Asociación Argentina



de Mecánica Computacional

Mecánica Computacional Vol XXVIII, págs. 2805-2816 (artículo completo) Cristian García Bauza, Pablo Lotito, Lisandro Parente, Marcelo Vénere (Eds.) Tandil, Argentina, 3-6 Noviembre 2009

ANÁLISIS DE LA CIRCULACIÓN DE UN CONTAMINANTE ATMOSFÉRICO EMITIDO POR UNA FUENTE PUNTUAL

Huber G. Fernández^a y Carlos E. Tais^a

^aGrupo de Estudio de Calidad en Mecatrónica, Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Villa María, Avda. Universidad 450, 5900 Villa María, Argentina, fernandez-h@frvm.utn.edu.ar

Palabras Clave: Contaminación atmosférica. Difusión turbulenta. Pluma Gaussiana. Ley de Fick.

Resumen.

En el ámbito de la Ingeniería Ambiental, se destaca como área de estudio la contaminación atmosférica. Dentro de esta temática, toman especial relevancia los fenómenos relacionados al transporte de contaminantes a través de la atmósfera y particularmente aquellos originados en una fuente puntual de emisión, como es el caso de una chimenea.

La necesidad del abordaje de la problemática mediante el análisis de los resultados obtenidos con los modelos de difusión atmosférica se presenta como primordial, ya que posibilita dar tratamiento anticipado a un eventual problema de contaminación.

Un modelo adecuado de contaminación atmosférica debería permitir inferir con exactitud, concentración de contaminantes provenientes de fuentes puntuales de emisión, en cualquier situación meteorológica, en cualquier lugar y para cualquier período de tiempo.

Como se sabe la dispersión de la pluma se produce por causa de la mezcla turbulenta del fluido, que naturalmente se rige por movimientos de tipo aleatorios, lo que dificulta el tratamiento analítico del problema. Por tal razón, los modelos actuales realizan simplificaciones del complejo problema real. Uno de los modelos más utilizados al efecto es el que se conoce como distribución Gaussiana. La utilización de la distribución Gaussiana, aunque sea de forma múltiple, permite la utilización de ecuaciones y soluciones matemáticas ya probadas anteriormente y siempre es posible elegir una distribución adecuada de los centros que definen la forma de la estructura de modo que se logre representar las causas de la gran variabilidad en la dispersión del contaminante. En este modelo se usa la lógica de difusión turbulenta de la pluma Gaussiana aplicada a una fuente puntual que emite contaminantes a una tasa determinada.

Para este caso se determina la distribución espacial de la concentración del contaminante por medio de una simulación computacional del modelo de difusión basado en la ecuación de difusión de Fick, empleando el Método de Elementos Finitos (MEF) para la resolución numérica en estado estacionario, utilizando para ello, software comercial, aplicándolo a un caso real de transporte de contaminante (SO₂) y evaluándolo en distintos puntos del dominio analizado. Se obtienen así resultados ajustados a las ecuaciones que definen el modelo de comportamiento del fenómeno

1. INTRODUCCIÓN

Las emisiones producidas por chimeneas industriales están reguladas con el fin de proteger la salud de los seres humanos y el ambiente. Como se sabe la dispersión de una pluma generada puntualmente se produce por causa de la mezcla turbulenta del fluido, que naturalmente se rige por movimientos de tipo aleatorios, lo que dificulta el tratamiento analítico del problema.

Generalmente se usan modelos de dispersión para verificar que el impacto de la emisión de fuentes puntuales de este tipo a nivel atmosférico esté dentro de los límites que establece la normativa.

Dentro de los diferentes modelos de dispersión se destaca el de la distribución tipo Gaussiana, así llamada por la similitud de la curva de dispersión con la conocida función de distribución normal Gaussiana o campana de Gauss. La utilización de otras funciones de distribución más complejas no garantiza el éxito, puesto que no existe una base empírica para la selección a priori de la mejor función de distribución (T. M. Heron, 1984). Mediante este modelo se puede calcular la concentración de gases o aerosoles en puntos ubicados viento abajo de la fuente.

Es necesario destacar que se llama concentración media \bar{c} a la cantidad de materia suspendida (en este caso contaminante) por unidad de volumen, generalmente expresada en $\mu g/m^3$.

1.1. Hipótesis del modelo gaussiano

El modelo de la columna de humo Gaussiana (penacho gaussiano) sostiene 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 un ascenso Δh , debido al movimiento inicial del humo así como a la diferencia de temperaturas entre el gas saliente y el aire que le rodea.
- A partir de H 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.



Figura 1: Distribución Gaussiana.

Los coeficientes de dispersión vertical generalmente se calculan según fórmulas empíricas. Estas fórmulas suelen estar implementadas en los programas informáticos de modelos de dispersión que se utilizan habitualmente y están en función de la clase de estabilidad atmosférica.

1.2. Estabilidad Atmosférica

La estabilidad 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 Tabla 1:

Radiación solar									
U ₁₀ [m/s]	Día			Noche					
	Fuerte	Moderada	Débil	Nubes $> 1/2$	Nubes $< 3/8$				
< 2	A	A-B	В						
2-3	A-B	В	С	E	F				
3-5	В	B-C	D	D	E				
5-6	С	C-D	D	D	D				
> 6	С	D	D	D	D				

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

1.3. Estimación de elevación

La elevación del penacho Δh se define como la diferencia entre la altura de la línea central final del penacho y la altura inicial de la fuente. Esta elevación está originada por la fuerza ascensional y el impulso vertical del efluente.

La temperatura de salida del efluente en el caso de que supere en más de 50^{0} C la temperatura ambiental, tiene mayor influencia que el impulso vertical en la determinación de la altura que alcanzará el penacho.



Figura 2: Elevación/Dispersión

Como regla general la elevación del penacho es directamente proporcional al contenido calorífico del efluente y a la velocidad de salida del mismo, e inversamente proporcional a la velocidad local del viento (P. K. Misra, 2008; Srivastava, 1998; R. K. Srivastava, 2000, 2001).

Una de las fórmulas más empleadas para el cálculo de esta elevación es la de Holland (DeN-

evers, 1995):

$$\Delta h = \phi_{chim} \left(\frac{U_{humo}}{U_w}\right)^{1,4} \left(\frac{T_s - T_{amb}}{T_s}\right) \tag{1}$$

siendo Δh la elevación del penacho por encima de la fuente emisora (m), ϕ_{chim} el diámetro interior del conducto de emisión (m), U_{humo} la velocidad del humo (m/s), U_w la velocidad media del viento (m/s), T_s la temperatura del contaminante (K) y T_a la temperatura ambiente atmosférica (K).

Los valores de Δh obtenidos con esta fórmula deben corregirse mediante la Tabla 2, multiplicando por un factor, establecido por Pasquill-Gifford-Turner (Turner, 1970), que es función de las condiciones meteorológicas, que se describen más adelante.

Categorías de	Factor de corrección		
estabilidad (clases)	aplicado al Δh		
A-B	1.15		
С	1.1		
D	1.00		
E-F	0.85		

Tabla 2: Factores de corrección de Δh

1.4. Factores que influyen en la dispersión

Las condiciones meteorológicas y la duración del escape tienen una gran importancia en el alcance de la dispersión del penacho. Los factores principales son: la velocidad del viento y la estabilidad atmosférica. La estabilidad atmosférica viene definida en función del gradiente vertical de temperatura de las capas del aire. Los datos de velocidad del viento y estabilidad atmosférica, siempre que sea posible, deben obtenerse de estaciones meteorológicas locales. Dado que no siempre es posible disponer de esta información, a través de la Tabla 1, puede obtenerse la categoría de estabilidad atmosférica estimada según las condiciones de insolación y velocidad del viento.

La velocidad del viento se mide normalmente a 10 metros de altura. Esta velocidad, a niveles más bajos de 10 metros, se ve reducida notablemente debido a los efectos de rozamiento. Para niveles distintos de este valor, la velocidad del viento debe corregirse según la relación (Arya, 1995):

$$U_w = U_{10} \left(\frac{z}{10}\right)^p \tag{2}$$

siendo U_w la velocidad del viento a la altura de la fuente emisora (m/s), U_{10} la velocidad del viento a la altura de 10 m (m/s), z la altura de la fuente emisora (m) y p un coeficiente exponencial.

Los valores de p son función de la estabilidad atmosférica y la rugosidad del suelo. En la Tabla 3 se presentan tales valores.

1.5. Coeficientes de dispersión

Los parámetros σ_y y σ_z son las desviaciones tipo en las direcciones lateral y vertical respectivamente, que representan una medida de la dispersión del penacho en dichas direcciones. Tales

	Coeficiente exponencial			
Estabilidad	atmosférico p			
	Urbano	Rural		
А	0.15	0.07		
В	0.15	0.07		
С	0.2	0.10		
D	0.25	0.15		
E	0.4	0.35		
F	0.6	0.55		

Tabla 3: Coeficientes de corrección de la velocidad del viento

parámetros son función de la distancia a la fuente emisora viento abajo y de la clase (categoría) de estabilidad atmosférica definida en la Tabla 1

En la Figura 3, se muestran unos gráficos ampliamente utilizados para obtener las σ_y y σ_z (Turner, 1970). Estos gráficos indican que para una determinada distancia viento abajo de la fuente de emisión, la amplitud del penacho es máxima cuando la inestabilidad atmosférica es también máxima y es mínima cuando la atmósfera es muy estable.



Figura 3: Coeficiente de dispersión (a) σ_y (b) σ_z

Los cálculos de estos parámetros se realizarán según las siguientes expresiones:

$$\sigma_u = a x^b \qquad \sigma_z = c x^d \tag{3}$$

Se pueden calcular ambos coeficientes, dependiendo directamente de la estabilidad atmosférica, mediante los datos de la Tabla 4:

Los valores obtenidos por medio de estos gráficos o por las fórmulas que han dado lugar a ellos, solamente son aplicables en campo abierto (zona rural).

2. CARACTERÍSTICAS DEL CASO PLANTEADO

2.1. Modelo físico y geometría

Para el desarrollo de este trabajo se toma el caso específico de una chimenea de una industria instalada en las proximidades de un aeropuerto. Con esta aplicación se procura estimar cual

Clase de estabilidad	a	b	c	d
atmosférica				
A	0.527	0.865	0.280	0.900
В	0.371	0.866	0.230	0.850
С	0.209	0.897	0.220	0.800
D	0.128	0.905	0.200	0.760
Е	0.098	0.902	0.150	0.730
F	0.065	0.902	0.120	0.670

Tabla 4: Valor de coeficientes a, b, c y d en función de la clase de estabilidad atmosférica

es la altura mínima a la cual los aviones pueden atravesar la pluma para no encontrarse con concentraciones del contaminante en cuestión, mayores a la máxima permitida, o determinar si la misma no interfiere el circuito de aproximación a la pista.

El origen del sistema de coordenadas se coloca en la base de la chimenea (fuente), con el eje x en la dirección en la que sopla el viento. Para los posteriores cálculos se supone que la pluma se emite desde (0, 0, H) donde H es como se explicara anteriormente la altura efectiva de la chimenea. Para este caso la chimenea cuenta con una altura física de h = 40m y como se explicó anteriormente Δh para las condiciones de estabilidad atmosférica y geometría de esta chimenea arroja un valor de 90 m, en consecuencia la altura efectiva de la chimenea en cuestión alcanza un valor de H = 130m.

Es necesario destacar que la ruta de vuelo hacia el aeropuerto es perpendicular a la pluma a una distancia de 3500 m desde el punto de emisión en la dirección evaluada.

2.2. Datos y consideraciones particulares

Se llamará Q a la intensidad de la fuente (o tasa de emisión), que es la cantidad de contaminante en cuestión emitido por unidad de tiempo. Este arroja por medición, un valor de 300 g/s para el caso en estudio.

El contaminante analizado es SO_2 . Las emisiones de este son consideradas como no reactivas en atmósfera durante el tiempo recomendable para el análisis del fenómeno mediante este modelo (S. Hatakeyma, 1995; F. Mehdizadeh, 2004).

El límite de concentración de este contaminante en aire es provisto por la legislación vigente. La velocidad del viento determinada por la estación meteorológica local es siempre mayor a 2 m/s y no superior a 10 m/s en promedio, rango que será tomado para analizar la gama de velocidades pertinente al caso considerado. En cuanto a la dirección del viento, esta coincide con la dirección analizada para el eje de la pluma con una frecuencia del 58,7 %, según se desprende del análisis del registro estadístico de la estación meteorológica local.

Las condiciones de estabilidad atmosférica para la zona, se seleccionan de la Tabla 1 correspondiendo a categorías D y E para noche (caso crítico) y para valores menores y mayores respectivamente en el intervalo de velocidades

3. MODELO MATEMÁTICO

La relación básica para la difusión turbulenta es la ecuación diferencial que se aplica a la difusión para propiedades conservativas:

$$\frac{d\bar{c}}{dt} = -\mathbf{v} \cdot \nabla \bar{c} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right)$$
(4)

Esta ecuación expresa que el cambio local del valor medio de la concentración de contaminante es producida por dos efectos, uno (representado por el término de la derecha) es la advección media de c y los restantes términos indican la convergencia del transporte por torbellinos de \bar{c} . Los coeficientes K_x , K_y y K_z son coeficientes de difusión en las direcciones x, y y z respectivamente.

La ecuación (4) puede ser aplicada a gran variedad de problemas, especificándose las condiciones de contorno adecuadas. Se supone válido el hecho de que las partículas son tan pequeñas que se pueden despreciar sus velocidades terminales, que no se depositan contundentemente en el suelo y que además no existen fuentes ni sumideros, es decir, que la tasa de emisión de la fuente se asume constante. Estas hipótesis establecen características conservativas a la ecuación 4 (O. Klemm, 1994; A. Kumar, 1999).

3.1. Fuente puntual continua

Cuando se emiten contaminantes de forma continua, en condición de estado estacionario, es decir que la concentración de contaminante no experimenta variaciones en el tiempo y asumiendo que los coeficientes K también son constantes, entonces se toma la dirección x en la que se desplaza la pluma y en (4), el primer término de la derecha se reduce a $u\frac{\partial \bar{c}}{\partial x}$. Este representa el transporte de contaminante por el flujo medio y es mucho mayor al transporte turbulento en esa dirección por lo tanto puede despreciarse el término $\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right)$ y finalmente (4) puede expresarse como:

$$u\frac{\partial\bar{c}}{\partial x} = K_y \left(\frac{\partial^2\bar{c}}{\partial y^2}\right) + K_z \left(\frac{\partial^2\bar{c}}{\partial z^2}\right)$$
(5)

utilizando las siguientes condiciones de contorno:

- 1. $\bar{c}(x=\infty)=0$
- 2. $\bar{c}(x, y, z = 0) = 0$
- 3. $K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}(z=0)=0$

La solución a la ecuación para una fuente puntual continua en superficie es:

$$\bar{c} = \frac{Q}{4\pi u t \sqrt{K_y K_z}} \exp\left[-\frac{1}{4t} \left(\frac{y^2}{K_y} + \frac{z^2}{K_z}\right)\right]$$
(6)

Como la fuente no se encuentra a nivel de superficie, considerando su altura efectiva se obtiene (F. Mehdizadeh, 2004)

$$\bar{c} = \frac{Q}{4\pi u t \sqrt{K_y K_z}} \exp\left[-\frac{1}{4t} \left(\frac{y^2}{K_y} + \frac{(z-H)^2}{K_z}\right)\right]$$
(7)

Reemplazando $K_y = 0.5\sigma_y^2 \frac{u}{x}$, $K_z = 0.5\sigma_z^2 \frac{u}{x}$ y $t = \frac{x}{u}$ en (7) se obtiene:

$$\bar{c} = \frac{Q}{4\pi x \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right)\right]$$
(8)

4. MÉTODO DE RESOLUCIÓN

Para la resolución del problema planteado en (5) se utiliza software comercial basado en el método de elementos finitos.

La discretización espacial se realiza con una malla estructurada constituida por elementos rectangulares lagrangeanos cuadráticos. Cada elemento posee un grado de libertad por nodo (concentración).

El sistema lineal resultante de la discretización en elementos finitos se resuelve mediante el método GMRES (Generalized Minimun Residual) (Saad y Schultz, 1986). Este es un método de tipo iterativo para resolver sistemas lineales de la forma Ax = b que utiliza un precondicionador para acelerar la convergencia denominado multimalla algebraico que resulta adecuado para problemas de una sola variable (escalar).

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la Figura 4 se muestran las curvas de concentraciones analizadas en el eje x, definidas para valores de estabilidad atmosférica tipo neutra (categoría D) y de tipo estable (categoría E). Puede observarse para cada una de ellas como a medida que nos retiramos de la fuente disminuye la concentración de contaminante y que en situaciones de mayor estabilidad atmosférica las concentraciones permanecen mayores para un mismo desplazamiento en x.



Figura 4: Variación de la concentración del contaminante en la dirección del viento para distintas velocidades del viento bajo la condición (a) neutro (b) estable

En las Figuras 5 y 6 se muestra el perfil de los valores de concentración del contaminante alcanzado en distintos planos (todos perpendiculares a la dirección de desplazamiento x de la pluma), analizados para distintas velocidades y para distintas distancias desde la fuente de emisión, para casos de estabilidad atmosférica neutra y estable respectivamente.

Para todos los casos se puede ver claramente representado el perfil Gaussiano de la curva de concentraciones (la mitad de la curva, la otra mitad es simétrica) de acuerdo como podría predecirse con un procedimiento analítico.

Se observa el fenómeno difusivo en estudio a medida que el plano seleccionado se retira en la dirección considerada. Las concentraciones iniciales comienzan un proceso de decadencia



Figura 5: Variación de la concentración para el caso neutro en dirección perpendicular al viento para distintas velocidades (a) a 100 m de la fuente (b) a 500 m de la fuente (c) a 1000 m de la fuente (d) a 1500 m de la fuente

en los valores a medida que la distancia a la fuente de emisión aumenta, respondiendo a la lógica de la ecuación de difusión de Fick. Se puede percibir que la amplitud de la campana se va incrementando a medida que el plano de estudio se retira de la fuente para x = 500 m, la amplitud puede considerarse en y = 2000 m y para x = 1500 m, la amplitud abre hasta 3500 m y consecuentemente la concentración permanece en descenso hasta valores prácticamente despreciables para los 3500 m en la dirección y.

En la Figura 7 se muestra un comparativo entre las dispersiones originadas en la dirección x, para distintas velocidades del viento. Como se explicó anteriormente según datos de la estación meteorológica local puede asumirse que los vientos oscilan entre promedios mínimos y máximos de 2 m/s y 10 m/s, razón por la cual se analizó para valores de 2, 5, 7 y 10 m/s respectivamente, observándose correlación entre aumento de velocidades de viento y dispersión o variación de las concentraciones de contaminante.



Figura 6: Variación de la concentración para el caso estable en dirección perpendicular al viento para distintas velocidades (a) a 100 m de la fuente (b) a 500 m de la fuente (c) a 1000 m de la fuente (d) a 1500 m de la fuente

6. CONCLUSIONES

Se resuelve mediante la aplicación del método de los elementos finitos un problema numérico de determinación de concentraciones de un contaminante SO_2 , para un caso práctico de emisión del mismo desde una fuente puntual para un área rural y a una distancia determinada, aplicando principios de difusión turbulenta y dispersión con distribución tipo Gaussiana.

Como consecuencia de los resultados analizados anteriormente se puede afirmar que la ruta de vuelo planteada no se ve afectada por la pluma de la chimenea industrial en cuestión, ya que el diseño de la misma y las condiciones atmosféricas presentes en la zona producen una dispersión de contaminante (cuya concentración inicial no es demasiado intensa) tal que a los 3500 m de distancia, donde se localizaría la ruta de acceso a la pista del aeropuerto, la concentración de contaminante es despreciable.

Los resultados obtenidos por medio de las simulaciones confirman los supuestos teóricos de la dispersión horizontal y vertical de la pluma emitida a medida que esta avanza con la misma en la dirección del viento y permite inferir rutas de vuelo a distancias apropiadas para el caso



Figura 7: Comparación de la variación de la concentración en dirección del viento para velocidades del viento de (a) 2 m/s (b) 5 m/s (c) 7 m/s (d) 10 m/s

en cuestión.

Se puede concluir que la herramienta informática utilizada como alternativa se adapta a la aplicación requerida y confirma resultados que obtenidos en forma analítica.

REFERENCIAS

A. Kumar N. K. Bellman A.S. Performance of an industrial source complex model: predicting long-term concentrations in an urban area. *Environmental Progress*, (2):93–100, 1999.

Arya S. *Air pollution meteorology and dispersion*. Oxford University Press, New York, 1995. DeNevers N. *Air pollution control engineering*. McGraw-Hill. New York, 1995.

- F. Mehdizadeh A.R. Modeling point source plumes at high altitudes using a modified gaussian model. *Atmospheric Environment*, 38:821–831, 2004.
- O. Klemm E.S. Aircraft measurement of pollutant fluxes across the border of eastern germany. *Atmospheric Environment*, 28(17):2847–2860, 1994.
- P. K. Misra A.C. Study of atmospheric dispersion of pollutant plumes from elevated stacks

assuming a finite limit to the rate of vertical dispersion. *Atmospheric Environment*, 42:4601–4610, 2008.

- R. K. Srivastava D. S. McRae M.T.O. An adaptive grid algorithm for air quality modeling. *Journal of Computational Physics*, 165:437–472, 2000.
- R. K. Srivastava D. S. McRaeb M.T.O. Simulation of dispersion of a power plant plume using an adaptive grid algorithm. *Atmospheric Environment*, 35:4801–4818, 2001.
- S. Hatakeyma K. Murano H.B.F.S.M.Y. The 1995 peacampot air craft observation of ozone, nox and so2 over the east china sea, the yellow sea and the sea of japan. *Journal of Geophysical Research*, D11(100):23143–23151, 1995.
- Saad Y. y Schultz M. Gmres: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal Scientific Statistics Computing*, 7:856, 1986.
- Srivastava R.K. *An adaptive grid algorithm for air quality modeling*. Tesis de Doctorado, North Carolina State University, 1998.
- T. M. Heron J. F. Kelly P.G.H. Validation of the industrial source complex dispersion model in a rural setting. *Journal of the Air Pollution Control Association*, 31(4):365–369, 1984.
- Turner B. *Workbook of atmospheric dispersion estimates*. U.S. Department of Health, Education and Welfare, 1970.