

EVALUACIÓN DE IMPACTOS DE EMISIONES GASEOSAS DIFUSAS MEDIANTE MODELADO MATEMÁTICO

Pablo A. Tarela ¹ y Elizabeth A. Perone ²

¹ Departamento de Computación, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires
Paseo Colón 850 (C1063ACV) Buenos Aires, Argentina

e-mail: ptarela@fi.uba.ar

² Consultora Independiente

lizperone@hotmail.com

Palabras clave: Calidad de Aire, Modelos Gaussianos, Transporte de contaminantes.

Resumen. *En esta comunicación se presentan algunas líneas de desarrollo que se están llevando a cabo actualmente referentes a metodologías de modelado matemático para la evaluación del impacto sobre la calidad del aire producido por la emisión de gases contaminantes y vapores olorosos desde fuentes difusas. En general, las mismas consisten en la adaptación de modelos existentes para fuentes discretas, del tipo Gaussiano, mediante la correspondiente representación geométrica de las fuentes y la determinación de las respectivas tasas de emisión. Se ejemplifican las metodologías con algunos casos de estudio, mostrándose los procesos de calibración y validación, y el grado de semejanza obtenido entre las simulaciones numéricas y las mediciones de campo. Preliminarmente, se concluye que las representaciones numéricas obtenidas son aceptables y valiosas en el marco de las evaluaciones de impacto atmosférico, siendo que la caracterización de las fuentes difusas es el factor limitante de la cuantificación.*

1 INTRODUCCIÓN

El modelado matemático del impacto en la calidad de aire debido a las emisiones de fuentes discretas ha alcanzado un importante desarrollo. Existen diferentes aproximaciones para analizar el problema típico de las emisiones de gases contaminantes desde chimeneas y conductos de ventilación, y varias de ellas ya están disponibles en códigos comerciales. Incluso, por su grado de confiabilidad, ciertos modelos estandarizados están homologados por organismos oficiales de protección del medio ambiente en varios lugares del mundo, y se requiere de su uso a nivel regulatorio de las actividades industriales que generan efluentes gaseosos.

En cambio, la evaluación del impacto atmosférico debido a las emisiones de las fuentes difusas resulta más complejo y está menos desarrollado. Las emisiones fugitivas provenientes de las propias instalaciones industriales, la respiración de los tanques de almacenamiento de líquidos volátiles o la emisión de vapores olorosos desde piletas de tratamiento son algunos ejemplos comunes de las múltiples fuentes de emisiones gaseosas difusas existentes y que requieren el estudio de su influencia en la calidad del aire.

A continuación se presentan un par de ejemplos para casos tipo de estudio, en los que se ha aplicado el modelado numérico para cuantificar la influencia de las emisiones provenientes de fuentes difusas en la concentración de contaminantes atmosféricos en las respectivas zonas de influencia. Se detallan las metodologías utilizadas para determinar las tasas de emisión, así como el grado de discretización requerido para representar la geometría de fuentes irregulares, mediante la aplicación de modelos del tipo Gaussianos. Para algunos casos de estudio, se muestran los procesos de calibración y validación, y el grado de semejanza obtenido entre las simulaciones numéricas y las mediciones de campo. Se muestra que la caracterización de las fuentes difusas es el principal escollo en este tipo de evaluación, el cual está por sobre el grado de simplificación de los modelos matemáticos aplicados.

2 MODELO COMPUTACIONAL

2.1 Modelo matemático de base

El modelo matemático de base es del tipo Gaussiano, y fue presentado anteriormente en sus detalles de concepción e implementación^{1,2,3}. Para una revisión acerca de este tipo de modelos se puede recurrir a las referencias⁴. Aquí solamente se refrescan los principales detalles.

El modelo nace de proponer una solución analítica para una versión simplificada de la ecuación de advección-difusión-reacción:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (\mathbf{n} + \mathbf{n}_r) \nabla c + R + S \quad (1)$$

c : concentración
 t : tiempo
 \mathbf{u} : campo de velocidad atmosférica
 \mathbf{n} : viscosidad molecular del aire
 \mathbf{n}_t : viscosidad de torbellino
 R : tasa de reacción
 S : fuente/sumidero de contaminante

La ecuación (1) fue obtenida considerando condiciones de incompresibilidad y realizando un promedio de Reynolds sobre las ecuaciones de Navier-Stokes. También, se consideró que el contaminante es pasivamente transportado en la atmósfera.

Además, se consideran las siguientes simplificaciones:

- El flujo es estacionario y está caracterizado por una dirección principal de movimiento (dirección del viento)
- La viscosidad efectiva (suma de las viscosidades definidas en la ec. (1)) tiene componentes nulas solamente sobre el plano que es perpendicular a la dirección del viento.

Considerando el caso de una fuente puntual la ec. (1) se reduce a:

$$u \frac{\partial c}{\partial x} = \mathbf{n}_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \mathbf{n}_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + R + Qd(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (2)$$

u : velocidad del viento
 x, y, z : coordenadas cartesianas, asumiendo que x está en la dirección del viento y z está en la dirección vertical
 $\mathbf{n}_y, \mathbf{n}_z$: viscosidades efectivas en las direcciones y, z
 Q : tasa de emisión de contaminante
 \mathbf{r} : vector posición
 \mathbf{r}_0 : ubicación de la fuente

La ecuación (2) permite obtener la solución clásica para el campo tridimensional viento abajo del punto fuente:

$$c(\mathbf{r}) = \frac{Q}{\rho u \mathbf{s}_y \mathbf{s}_z} \exp\left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\mathbf{s}_y^2}\right] \exp\left[-\frac{(z - h_e)^2}{2\mathbf{s}_z^2} - \frac{(z + h_e)^2}{2\mathbf{s}_z^2}\right] \quad (3)$$

donde la tasa de reacción se asume que representa una reacción de primer orden, y el terreno se

considera plano y reflejante, siendo:

x_0, y_0 : posición de la fuente en el plano $x-y$

h_e : altura efectiva de la pluma

s_y, s_z : funciones de dispersión (desviaciones estándar de la pluma Gaussiana en direcciones y, z)

Los detalles que permiten aplicar la solución (3) a casos prácticos se presentan las referencias^{2,3,4}. En particular, las funciones de dispersión se calculan utilizando la metodología de Hanna et al.⁵.

La expresión (3), debido a su carácter lineal, permite simular fuentes puntuales múltiples apelando al principio de superposición. Su implementación computacional resulta directa, y su costo en tiempo de CPU es bajo para este tipo de aplicaciones. No obstante, requiere del uso previo de un modelo meteorológico para determinar las condiciones de turbulencia atmosférica, y submodelos para el cálculo de los efectos de campo cercano (dominado por el momentum inicial del flujo de gases de la chimenea), flotación térmica de las plumas debido a la temperatura de los gases de combustión, la formación de capas de inversión atmosférica, capas límites térmicas internas en las costas, remoción por estructuras edilicias, etc. En este caso se utilizó el sistema computacional SofIA^{1,2} (Software de Impacto Atmosférico).

2.2 Generalización para fuentes de área

Gran parte de las fuentes difusas que se desean estudiar en los casos prácticos se extienden sobre la superficie del terreno, con dimensiones horizontales que superan en magnitud a la dimensión vertical. Incluso, estas fuentes suelen emitir gases contaminantes o vapores olorosos a través de una superficie líquida horizontal, en ciertos casos en contacto directo con la atmósfera.

Desde el punto de vista de su simulación, se plantea la generalización del modelo descrito en la sección anterior al caso de una fuente distribuida sobre el área Ω :

$$c(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} \mathbf{r}(r') \mathbf{f}(r - r') d\Omega \quad (4)$$

con \mathbf{r} la densidad superficial de emisión y \mathbf{f} la función de distribución bigaussiana asociada a la expresión (3).

La forma propuesta en este trabajo para resolver la integral (4) está ligada a la ventaja del modelo de poder aplicar el principio de superposición. Entonces, se discretiza el área Ω en subdominios computacionales $d\Omega$, y sobre cada uno de ellos se aplica convenientemente la solución (3). El requerimiento implícito en el procedimiento mencionado es que los subdominios computacionales sean suficientemente pequeños, de forma tal que la hipótesis de fuente puntual se sostenga. Esto, en términos prácticos, es totalmente factible.

Una alternativa posible para la resolución de la integral (4) es el uso de alguna técnica de

integración numérica. Por ejemplo, el modelo regulatorio ISC3⁶ de la US EPA opera de esta forma. Por cuestiones de simplicidad de implementación, en esta primera versión del modelo de emisiones difusas se ha optado por el uso del principio de superposición, quedando a futuro la posibilidad de aplicar técnicas de cuadratura y comparar el rendimiento computacional entre ambas.

2.3 Tasas de emisión

Para la situación de fuentes puntuales, existen técnicas estandarizadas para determinar las tasas de emisión de gases contaminantes, uno de los datos de entrada del modelo de base. Pero en el caso de liberaciones evaporativas difusas, su cuantificación es muy difícil, y la medición directa no está protocolizada.

En este trabajo se ha optado por utilizar una metodología propia, basada en la combinación de mediciones de campo de calidad de aire y la aplicación del modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos SofIA.

La técnica consiste en registrar concentraciones del contaminante de interés mediante un método experimental adecuado, bajo condiciones que minimicen el impacto de fuentes cercanas sobre tal medición. El valor obtenido se asocia a las emisiones de la fuente relevada. Luego, se simula la fuente en consideración mediante el modelo SofIA, considerándose que la densidad superficial de emisión es constante sobre todo el área (lo cual es una buena hipótesis en general), y se calibra la tasa de emisión de modo de obtener como respuesta la concentración ambiental medida.

Una alternativa al procedimiento de monitoreo anterior es caracterizar las tasas de emisión mediante evaluaciones teóricas^{7,8}.

A continuación se presentan un par de ejemplos para mostrar ambas situaciones mencionadas.

3 EMISIONES DIFUSAS DE VAPORES OLOROSOS

3.1 Problema y objetivo

Muchas plantas industriales disponen de piletas de tratamiento de líquidos residuales, que pueden evaporar gases contaminantes. Un caso particular son aquellas piletas que emiten vapores olorosos, que si bien pueden no ser perjudiciales para la salud en las concentraciones ambientales producidas, resultan en molestias a la población por los malos olores ocasionados.

Para estos casos, el objetivo de los estudios ambientales es determinar con mayor precisión y generalidad que las campañas de monitoreo esporádicas, la influencia de las piletas de tratamiento sobre la población circundante, y el eventual beneficio de la aplicación de medidas de mitigación.

3.2 Calibración del modelo y aspectos numéricos

La figura 1 presenta el caso de la calibración resultante sobre una pileta irregular de tratamiento de líquidos cloacales. Por la falta de acceso se utilizó un único punto de medición en el borde viento

abajo de la pileta, en el cual se registró la concentración de sulfuro de hidrógeno. Tratándose de un único punto no aparecen inconvenientes para hacer coincidir exactamente la salida del modelo con el valor medido, en el punto espacial correspondiente.

En cambio, en la figura 2 se presenta el ejemplo de una pileta de aireación, con una pasarela central que permitió la instalación de dos puntos de monitoreo: en este caso se ajustó la salida del modelo para coincidir con el punto viento abajo, pero el otro valor medido se corresponde muy bien con la misma salida calibrada. Es decir, la representación de la emisión de área aparece como satisfactoria.

En ambos casos, se requirió el monitoreo en el lugar de las condiciones meteorológicas correspondientes, a partir de las cuales se determinaron las propiedades de mezcla turbulenta.

Nótese que el método presupone la validez de la respuesta del modelo frente a las emisiones de las fuentes en consideración, en lo referido a la forma funcional de la distribución de contaminantes. Luego, el sentido de las mediciones es en primer lugar ajustar por un factor de escala, y en segundo validar preliminarmente la validez de la distribución mencionada.

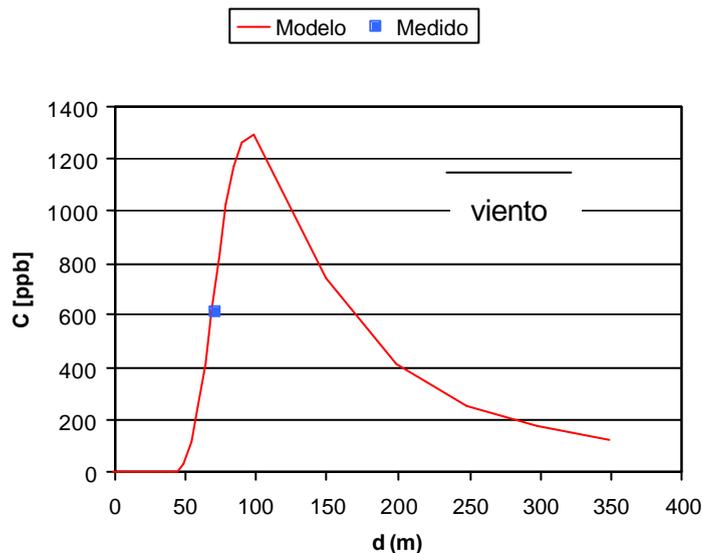


Figura 1 – Calibración del modelo con 1 punto, con pileta de geometría irregular.

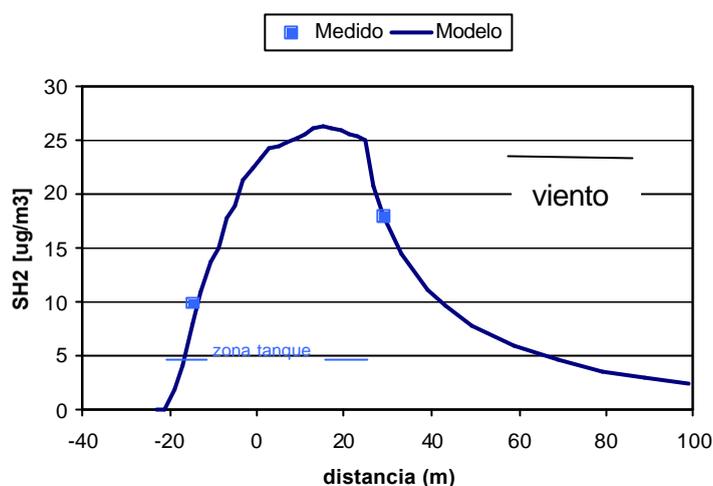


Figura 2 – Calibración del modelo con 2 puntos, con pileta de geometría regular.

3.3 Validación y aplicaciones

No obstante lo mencionado recién, se requiere de la validación del modelo generalizado. La tabla que sigue muestra una comparación de resultados medidos en campo, fuera de la zona de fuentes, para concentración de sulfuro de hidrógeno y las concentraciones obtenidas con el modelo previamente calibrado.

Tabla 1 - Comparación entre datos medidos y resultados del modelo.

Punto #	SH ₂ (ppb)	
	Medido	Modelo
1	2.2	2.1
2	< 1.4	0.3
3	< 1.4	0.02
4	1.4	1.5
5	< 1.4	0.9

La correspondencia es aceptable. En los dos puntos donde se supera el nivel de detección analítico (1.4 ppb) las diferencias entre lo medido y lo simulado son inferiores al 10%. En los tres puntos restantes las determinaciones de campo indican concentraciones por debajo del umbral de detección, cuando el modelo también arroja concentraciones por debajo de ese valor. En este caso no se puede establecer un margen de error directo, pero sí una cota superior, ya que se deduce que las diferencias son a lo sumo de 1.4 ppb. Esta diferencia resulta admisible desde el punto de vista ambiental, puesto que el umbral de olor es de 5 ppb.

Los ensayos numéricos realizados determinaron como regla general que los subdominios

numéricos necesarios para una correcta representación del fenómeno de transporte de gases contaminantes deben ser de entre 0.25 y 1.5 m² para las piletas de tratamiento mencionadas. En términos de cantidad de subdominios, se puede recomendar una cantidad del orden de 1000 por fuente, con una distribución uniforme de fuentes puntuales. Esto asegura convergencia en la pluma desarrollada viento abajo de la fuente.

Como ejemplificación de la aplicación del modelo generalizado, las figuras 3 a 5 presentan los campos de concentración de sulfuro de hidrógeno para una planta de tratamiento de líquidos cloacales, bajo tres hipotéticas situaciones atmosféricas. Se trata de la superposición de múltiples fuentes, la mayoría de ellas difusas y del tipo pileta de tratamiento, como las mencionadas en la etapa de calibración. El número de subdominios en esta simulación asciende a 15,000, una cantidad manejable desde el punto de vista de costo computacional si los estados evaluados son de corto plazo.

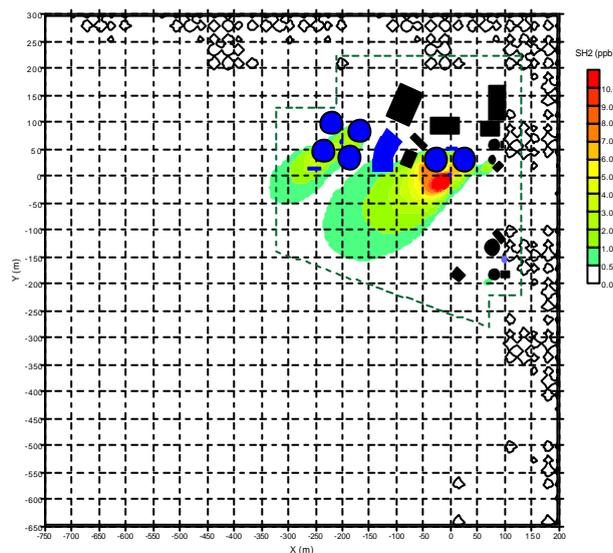


Figura 3 – Campo de concentración de sulfuro de hidrógeno para escenario de atmósfera inestable.

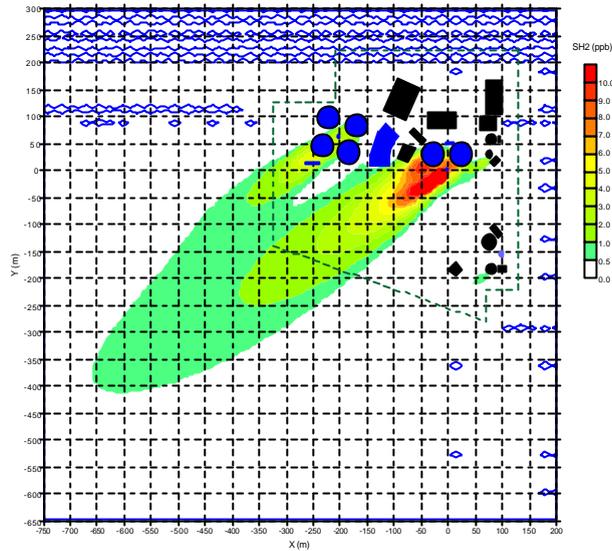


Figura 4 – Campo de concentración de sulfuro de hidrógeno para escenario de atmósfera neutra.

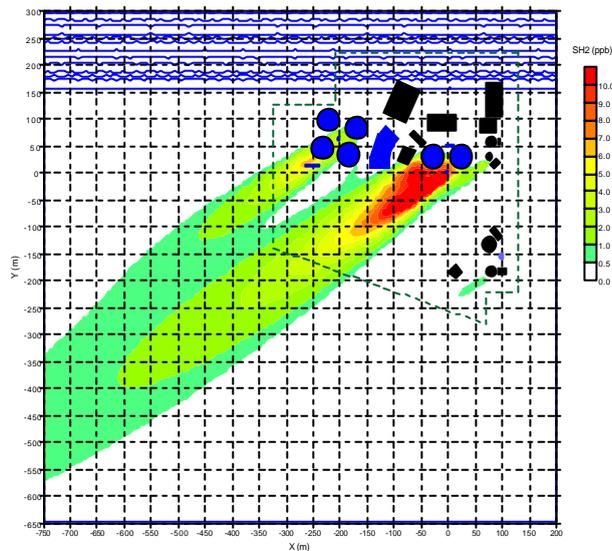


Figura 5 – Campo de concentración de sulfuro de hidrógeno para escenario de atmósfera estable.

4 EMISIONES DIFUSAS DE VAPORES ORGÁNICOS VOLÁTILES

4.1 Problema y objetivo

Otro problema de particular interés actual es la emisión de compuestos orgánicos volátiles (VOCs) desde tanques de almacenamiento. Dependiendo del tipo de tanque, la emisión de vapores

orgánicos puede ser muy importante y, en algunos casos, se ha detectado que este problema es el principal factor de contaminación con VOCs en las zonas aledañas.

Existen diversas tecnologías de tanques de almacenamiento de líquidos, todas ellas presentes en nuestro país:

- Tanque vertical de techo fijo
- Tanque horizontal de techo fijo
- Tanque de techo externo flotante
- Tanque de techo interno flotante y externo fijo plano
- Tanque de techo interno flotante y externo fijo tipo domo

En general, los tanques de techo fijo que trabajan a presión atmosférica son susceptibles de emitir grandes masas de VOCs por acción conjunta del proceso de respiración y la generación de vapores durante el llenado/vaciado.

Por su parte, los tanques con membranas flotantes están diseñados para minimizar los fenómenos evaporativos y, consecuentemente, suelen presentar tasas de emisión inferiores a las anteriores.

4.2 Tasas de emisión y métodos de simulación

La determinación de las tasas de emisión difusa para tanques es complicada. Para tanques de techo fijo, requiere el monitoreo en cada uno de las respiraciones, con control de caudal de aire erogado. En el caso de tanques con techo flotante, implica por ejemplo el aislamiento del recipiente y monitorear su atmósfera interna en forma controlada, procedimiento costoso y poco práctico.

Se presenta la alternativa de estimar en forma teórica las emisiones. Para ello se propone utilizar la metodología del American Petroleum Institute (API), o su versión computacional, el soft TANKS de la United States Environmental Protection Agency ⁸.

Si bien estas metodologías apuntan a estimar las emisiones evaporativas en términos medios anuales, debido a los procesos intrínsecos de generación, se pueden realizar extrapolaciones para determinar las emisiones puntuales. Por ejemplo, para el caso de tanques de techo fijo, se puede determinar la emisión difusa debida al llenado parcial del tanque, provistos el contenido del mismo, el volumen inicial, la tasa de carga y las condiciones del tanque y atmosféricas.

Cada tipo de tanque mencionado en la sección anterior tiene asociada una técnica de simulación apropiada, en cuanto a dispersión de vapores orgánicos se refiere. Por ejemplo, para simular un tanque de techo fijo cada ventilación sobre el techo se representa como una fuente puntual, y el tanque en sí mismo es tenido en cuenta como un obstáculo de envergadura que produce recirculación y formación de estela viento abajo, con consecuente remoción de contaminantes.

En cambio, para el caso de tanques de techo flotante, las emisiones evaporativas se producen en forma aproximadamente uniforme sobre la superficie de la membrana, de modo que el tanque se simula como una fuente difusa. En este trabajo se ha optado por simular esta fuente de área (circular) mediante la superposición de N fuentes puntuales distribuidas uniformemente sobre tal

superficie, y siendo todas de la misma magnitud en cuanto a emisión neta. Nuevamente, el tanque es tenido en cuenta para el efecto de remoción.

En cualquier caso, virtualmente no hay elevación de plumas por efectos de campo cercano en el caso de emisiones evaporativas desde tanques. Por lo cual esto debe tenerse en cuenta en el submodelo de campo cercano, de modo de fijar en cero la flotación térmica (considerando que el gas de salida está a temperatura ambiente) y el empuje inicial (considerando nula la velocidad de salida de gases).

Adicionalmente, se debe controlar el diámetro aparente de cada fuente, de modo de no generar efectos virtuales de remoción de punta de chimenea, y evitar una caída inicial ficticia de la pluma simulada.

En cuanto a la discretización, se siguen los mismos lineamientos mencionados en la sección 3.3.

4.3 Aplicaciones

Una aplicación interesante de esta metodología fue la realizada en el Polo Petroquímico de Dock Sud ⁹, ubicado al sur de la ciudad de Buenos Aires, junto al Río de la Plata. Se trata de un importante centro industrial-portuario, caracterizado por la presencia de compañías químicas y refinerías. Durante el estudio, se monitoreó la presencia de VOCs con técnicas para corto (muestras instantáneas y hasta de 1 hora) y mediano plazo (8 a 24 horas), hallándose presencia casi permanente de estos compuestos.

La modelación de emisiones desde el conjunto de fuentes puntuales del Polo Petroquímico indicó que estas fuentes contribuían escasamente a los niveles de VOCs detectados. Lo propio ocurrió al realizar la simulación numérica del impacto de las emisiones vehiculares en la calidad del aire de la zona.

Se optó entonces por construir un inventario de emisiones difusas, provenientes de los tanques de almacenamiento distribuidos en la zona (más de 1,000). La figura 6 muestra la simulación de la pluma de hidrocarburos aromáticos emitida por uno de esos tanques, bajo una cierta condición de viento y atmósfera inestable.

Los niveles simulados de VOCs en calidad de aire se correspondieron con los monitoreos realizados en el lugar. Debido a que no se tuvo acceso a las fuentes, esta forma indirecta de correlacionar resultados de monitoreo y modelado matemático hizo las veces de proceso de “validación” de la metodología aplicada.

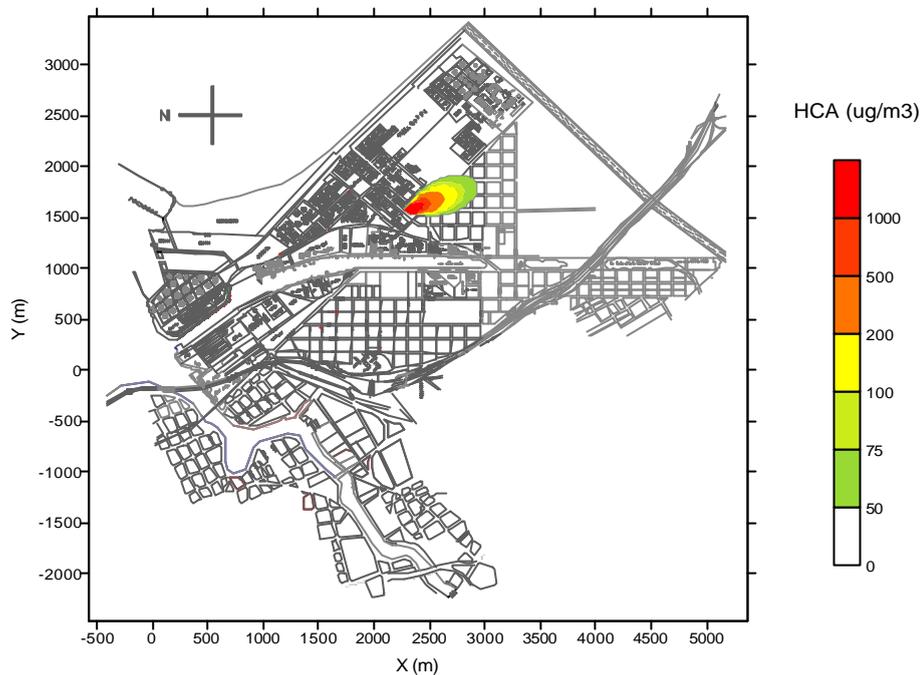


Figura 6 – Simulación del impacto de un tanque de techo fijo durante un evento de carga de combustible, en situación de atmósfera inestable.

5 CONCLUSIONES

La comunicación pone de manifiesto la versatilidad de los modelos de transporte de contaminantes atmosféricos del tipo Gasussiano, en cuanto a sus posibilidades de adaptación para la simulación de una gran diversidad de fuentes.

Para el caso particular del modelo SofIA, se ha optado por aplicar el principio de superposición y representar las fuentes difusas mediante una discretización conveniente de la fuente, y la simulación de cada subdominio como una fuente puntual. Se encontró que para problemas de evaluación de impacto atmosférico, se obtiene la convergencia a la mejor solución empleando subdominios de a lo sumo 1.5 m² de área.

El esfuerzo computacional sólo es grande en simulaciones con varias fuentes operando simultáneamente y representaciones de largo plazo (1 año), donde la cantidad de subfuentes y el número de estados estacionarios individuales resulta muy elevado.

Preliminarmente, se concluye que las representaciones numéricas obtenidas son aceptables y valiosas en el marco de las evaluaciones de impacto atmosférico, siendo que la caracterización de las fuentes difusas es el factor limitante de la cuantificación.

6 RECONOCIMIENTOS

Los autores desean agradecer a Japan International Cooperation Agency (JICA) por la posibilidad de utilizar los resultados de mediciones y modelación del estudio del polo petroquímico de Dock Sud.

Otros casos de estudio presentados en este trabajo fueron realizados por los autores para JMB Ingeniería Ambiental, siendo que los detalles y conclusiones de esos estudios son mantenidos en reserva y no están incluidos en esta comunicación, por cuestiones de confidencialidad.

7 REFERENCIAS

- [1] Tarela, P.A. and Perone, E.A., *Sofia: an Integrated Computational Model for Air Quality*, First South-American Congress on Computational Mechanics, Paraná (2002).
- [2] Tarela, P. A. and Perone, E. A., *A Cost-Effective Computational System for Linking Air Pollutant Emissions and Population Exposure in a Megacity: SOFIA Model*, Journal of Computational Methods in Science and Engineering (accepted for publication, 2004).
- [3] Tarela, P. A. and Perone, E. A., *Air Quality Modeling of the Buenos Aires Metropolitan Area*, Report prepared to Integrated Environmental Strategies Project, U.S. Environmental Protection Agency (EPA) and National Renewable Energy Lab. (NREL), USA (2002).
- [4] A.C. Stern (ed.), *Air Pollution*, volume I, Academic Press, New York (1976).
- [5] S.R. Hanna, G.A. Briggs and R.P. Hosker, *Handbook of Atmospheric Diffusion*, DOE/TIC-11223, Dept. of Energy, 102 pp. (1982).
- [6] *ISC3 (Industrial Source Complex) Model*, United States Environmental Protection Agency, www.epa.gov
- [7] United States Environmental Protection Agency, *AP-42 Compilation of Air Pollutant Emissions Factors, Ch. 4 Evaporation Loss Sources, Section 3 Waste Water Collection, Treatment and Storage* (2000).
- [8] United States Environmental Protection Agency, *AP-42 Compilation of Air Pollutant Emission Factors, Volume I: Stationary Point and Area Sources, Section 7.1 Organic Liquid Storage Tanks* (2000).
- [9] *Plan de Acción Estratégico (PAE) para la gestión ambiental sustentable de un área urbano-industrial a escala completa*, JMB para Japan International Cooperation Agency (2003).