2- A partir de H_{ef} la columna de humo se mueve horizontalmente en la dirección del viento (dirección *x*) con velocidad *u* y se dispersa en las direcciones perpendiculares a éste, *y* y *z*. (*y* = horizontal, *z* = vertical). La dispersión en el plano *yz* se debe principalmente a la turbulencia atmosférica y puede calcularse como una distribución gaussiana

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

donde $C(x,y,z)$ es la concentración, Q es la cantidad de contaminante emitido por unidad de tiempo (g s^{-1}), u es la velocidad del viento y σ_y y σ_z son coeficientes de dispersión turbulenta que dependen de la clase de estabilidad y de la distancia al foco en la dirección

del viento, ***x***. En la ecuación anterior el suelo se trata como una superficie plana que no absorbe contaminante. El significado de las variables se muestra en el esquema siguiente:



Los coeficientes de dispersión vertical se calculan según fórmulas empíricas. Una de ellas son las dadas por Griffiths (ver diapositivas de teoría). Estas fórmulas suelen estar implementadas en los programas informáticos de modelos de dispersión que se utilizan habitualmente y son función de la clase de estabilidad atmosférica. Esta se representa por un código alfabético que va desde la A (más inestable) hasta la F (más estable). La clase de estabilidad atmosférica se puede deducir para cada condición meteorológica a partir de la siguiente tabla:

Tabla 1. Condiciones meteorológicas que definen las clases de estabilidad de Pasquill

U_{10} / m s^{-1}	Día, radiación solar			Noche	
	Fuerte	Moderada	Débil	Nubes > ½	Nubes < 3/8
< 2	A	A-B	B		
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	D	D	E
5-6	C		D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Para el cálculo del *ascenso vertical* de la columna de humo, Δh, se utilizan expresiones empíricas como la de Holland (ver diapositivas de teoría) o la de Briggs. En todas ellas el ascenso vertical depende de la diferencia de temperatura entre los gases de salida y la temperatura ambiente y la velocidad de salida de gases. Otros parámetros que también influyen en el ascenso vertical son el diámetro de la chimenea y la estabilidad atmosférica. Al igual que ocurre con los coeficientes de dispersión, las fórmulas para el cálculo de Δh ya suelen estar incluidas en los modelos informáticos al uso, lo cual no es excusa para ignorar como influyen cada uno de ellos en el ascenso de la columna de humo.

3. Descripción y uso del modelo gaussiano ISC3

El programa que se va a utilizar en esta práctica es una versión simplificada del modelo ISC3. Este es uno de los modelos más utilizados de la familia de modelos ISC (*Industrial Source Complex*) desarrollados por la EPA estadounidense (*Environmental Protection Agency*)[1]. Es este un modelo gaussiano clásico que aplica la ecuación (1) con correcciones asociadas a la altura de mezclado y la cinética de descomposición de los contaminantes.

El programa proporciona datos de concentración de contaminante *a ras de suelo* (z = 0) y en la dirección del viento (y = 0). Da por tanto el perfil de concentración a lo largo del eje en el que sopla el viento, el eje x.

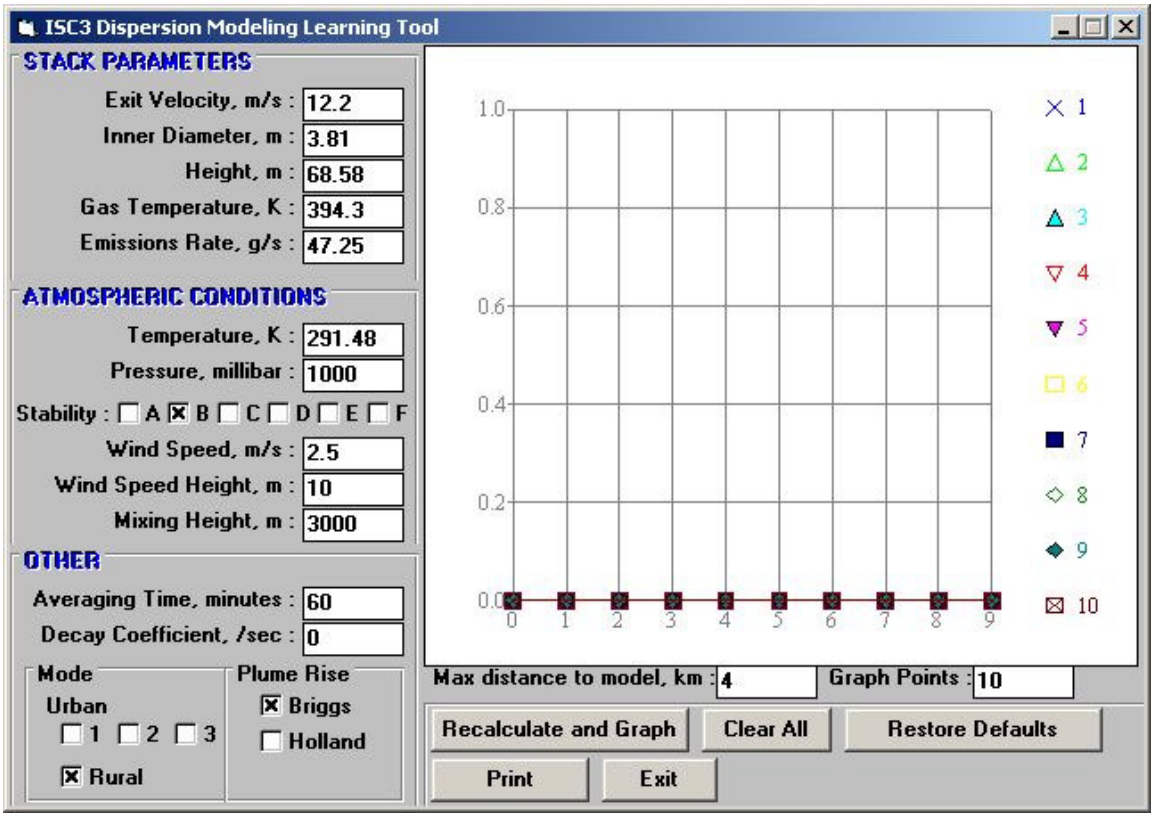
3.1 Datos de entrada y estructura general de la interfase gráfica del programa.

El programa lo puedes descargar de la página web de la asignatura y está contenido en un fichero comprimido ISCPC.zip. Una vez descargado este fichero en tu ordenador descomprímelo dentro de una carpeta creada al efecto: te aparecerán una serie de ficheros, entre los cuales se encuentra el fichero ejecutable ISCPC.EXE.

El programa se arranca ejecutando el fichero ISCPC.EXE. Este lanza la interfase gráfica, que aparece como ventana independiente y que presenta una estructura por bloques. A la izquierda aparecen los parámetros de entrada. Los resultados del cálculo aparecen en la parte derecha de la ventana.

La estructura de la interfase gráfica es la siguiente:

[1] Para más información, consulta la página web: http://www.epa.gov/scram001/dispersion_alt.htm#isc3



Los datos de entrada se dividen en tres grupos:

(1) parámetros de chimenea (*stack parameters*) : velocidad de salida de gases (m/s), diámetro interno de la chimenea (m), altura *física* de la chimenea (*h*, en metros), temperatura de salida de los gases (K) e índice de emisión (*Q*, en g/s).

(2) parámetros atmosféricos (*atmospheric conditions*): temperatura ambiente (K), presión (milibares), clase de estabilidad atmosférica, velocidad del viento (m/s), altura a la que se mide la velocidad del viento (m) y altura de mezclado (m).

(3) otros: tiempo de promediado (minutos) y constante de velocidad de descomposición del contaminante (s^{-1}). El programa también permite elegir entre dos fórmulas alternativas para el cálculo del ascenso vertical (Briggs o Holland) y el método de cálculo de los coeficientes de dispersión (1, 2 o 3 para suelo urbano o suelo rural).

Ten en cuenta que cuando se arranca el programa, este aparece con un conjunto de datos que aparecen "por defecto". A partir de ahí debes adaptar los datos al caso práctico que quieras estudiar. Si quieres recuperar los datos de entrada iniciales, pulsa el botón de *Restore Defaults*.

3.2 Ejecución del programa.

Una vez has seleccionado los datos de entrada del cálculo (de chimenea, atmosféricos y de cálculo), ejecuta el cálculo presionando el botón *Recalculate and Graph*. El perfil de concentración a lo largo del eje x aparece en la parte derecha de la interfase. Pulsando el botón derecho del ratón sobre la gráfica aparecen los datos y resultados del cálculo en forma numérica. Por ejemplo, para los datos que trae el programa por defecto te debería aparecer el siguiente "output":

```
ISCPC MODELING RUNS - Started 22/02/2008 18:30:50
_____________________________________________

Run 1
INPUT DATA:
STACK:
   Exit Velocity, m/s : 12.2
   Inner Diameter, m  : 3.81
   Height, m          : 68.58
   Temperature, K     : 394.3
   Emission rate, g/s : 47.25
ATMOSPHERIC CONDITIONS:
   Temperature, K     : 291.48
   Pressure, millibars: 1000.
   Stability          : B
   Wind Speed, m/s    : 2.5
   Wind speed height,m: 10.
   Mixing Height, m   : 3000.
OTHER:
   Averaging Time, min: 60.
   Decay Coeff., /s   : .
   Mode               : Rural
   Plume Rise Equation: Briggs
   Max. distance, km  : 4.
   Max. graph points  : 10

RESULTS:
========
Nomenclature:
          (x=distance from source, km)
          (conc=ground-level centerline concentration, ug/m3)
          (sigmay=dispersion coefficient in Y direction, dimensionless)
          (sigmaz=dispersion coefficient in Z direction, dimensionless)
          (xf=distance to final plume rise, km)
          (h=plume height, m)

x=.4,conc=.,sigmay=67.683,sigmaz=40.,xf=.789,h=299.534
x=.8,conc=1.062,sigmay=126.213,sigmaz=85.566,xf=.789,h=299.534
x=1.2,conc=17.519,sigmay=181.384,sigmaz=133.503,xf=.789,h=299.534
x=1.6,conc=32.118,sigmay=234.391,sigmaz=183.046,xf=.789,h=299.534
x=2.,conc=34.628,sigmay=285.798,sigmaz=233.819,xf=.789,h=299.534
x=2.4,conc=31.612,sigmay=335.935,sigmaz=285.595,xf=.789,h=299.534
x=2.8,conc=27.273,sigmay=385.02,sigmaz=338.218,xf=.789,h=299.534
x=3.2,conc=23.129,sigmay=433.206,sigmaz=391.58,xf=.789,h=299.534
x=3.6,conc=19.583,sigmay=480.607,sigmaz=445.594,xf=.789,h=299.534
x=4.,conc=16.659,sigmay=527.313,sigmaz=500.196,xf=.789,h=299.534
_____________________________________________
```

Puedes ahora modificar los datos de entrada y repetir el cálculo. Puedes seleccionar el número de puntos que deseas y la distancia hasta la cual fijas el cálculo. Los resultados se añaden a los que has obtenido anteriormente. Si quieres borrar todos los resultados anteriores presiona *Clear All.*

4. Objetivos y procedimiento.

La práctica se divide en dos partes principales: (1) análisis del efecto de una serie de parámetros en la dispersión de un contaminante y (2) aplicación a un caso práctico.

4.1 Análisis del efecto de una serie de parámetros en la dispersión de un contaminante.

4.1.1 Modificación de un sólo parámetro

En lo que sigue vas a mantener como caso de referencia el que viene por defecto al ejecutar el programa (o al presionar el botón *Restore Defaults*). El objetivo es ir variando uno (y sólo uno) de los parámetros de entrada del modelo con respecto al caso de referencia y observar el efecto sobre el perfil de concentraciones a lo largo del eje x. Salvo que se diga lo contrario, considera por un lado **la mitad** del valor de referencia y **el doble** del valor de referencia. Anota las conclusiones que obtengas en cada caso y la posición del máximo de concentración y su valor en $\mu g/m^3$ para cada uno de los valores estudiados (el de referencia, la mitad y el doble). Extiende la distancia a la chimenea más allá de 4 Km si es necesario.
En la interpretación de los resultados de este apartado, discutir si es posible cambiar únicamente un parámetro y en este caso qué es lo que se esta comparando (ejemplo: comparando altura de chimenea 68,58 m con una del doble de este valor corresponde a una fábrica en la que se baraja dos opciones de altura de chimenea. En principio, es posible variar este parámetro de forma independiente de los demás.)

Teniendo esto en cuenta analiza el efecto de los siguientes parámetros:

1. Velocidad de salida de gases.
2. Altura de chimenea
3. Temperatura de salida de gases: en este caso considera el caso de 10º por encima y por debajo del valor de referencia.
4. Índice de emisión
5. Temperatura ambiente: en este caso considera el caso de 10º por encima y por debajo del valor de referencia.
6. Clase de Estabilidad: en este caso, además del caso de referencia, considera las clases de estabilidad A y F.
7. Velocidad del viento.
8. Altura de mezclado.

9. Constante de velocidad de descomposición del contaminante: además del caso de referencia, considera que el contaminante reacciona con k = 1.0 s^{-1}

Tipo de suelo: compara suelo rural y suelo urbano (fórmula 1)

4.1.2 Modificación de más de un parámetro.

Cuando se quieren comparar dos casos que aparentemente varían solo en un parámetro, no resulta siempre posible modificar únicamente un parámetro. Salvo que se diga lo contrario, considerar por un lado **la mitad** del valor de referencia y **el doble** del valor de referencia para el primer parámetro mencionado. Discutir en este caso también qué es lo que se esta comparando.

Teniendo esto en cuenta analiza el efecto de los siguientes parámetros:

1. Diámetro interno de la chimenea, manteniendo constante el caudal de gases emitidos (N_2, CO_2, H_2O, O_2, y contaminantes). Nota: Esto afecta a la velocidad de salida de los gases.

2. Velocidad del viento un día de radiación solar fuerte. Aparte de la velocidad del viento, los parámetros deben ajustarse a la clase de estabilidad, que se obtiene según Pasquill (tabla 2).

4.2 Aplicación del modelo a un caso práctico.

Se trata de estudiar el efecto ocasionado en la calidad del aire en los alrededores de la localidad de Gerena de una planta hidrometalúrgica (mina de cobre). No se realiza ningún tipo de análisis basado en la climatología de la zona, tan sólo has de estimar qué concentración de contaminante es esperable que se obtenga a cierta distancia de la fuente de emisión y para cada una de las condiciones meteorológicas posibles.

Datos de la fuente de emisión:

Los cálculos se han realizado a partir de los datos máximos permitidos de emisión por la Autorización Ambiental Integrada (AAI) de la Conserjería de Medio Ambiente de la Junta de Andalucía[2]. Entre estos datos no se encuentran detalles importantes como son los siguientes:

1. Altura de emisión (altura de las chimeneas)
2. Velocidad de salida de gases
3. Temperatura de salida de gases
4. Diámetro de la chimenea.

Estos datos, que no aparecen definidos en la descripción de la instalación, son importantes porque tienen gran influencia en los niveles de inmisión medidos a ras del suelo de los diferentes contaminantes emitidos a la atmósfera. Por este motivo se realizará una estimación razonada de los valores tomados en este estudio, así como un análisis de la dependencia con los mismos, en especial en lo que se refiere a la altura y diámetro de las chimeneas.

Las emisiones atmosféricas más importantes de la instalación desde el punto de vista másico son las de óxidos de nitrógeno de la caldera, y los de compuestos sulfurados de la planta de electrodeposición. Los cálculos que aquí se presentan se centrarán en los óxidos de nitrógeno.

Objetivo: Teniendo en cuenta que la localidad de Gerena se encuentra a unos **3 km** del lugar en el que se planea instalar la planta, determina las concentraciones de los contaminantes mencionados a ras de suelo, en dicha posición cuando el viento sopla en la dirección del pueblo. Comenta y analiza los resultados.

CALDERA (caudal de 22000 Nm^3/hora).

[2] Autorización Ambiental Integrada (Cobre de las Cruces. S.A.), Conserjería de Medio Ambiente, Delegación Provincial de Sevilla, BOJA Nº111 del 9 de Junio de 2005

Los datos considerados son los siguientes:

- Emisión de óxidos de nitrógeno NO_x: 1.54 g/s (obtenidos a partir del caudal y la concentración máxima autorizada a la salida de la chimenea)
- Diámetro interno de la chimenea (en la coronación): 1 metro (estimado)
- Velocidad de salida de los gases: 2 m/s (estimado a partir del diámetro estimado y el caudal)
- Temperatura de salida de los gases: 130 ºC (estimado suponiendo combustión total)
- Altura de la chimenea: 10 y 50 metros (este dato es estimado dado que los planos presentados en la AAI muestran los edificios sin especificar chimeneas)

ELECTRODEPOSICIÓN (caudal de 165000 Nm^3/hora).

Los datos considerados son los siguientes:

- Emisión de dióxido de azufre SO_2 y de ácido sulfúrico (H_2SO_4): 1.4 g/s y 1.8 g/s respectivamente (obtenidos a partir del caudal y la concentración máxima autorizada a la salida de la chimenea)
- Diámetro interno de la chimenea (en la coronación): 2 metros (estimado)
- Velocidad de salida de los gases: 4 m/s (estimado a partir del diámetro estimado y el caudal)
- Temperatura de salida de los gases: 50 ºC (estimado)
- Altura de la chimenea: 10, 20 y 50 metros (los planos presentados en la AAI presentan una altura máxima de los edificios de 9 metros, sin especificar chimeneas. Es de presuponer que las chimeneas, cuando se diseñen, se eleven una cierta altura con respecto a los edificios)

Datos meteorológicos

Dado de que se no se dispone de un estudio riguroso de la meteorología de la zona realizar los cálculos para las siguientes condiciones meteorológicas:

Viento: 2m/s (viento suave) y 6m/s (viento fuerte).

Suponer una temperatura ambiente de 25ºC y 1000 milibares de presión. Considera altura de mezclado de 3000 metros, y dias de radiación solar fuerte, débil y noches sin nubes.

APENDICE

Fórmulas de Griffiths para los coeficientes de dispersión para suelos urbanos

Tabla 1. Fórmulas para los coeficientes de dispersión para suelos urbanos

Estabilidad	σ_y	σ_z
A-B	$0.32\ x\ (1 + 0.0004\ x)^{-1/2}$	$0.24\ x\ (1 + 0.0001\ x)^{-1/2}$
C	$0.22\ x\ (1 + 0.0004\ x)^{-1/2}$	$0.20\ x$
D	$0.16\ x\ (1 + 0.0004\ x)^{-1/2}$	$0.14\ x\ (1 + 0.0003\ x)^{-1/2}$
E-F	$0.11\ x\ (1 + 0.0004\ x)^{-1/2}$	$0.08\ x\ (1 + 0.0015\ x)^{-1/2}$

La ecuación de Briggs permite hallar el ascenso de la columna de humo, Δh, que introduce los efectos del momento, la sustentación y la estabilidad atmosférica.

$$\Delta h(m) = 114\ C\ F^{1/3} / u$$

Donde C es un parámetro que depende del gradiente de temperatura, u es la velocidad del viento a la altura geométrica de la chimenea, h, y F es el flujo de flotación que se obtiene a partir de:

$$F(m^4/s^3) = g\ v_s\ D_s^2\ (T_f - T_a) / (4\ T_a)$$

Donde g es la aceleración de la gravedad, v_s la velocidad del gas a la salida de la chimenea, D_s el diámetro interno de la chimenea y T_f y T_a las temperaturas de salida del gas y la ambiente en K, respectivamente.