

Libros de **Cátedra**

Calidad del aire

Monitoreo y modelado de contaminantes atmosféricos.
Efectos en la salud pública

Andrés Porta, Erica Yanina Sanchez
y Esteban Colman Lerner (coordinadores)

FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS

e
exactas

 **EduLP**
Editorial
de la Universidad
de La Plata



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA

CALIDAD DEL AIRE

MONITOREO Y MODELADO DE CONTAMINANTES ATMOSFÉRICOS. EFECTOS EN LA SALUD PÚBLICA

Andrés Porta

Erica Yanina Sanchez

Esteban Colman Lerner

(coordinadores)

Facultad de Ciencias Exactas



**UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA**



INDICE

Prólogo	5
CAPÍTULO 1. COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LA ATMÓSFERA	6
<i>E.Y. Sanchez, A. Porta</i>	
La atmósfera terrestre	6
Ecuación de estado	9
Composición de la atmósfera	11
Teoría sobre el origen de la atmósfera y su evolución hasta el presente	14
Equilibrio de la atmósfera actual	17
Estructura vertical de la atmósfera	26
Bibliografía	34
CAPITULO 2. CONTAMINANTES ATMOSFÉRICOS	35
<i>J.E. Colman Lerner, D. Mellado, E.Y. Sanchez</i>	
Contaminación atmosférica: definición y evolución	35
Introducción a la química atmosférica	46
Contaminantes atmosféricos	47
Clasificaciones de contaminantes	57
Fuentes de contaminación atmosférica	60
Efectos de la contaminación atmosférica	64
Bibliografía	98
CAPÍTULO 3. FUNDAMENTOS METEOROLÓGICOS DE LA DISPERSIÓN DE LOS CONTAMINANTES	100
<i>E.Y. Sanchez, K.B. Balbi</i>	
Introducción	100
Radiación solar	101
Balance de energía sistema Tierra-Atmósfera	106
Temperatura y distribución de calor	107
Presión atmosférica y vientos	113
Turbulencia	118
Estabilidad atmosférica	120
Capa de mezcla	126
Dispersión y transporte atmosférico	131
Influencia de los parámetros meteorológicos en la mezcla y la dispersión de los contaminantes atmosféricos	132
Estabilidad y comportamiento de plumas	134
Bibliografía	138

CAPÍTULO 4. MONITOREO DE CONTAMINANTES ATMOSFÉRICOS	139
<i>J.E. Colman Lerner, M. Orte, D. Giuliani</i>	
Introducción	139
Metodologías para monitoreo de COVs	142
Metodologías de muestreo de COSVs	149
Monitoreo de Material Particulado	154
Fuentes fijas	163
Bibliografía	175
CAPÍTULO 5. MODELOS DE CALIDAD DE AIRE	182
<i>K.B. Balbi, D. Mellado, E.Y. Sanchez</i>	
Introducción	182
Ecuaciones gobernantes	183
Grillas o mallas	191
Clasificaciones de modelos	192
Software disponible	205
Bibliografía	222
CAPÍTULO 6. CONTAMINACIÓN INTRAMUROS	225
<i>L. Massolo, G. Castagnasso</i>	
Introducción	225
Principales contaminantes intramuros	227
Bibliografía	246
CAPÍTULO 7. GESTIÓN Y DIAGNÓSTICO DE LA CALIDAD DE AIRE	248
<i>G. Castagnasso, L.A. Massolo</i>	
Introducción	248
Normas y niveles guía	249
Control de los efluentes gaseosos y permiso de descarga	256
Vínculo entre emisiones y calidad del aire mediante la aplicación de “modelos de dispersión” en la Provincia de Buenos Aires	258
Bibliografía	259
CAPÍTULO 8. EFECTOS EN LA SALUD DE LOS CONTAMINANTES	261
<i>M. Aguilar, D. Giuliani, M. Gutiérrez, S. Represa, A. Porta</i>	
Efectos en la salud del aire contaminado	261
Evidencias epidemiológicas y de estudios de casos	266
Evaluación de efectos asociados	273
Herramientas para la evaluación del riesgo a la salud. Índices y mapas	282
Bibliografía	288

CAPÍTULO 5

Modelos de calidad de aire

K.B. Balbi, D. Mellado, E.Y. Sanchez

Los modelos de calidad del aire utilizan técnicas matemáticas y numéricas para simular los procesos físicos y químicos que afectan a los contaminantes del aire a medida que se dispersan y reaccionan en la atmósfera. Estos modelos, basados principalmente en datos meteorológicos e información sobre fuentes de emisión y características del terreno, están diseñados para caracterizar los contaminantes primarios que se emiten directamente a la atmósfera y, en algunos casos, contaminantes secundarios que se forman como resultado de reacciones químicas complejas dentro de la matriz. Estos modelos constituyen importantes herramientas para los sistemas de gestión de la calidad del aire porque permiten identificar las contribuciones de las fuentes y proveen resultados para el diseño de estrategias efectivas para la reducción de los contaminantes. Adicionalmente, estos modelos pueden utilizarse para predecir potenciales concentraciones de contaminantes procedentes de múltiples fuentes a fin de prevenir y mitigar impactos sobre la salud y el ambiente.

U.S.EPA (1)

Introducción

El modelado puede definirse como el proceso de aplicación de conocimientos fundamentales (principios) o resultados experimentales para simular o describir el funcionamiento de un sistema real bajo determinados objetivos. Puede expresarse como un componente integral entre las mediciones experimentales y las parametrizaciones. Una *ecuación parametrizada* es una ecuación en la que un parámetro se expresa en términos de al menos otros dos. La ecuación de estado, por ejemplo, que relaciona la presión con la temperatura y la densidad del aire, es una ecuación parametrizada. Una *ecuación empírica* es una ecuación en la que un parámetro se expresa como una función empírica (Ej. un ajuste polinómico) de al menos otro parámetro. Mientras que las ecuaciones parametrizadas se derivan de la comprensión, las ecuaciones empíricas no siempre tienen sentido físico. En cambio, reproducen los resultados observados bajo una variedad de condiciones. En tal sentido, los modelos pueden ser herramientas económicas y eficientes siempre que sea factible trabajar con un sistema simplificado que con un sistema real y, a menudo, complejo (2).

En lo que respecta a la matriz atmosférica, la modelación de la contaminación del aire es actualmente imprescindible para desarrollar diferentes tareas que tienen como objetivo garantizar la buena calidad del aire, y así minimizar los impactos sobre las personas y el ambiente (3).

Aunque, a pesar de su utilidad, los modelos de calidad de aire no son la solución final al problema de la contaminación atmosférica, sí permiten suplir las carencias que tienen las medidas de campo en cuanto a resolución espacial y temporal, puesto que una red permanente de estaciones de monitoreo automáticas, con una distribución que compense la resolución del modelo, resultaría extremadamente costosa de instalar y mantener de forma permanente en correcto funcionamiento (4). En tal sentido, la modelación funciona complementariamente al monitoreo de los contaminantes atmosféricos.

El objetivo de los modelos de calidad del aire es encontrar una relación entre las sustancias que son emitidas a la atmósfera, ya sea por causas naturales o antropogénicas, y las concentraciones de estas sustancias, u otras que se originan a partir de ellas en la atmósfera (4). Para ello, los modelos utilizan métodos analíticos y numéricos para simular los procesos físico-químicos que afectan a los contaminantes en su dispersión y transformación en la atmósfera.

Una descripción completa de la dispersión de los contaminantes atmosféricos bajo estudio, alrededor de una fuente de emisión, requiere del conocimiento y el análisis de diversos fenómenos físicos que ocurren en forma simultánea:

- El movimiento de fluidos gaseosos de varias especies y de partículas suspendidas, de densidad variable y en régimen turbulento;
- la transferencia de calor que ocurre al interior del fluido;
- la transferencia de masa que ocurre a la salida de la fuente, en la atmósfera y en los receptores;
- los procesos de formación y destrucción de especies que ocurren al interior del fluido y
- las reacciones químicas que ocurren al interior del fluido bajo la presencia de factores externos como radiación solar y humedad.

Complementariamente, una serie de parámetros de entrada deben ser considerados para alcanzar una descripción representativa del escenario de estudio:

- Meteorología del lugar
- emisión másica de cada especie
- topografía del lugar y el uso del suelo.

Los procesos mencionados hasta aquí han sido exhaustivamente estudiados a lo largo de la historia de la ciencia y su relación y representación se funda en las ecuaciones de momento y las ecuaciones de continuidad de masa / especies, y de la energía, que se presentan a continuación.

Ecuaciones gobernantes

Las ecuaciones de continuidad se utilizan para simular los cambios en la concentración o la proporción de mezcla de una variable en el tiempo y tener en cuenta el transporte, las fuentes y los sumideros externos de la variable. La ecuación de la energía termodinámica se utiliza para predecir los cambios en la temperatura con el tiempo y tiene en cuenta el transporte, fuentes y

sumideros externos de energía. La ecuación de momento, por su parte, se usa para predecir la velocidad del viento y describir así el movimiento de la parcela de aire (5).

Tasas de cambio espacial y temporal

La tasa de variación temporal de una variable, tal como la concentración, el momento o la temperatura, se puede determinar desde el enfoque Euleriano (sistema de coordenadas fijo) o Lagrangiano (en el marco de referencia de la variable a medida que se mueve). Se supone una pluma que contiene un gas con una determinada concentración $N = N(t, x [t])$, viaja con el viento desde el punto fijo A en el oeste hasta el punto fijo B en el este. La tasa de cambio temporal de la variable N , en cualquier punto a lo largo de la trayectoria de la pluma es la derivada total dN/dt (5). La derivada total se puede expandir con la regla de la cadena en coordenadas cartesianas, como:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\partial N}{\partial t} \frac{dt}{dt} + \frac{\partial N}{\partial x} \frac{dx}{dt} = \frac{\partial N}{\partial t} + u \frac{\partial N}{\partial x} \quad \text{Ec. 1}$$

donde $\frac{\partial N}{\partial t}$ es la tasa de cambio temporal de la concentración en el punto fijo A, y $u \frac{\partial N}{\partial x}$ es la tasa de cambio temporal de la concentración en la pluma que resulta del transporte de la misma a una velocidad u .

La derivada total de una variable es distinta de cero cuando otros procesos, distintos del transporte, afectan a la variable. Para el caso de los gases, las reacciones químicas constituyen un ejemplo de estos procesos. Si $dN/dt = 0$, la concentración de un gas no cambia en la trayectoria de la parcela de aire moviéndose con el viento.

La derivada parcial de una variable es la diferencia entre la derivada total y la tasa de cambio de la variable debido al transporte. En tal sentido, la derivada parcial es afectada por procesos externos adicionales al transporte. Si $\frac{\partial N}{\partial x} = 0$, la tasa de producción de una variable debido a procesos externos igual a la tasa de pérdida de la misma debido al transporte de un gradiente espacial de la variable $u \frac{\partial N}{\partial x}$.

El lado izquierdo de la Ecuación 1 está escrito desde el enfoque Lagrangiano, mientras que el lado derecho con un marco Euleriano. Generalizando la Ec.1 a tres dimensiones queda que

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\partial N}{\partial t} + u \frac{\partial N}{\partial x} + v \frac{\partial N}{\partial y} + w \frac{\partial N}{\partial z}$$

Ecuaciones de continuidad

Cuando el aire circula a través de un volumen cerrado y no se ve afectado por procesos químicos o físicos, la masa del aire total se conserva. En un esquema de grilla de la atmósfera, la diferencia cuantitativa entre la masa de aire que ingresa a la celda de la grilla y la masa de aire que sale de dicha celda, es nula. La misma relación se observa para otras variables atmosféricas, tales como las concentraciones de una sustancia o la energía, cuando sólo el transporte afecta a estas variables (5).

La Figura 1 muestra una celda de dimensiones Δx , Δy , Δz [m]. La velocidad con la que la masa de aire entra a la celda es u_1 y la velocidad con la que sale de la celda es u_2 [ms^{-1}], mientras que la concentración con la que ingresa es N_1 y con la que sale es N_2 [$\text{molec. cm}^{-3} \text{s}^{-1}$].

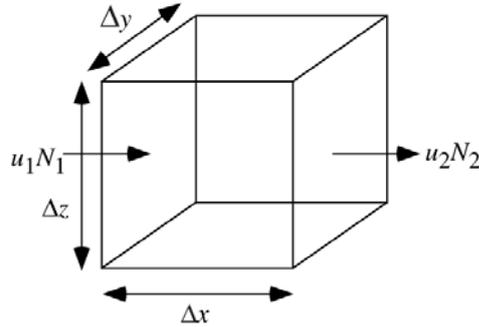


Figura 2: Representación gráfica de la conservación de la masa que atraviesa una celda de dimensiones Δx , Δy , Δz . El número de moléculas que ingresa a la celda, menos el número de moléculas que sale, es igual al número de moléculas que se acumula en la celda. Fuente: Jacobson (5)

Por tanto, el número de moléculas que se acumula en la celda durante el período Δt , se define como:

$$\Delta N \Delta x \Delta y \Delta z = u_1 N_1 \Delta y \Delta z \Delta t - u_2 N_2 \Delta y \Delta z \Delta t$$

Cuando $\Delta x \rightarrow 0$ y $\Delta t \rightarrow 0$, las diferencias discretas pueden aproximarse con derivadas. De este modo, reemplazando los Δ por ∂ , y despejando $\frac{\partial N}{\partial t}$, se obtiene la **ecuación de continuidad** para un gas afectado por la velocidad de la masa de aire en una dirección.

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial(uN)}{\partial x}$$

Esta ecuación puede expandirse en tres dimensiones en coordenadas cartesianas como:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial(uN)}{\partial x} - \frac{\partial(vN)}{\partial y} - \frac{\partial(wN)}{\partial z} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}N)$$

Ec. 2

donde ∇ : operador gradiente, también llamado operador nabla, un operador vectorial de derivadas parciales.

La ecuación 2 representa la ecuación de continuidad sin considerar la difusión molecular o fuentes/sumideros externos. Una forma más completa de la Ecuación 2 está dada por:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}N) + D \nabla^2 N + \sum_{n=1}^{N_{e,t}} R_n$$

Ec. 3

donde D es el coeficiente de difusión molecular del gas ($\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$), $N_{e,t}$ es el número de procesos externos que afecta al gas de interés, tales como reacciones químicas, emisiones, etc; y R_n es la tasa temporal de cambios de la concentración del gas traza debido a n -avos procesos externos que afectan al gas ($\text{molec. cm}^{-3} \text{s}^{-1}$). Esta ecuación (Ec. 3) se denomina **ecuación de continuidad expandida**.

De otro modo, la Ec. 3 puede expresarse como:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial(uN)}{\partial x} + \frac{\partial(vN)}{\partial y} + \frac{\partial(wN)}{\partial z} = D \left(\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} \right) + \sum_{n=1}^{N_{e,t}} R_n \quad \text{Ec. 4}$$

La difusión molecular es el movimiento de las moléculas debido a su energía cinética. Cuando las moléculas se mueven, colisionan con otras moléculas y son redireccionadas en direcciones arbitrarias. Un coeficiente de difusión molecular cuantifica la tasa de difusión molecular. Una explicación más detallada puede encontrarse en Jacobson (5).

Cuando interesa modelar los fenómenos a escala menores a la mesoescala, es necesario considerar las fluctuaciones en los movimientos de las masas de aire, debido a remolinos (*Eddies*, en inglés). Estos remolinos, involucran escalas espaciales que pueden ir desde un par de milímetros a cientos de metros; y escalas temporales de segundos a horas.; y escalas temporales de segundos a horas. Sin embargo, cabe destacar que no todos los modelos son capaces de resolver el fenómeno de la turbulencia. Aquellos que sí lo hacen, emplean las *ecuaciones promediadas de Reynolds*. Estas ecuaciones parten de descomponer cada variable en una componente promedio y otra instantánea. En este contexto, el vector velocidad del viento queda representado como:

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{v}'$$

Y lo mismo con sus componentes en x, y, z:

$$u = \bar{u} + u', \quad v = \bar{v} + v', \quad w = \bar{w} + w'$$

donde $\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ son las magnitudes (velocidades escalares) promediadas en el tiempo y el volumen ($\Delta x \Delta y \Delta z$), y u', v', w' son las velocidades instantáneas o perturbaciones de las velocidades escalares.

Como muestra la Figura 2, las concentraciones instantáneas se distribuyen a ambos lados del promedio, y su promedio espacial y temporal es igual a cero ($\overline{u'} = 0$). De igual modo, $\overline{v'} = 0$, $\overline{w'} = 0$. Esto constituye la *suposición de Reynolds*.



Figura 2: Representación gráfica de la velocidad escalar (en x) promedio e instantánea. Fuente: Jacobson (5).

Para movimientos más grandes que la escala molecular, la difusión molecular se vuelve despreciable frente a los flujos turbulentos. En este contexto, la Ecuación 4 puede presentar su variante (Ec. 5) cuando se consideran los fenómenos turbulentos, buscando así una mejor representación de los flujos atmosféricos.

$$\frac{\partial \bar{N}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}\bar{N})}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{v}\bar{N})}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{w}\bar{N})}{\partial z} + \frac{\partial(\overline{u'N'})}{\partial x} + \frac{\partial(\overline{v'N'})}{\partial y} + \frac{\partial(\overline{w'N'})}{\partial z} = \sum_{n=1}^{N_{e,t}} \bar{R}_n$$

De otro modo, y análogamente a la Ecuación 3, queda representada la **ecuación de continuidad para un gas**, o una especie, **considerando los flujos turbulentos**, como:

$$\frac{\partial \bar{N}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{v}}\bar{N}) + \nabla \cdot (\overline{\mathbf{v}'N'}) = \sum_{n=1}^{N_{e,t}} \bar{R}_n$$

Y lo mismo para la **ecuación de continuidad para el aire**, considerando los flujos turbulentos.

$$\frac{\partial \bar{\rho}_a}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{v}}\bar{\rho}_a) + \nabla \cdot (\overline{\mathbf{v}'\rho_a'}) = 0$$

donde se considera que el aporte de las fuentes y sumideros externos para las moléculas del aire, son despreciables. Asimismo, como suele ser $\rho_a' \ll \bar{\rho}_a$, la divergencia del flujo turbulento puede ser ignorado, simplificando aún más la ecuación a:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_a}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{v}}\bar{\rho}_a) = 0$$

En lo expuesto hasta aquí es claro que una mejor representación del sistema real atmosférico a escalas menores a la mesoescala, puede lograrse al considerar los flujos turbulentos. Sin embargo, resolver los términos que tienen las magnitudes instantáneas (ej. $\overline{u'N'}$), denominados *flujos turbulentos cinemáticos*, representan una dificultad si no se recurren a parametrizaciones. Básicamente, estas pueden clasificarse en dos grandes grupos:

- ✓ Las *aproximaciones de cierre o clausura de primer orden* donde los términos de divergencia turbulenta (flujos turbulentos) se especifican en función de variables conocidas, y
- ✓ las *aproximaciones de cierre o clausura de segundo orden* o superior que determinan tales términos mediante la resolución de ecuaciones adicionales.

Un detalle de las ecuaciones de cierre o clausura, son discutidos en Jacobson (5). En este libro se describirá brevemente una de las aproximaciones más sencillas y utilizadas (primer orden), que se basa en la hipotética analogía entre las transferencias molecular y turbulenta, conocida por el nombre de *Teoría del transporte-gradiente* (Teoría-K), debido a que en ella los flujos o transporte turbulento se relacionan con gradientes de los promedios de las variables correspondientes (velocidad, temperatura, humedad, etc.) (6).

En tal sentido, los flujos turbulentos cinemáticos de la concentración de un gas o especie pueden parametrizarse con:

$$\overline{u'N'} = -K_{h,xx} \frac{\partial \bar{N}}{\partial x}, \quad \overline{v'N'} = -K_{h,yy} \frac{\partial \bar{N}}{\partial y}, \quad \overline{w'N'} = -K_{h,zz} \frac{\partial \bar{N}}{\partial z}$$

donde $K_{h,xx}$, $K_{h,yy}$, $K_{h,zz}$ son los **coeficientes de difusión turbulenta** en las direcciones x, y, z, respectivamente. El subíndice h indica que es utilizado el coeficiente de difusión turbulenta para la energía (*difusividad turbulenta termal*), debido a que el transporte turbulento de un gas es similar al de la energía. Cuando se simula el transporte turbulento de la variable velocidad, aparece el coeficiente de difusión turbulenta para el momento (*viscosidad turbulenta*).

Los coeficientes de difusión turbulenta para la energía y el momento difieren, pero no por mucho. Estos coeficientes representan la difusión o transporte promedio para remolinos de todos los tamaños menores que la celda del mallado o grilla del modelo, dicho en otras palabras, menores que la resolución espacial del modelo. Tal como se presentó en el Capítulo 3, el transporte vertical es causado por cizallamiento mecánico (turbulencia mecánica) y / o flotabilidad (turbulencia térmica). La cizalladura horizontal del viento crea remolinos que aumentan de tamaño cuando el viento fluye sobre superficies rugosas. La flotabilidad crea inestabilidad, provocando que los remolinos inducidos por esfuerzo cortante se vuelvan más anchos y más altos. Los movimientos verticales en los remolinos transfieren el aire de la superficie hacia arriba y el de arriba hacia abajo. Asimismo, los remolinos también intercambian el aire horizontalmente (5).

Sustituyendo las parametrizaciones presentadas en la Ecuación 5, se obtiene que:

$$\frac{\partial \bar{N}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}\bar{N})}{\partial x} + \frac{\partial (\bar{v}\bar{N})}{\partial y} + \frac{\partial (\bar{w}\bar{N})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{h,xx} \frac{\partial \bar{N}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{h,yy} \frac{\partial \bar{N}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{h,zz} \frac{\partial \bar{N}}{\partial z} \right) = \sum_{n=1}^{N_{e,t}} \bar{R}_n$$

Las ecuaciones de continuidad para gases traza y partículas incluyen varios términos de fuentes y sumideros. Los gases entran en la atmósfera desde fuentes superficiales y elevadas a través de una emisión. Ellos pueden ser eliminados de la atmósfera y depositados en cuerpos de agua, el suelo, la vegetación, las edificaciones, los vehículos y otras superficies, mediante procesos de deposición seca. En algunas ocasiones, los gases son arrastrados fuera de la atmósfera por la caída de agua en sus diferentes estados (lluvia, nieve, granizo), denominados procesos de deposición húmeda. Asimismo, los gases reaccionan químicamente entre sí y se disocian por radiación solar durante la fotoquímica. Algunos se agregan para formar nuevas partículas durante la nucleación homogénea o el agregado en superficies de partículas existentes durante la nucleación heterogénea. Una vez que una superficie se ha nucleado, las moléculas de gas pueden difundirse y condensarse como un líquido o depositarse como un sólido en la superficie. El material líquido también puede evaporarse o el material sólido puede sublimar a la fase gaseosa. Un gas también puede disolverse en agua líquida sobre la superficie de una partícula. Los gases disueltos pueden evaporarse. Finalmente, un gas puede reaccionar químicamente sobre la superficie de una partícula durante la química heterogénea (5).

Ecuaciones de energía

La temperatura del aire se ve afectada por la transferencia de energía y de trabajo. Los procesos de transferencia de energía incluyen la conducción, la turbulencia mecánica, la turbulencia térmica, la advección y la radiación. La energía se libera al aire (fuente) durante la condensación del vapor de agua, la congelación del agua, las reacciones químicas exotérmicas y la

desintegración radiactiva. Asimismo, la energía se elimina del aire (sumidero) por fusión y sublimación del hielo, y evaporación del agua. El intercambio energético también puede ocurrir en el cambio de estado de otras sustancias distintas del agua, aunque este fenómeno no es muy frecuente (5). Cabe destacar, que la ley de la conservación de la energía afirma que la energía no puede crearse ni destruirse, sólo puede cambiar de una forma a otra

Los cambios de energía en la atmósfera pueden describirse en una ecuación al combinar la primera *Ley de la Termodinámica* y la *Ecuación de Continuidad para el aire*. En tal sentido, la ecuación de energía termodinámica en función de la temperatura potencial virtual queda expresada como

$$\frac{d\theta_v}{dt} = \frac{\partial\theta_v}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\theta_v \approx \frac{\theta_v}{c_{p,d}T_v} \frac{dQ}{dt}$$

donde c_p es el calor específico del aire seco a presión constante

Ecuación de momento

La ecuación de momento describe el movimiento del aire. En un modelo se utiliza para predecir la velocidad del viento, en magnitud y dirección. Par tal fin, y en coherencia con lo que se ha descrito en el Capítulo 3 sobre la formación y desarrollo de los vientos, la ecuación debe contemplar aspectos tales como aceleración por Fuerzas Gradiente de Presión y Centrífuga, por Fuerza de Coriolis, Fuerza Gravitacional, y otros aspectos que se han abordado en este capítulo tales como Fuerzas Viscosas y Divergencia de Flujos Turbulentos.

Si bien, la ecuación de momento puede ser formulada tanto en coordenadas cartesianas como esféricas, su derivación depende de la escala en la que se desee modelar los fenómenos de interés. En tal sentido, las coordenadas cartesianas son útiles para dominios de microescala y mesoescala, donde la curvatura de la Tierra puede ser descuidada. Sin embargo, frente a dominios globales, sinópticos y algunos de mesoescala, las coordenadas esféricas son las apropiadas.

Como información complementaria, cabe destacar que las ecuaciones para el viento geostrofico, el viento gradiente y el viento superficial son derivadas de la ecuación de momento (5).

La ecuación de momento se deriva de la segunda ley de movimiento de Newton, $F=M.a$, donde F es fuerza (N), M es la masa (kg) y a es aceleración ($m\ s^{-2}$). La segunda ley de Newton establece que la aceleración de un cuerpo debido a una fuerza es proporcional a la fuerza, inversamente proporcional a la masa del cuerpo, y en la dirección de la fuerza. En función de lo descrito en esta sección, cuando la segunda ley se aplica a la atmósfera, puede escribirse en forma vectorial como:

$$a_i = \frac{1}{M_a} \sum F$$

Si se define en torno a la aceleración local, la cual es descripta como la tasa de cambio de la velocidad de una parcela de aire en movimiento (dv/dt) relativo a un sistema de coordenadas fijo sobre la tierra, la expresión anterior queda como:

$$a_L = \frac{1}{M_a} (F_r - F_c + F_g^* + F_p + F_v)$$

donde F_r es la fuerza centrípeta, F_c es la fuerza de Coriolis, F_g^* representa la fuerza gravitacional verdadera, F_p a la fuerza gradiente de presión y F_v a la fuerza viscosa.

El desarrollo de cada uno de los términos de las fuerzas involucradas, el cual se puede encontrar en Jacobson (5), presenta a la ecuación de momento completa:

$$\frac{dv}{dt} = -f\mathbf{k} \times \mathbf{v} - \nabla\Phi - \frac{1}{\rho_a}\nabla p_a + \frac{\eta_a}{\rho_a}\nabla^2\mathbf{v} + \frac{1}{\rho_a}(\nabla \cdot p_a \mathbf{K}_m \nabla)\mathbf{v} \quad \text{Ec. 6}$$

donde f es el parámetro de Coriolis, \mathbf{v} es la velocidad de la parcela, $\nabla\Phi$ es la fuerza gravitacional efectiva por unidad de masa, $\frac{1}{\rho_a}\nabla p_a$ es la fuerza gradiente de presión por unidad de masa, η_a es la velocidad dinámica del aire, el cociente $\frac{\eta_a}{\rho_a}$ es la viscosidad cinemática del aire y \mathbf{K}_m es el coeficiente de difusión turbulenta para el momento.

En coordenadas cartesianas en tres dimensiones, la Ecuación 6 queda expresada como:

- **en x:**

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \\ &= fv - \frac{1}{\rho_a} \frac{\partial p_a}{\partial x} + \frac{\eta_a}{\rho_a} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\ &\quad + \frac{1}{\rho_a} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_a K_{m,xx} \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho_a K_{m,yx} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho_a K_{m,zx} \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] \end{aligned}$$

- **en y:**

$$\begin{aligned} \frac{dv}{dt} &= \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \\ &= fu - \frac{1}{\rho_a} \frac{\partial p_a}{\partial y} + \frac{\eta_a}{\rho_a} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \frac{\eta_a}{\rho_a} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\ &\quad + \frac{1}{\rho_a} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_a K_{m,xy} \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho_a K_{m,yy} \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho_a K_{m,zy} \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] \end{aligned}$$

- **en z:**

$$\begin{aligned} \frac{dw}{dt} &= \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \\ &= -g - \frac{1}{\rho_a} \frac{\partial p_a}{\partial z} + \frac{\eta_a}{\rho_a} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \\ &\quad + \frac{1}{\rho_a} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_a K_{m,xz} \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho_a K_{m,yz} \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho_a K_{m,zz} \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right] \end{aligned}$$

Las fuerzas viscosas en la atmósfera son pequeñas excepto, en la baja tropósfera, en cercanía a la superficie donde la colisión de las moléculas con la superficie resulta en una pérdida de energía cinética a la superficie. La pérdida de momento en la superficie hace que la magnitud de los vientos sea nula allí, pero se incrementa rápidamente por encima de la superficie, en forma logarítmica. La variación relativamente grande y no lineal, de la velocidad del viento sobre una distancia corta, incrementa la magnitud de la fuerza viscosa. Por lo expuesto, en contextos alejados de la superficie terrestre, la fuerza viscosa suele ser despreciable y eliminada de las ecuaciones anteriores.

Grillas o mallas

Se define grilla o malla al dominio de estudio que ha sido dividido en celdas de dimensiones conocidas, asegurando a priori que el valor promedio de una variable estimado en cada celda, será representativo que volumen (3-Dimensiones) o área (2-Dimensiones) que posee cada celda.

Las grillas de coordenadas esféricas y cartesianas se representan como cuadrículas regulares o estructuradas, en las cuales, las celdas de la grilla están alineadas en una red o patrón geométrico fijo, pero no necesariamente son rectangulares. Por ejemplo, las celdas de cuadrícula de coordenadas esféricas son no rectangulares pero se distribuyen en un patrón fijo. Otro tipo de cuadrícula a la que se puede recurrir en un modelado, es una cuadrícula irregular o no-estructurada, en las cuales las celdas no están alineadas en una retícula o patrón fijo, y pueden tener forma y tamaño irregulares. Los mallados irregulares son útiles para modelar aplicaciones en las que los límites reales no coinciden con los límites de una malla regular. Por ejemplo, en el modelado oceánico, las líneas costeras son límites desiguales que no coinciden bien con los límites de coordenadas cartesianas o esféricas (5).

Las grillas irregulares son útiles para tratar modelos que requieren mejorar la resolución en algunos espacios y abordar otros espacios del dominio con una menor resolución, a fin de optimizar el tiempo en la computadora. Asimismo, las grillas regulares también se pueden aplicar a este tipo de dominios que requieren de diferentes resoluciones. En este aspecto, estos últimos recurren al uso de la red de estiramiento y anidación:

- ✓ El estiramiento de la grilla es la disminución gradual y luego el aumento en el espaciamiento en el mallado de oeste-este y/o de sur-norte en una grilla de coordenadas esféricas para permitir una resolución más alta en algunas regiones.

- ✓ La anidación es la ubicación de una red de resolución fina dentro de una cuadrícula de resolución gruesa que proporciona condiciones de contorno a la cuadrícula de resolución fina.

Finalmente, una vez que se cuenta con el dominio de dimensiones y resolución características de los fenómenos de estudio, debe recurrirse a técnicas de resolución de las ecuaciones en el mallado de interés. En tal sentido, cada una de las ecuaciones presentadas en este capítulo deberá ser resuelta en cada una de las celdas de la grilla. Esto sólo será posible si se recurre a métodos de resolución numérica:

- Los flujos sobre cuadrículas irregulares generalmente se resuelven con métodos de elementos finitos o métodos de volumen finito. Los métodos de diferencias finitas son desafiantes (pero no imposibles) para implementar sobre cuadrículas irregulares.
- Los flujos sobre las cuadrículas regulares generalmente se resuelven con métodos de diferencia finita, aunque también se utilizan a menudo los métodos de elementos finitos y de volumen finito.

Un mayor detalle de las técnicas de confección de mallas, métodos de resolución numérica puede encontrarse en Jacobson (5).

Clasificaciones de modelos

Si se hace una revisión de la literatura competente, pueden encontrarse numerosas clasificaciones de los modelos (en función de su aplicación, del método de resolución de las ecuaciones, de la escala espacial, de la escala temporal, entre otras), ninguna de las cuales permite establecer una categoría estrictamente excluyente.

Una clasificación ampliamente utilizada, es aquella que diferencia la *herramienta con la que se representan los mecanismos de emisión-dispersión*. En tal sentido, si bien existen modelos basados en experimentos de laboratorio que han permitido identificar algunos mecanismos del transporte de contaminantes atmosféricos, el problema global solo ha sido abordado por los modelos matemáticos, con una mayor o menor dosis de empirismo (4). Por lo expuesto, una primera diferencia se presenta entre los modelos físicos y los modelos matemáticos (3, 5-7).

A) Modelos físicos, son aquellos que a partir de experimentos de laboratorio a pequeña escala, tratan de obtener representaciones globales o parciales del fenómeno. En la matriz atmosférica, los túneles de viento son los modelos por excelencia. Su principal aporte práctico se focaliza en lograr una mejor comprensión de algunos fenómenos que caracterizan el flujo de una pluma en la atmósfera, tal como la sobreelevación inicial o la difusión interna; de hecho, sus resultados se aplican a menudo en los modelos matemáticos.

B) Modelos matemáticos, están constituidos por un conjunto de ecuaciones algebraicas y/o diferenciales, que describen los aspectos físicos y químicos del problema. A la actualidad,

existe un gran número de modelos aplicables a experimentos reales, pero que requieren de una calibración específica sobre cada escenario en cuestión.

Dependiendo de la naturaleza del planteo, Zannetti (3) los sub-clasifica en:

B.1) Modelos determinísticos: Estos tratan de establecer alguna formulación matemática que describa la influencia de los procesos atmosféricos en el transporte de contaminantes; por ejemplo, una relación entre la causa (emisiones) y su consecuencia directa (niveles de concentración de contaminantes en la atmósfera y en el suelo).

B.2) Modelos estadísticos: Son aquellos modelos basados en las relaciones estadísticas entre los datos históricos de emisión, la meteorología y la concentración de contaminantes medida en diferentes ubicaciones de receptores en el escenario de estudio (inmisión). Solo sus aplicaciones como modelos de largo alcance o como modelos climatológicos están extendidas, porque para alcanzar resultados válidos requieren un tiempo de cálculo prohibitivo para predicciones a corto plazo. Además, se requieren habitualmente grandes ordenadores dedicados a esta tarea.

Otras clasificaciones pueden presentarse, de acuerdo a (6):

I. Modo de enfocar el problema

- **Orientados al receptor**, son los que tratan de reconstruir la contribución de cada foco emisor a cada foco receptor considerado, generalmente sin tener en cuenta los patrones de dispersión que siguen los contaminantes.
- **Orientados al foco emisor**, o modelos de dispersión atmosférica, que tratan de definir la distribución de una sustancia química o partícula, que se emite a la atmósfera basándose en la representación matemática de los diferentes fenómenos de transporte y transformación que puede experimentar dicha sustancia.

II. Escala espacial

- **Regionales o nacionales**, son utilizados para el estudio del transporte y la dispersión de contaminantes a grandes distancias (de 100 a 1500 km). Habitualmente, utilizan datos meteorológicos históricos.
- **Locales**, evalúan la convección y dispersión de los contaminantes emitidos en distancias relativamente pequeñas (de 1 a 100 km). Por su alcance, estos fenómenos se circunscriben casi exclusivamente a la capa límite planetaria. Requieren de una descripción meteorológica detallada de la zona de aplicación.

III. Dominio y resolución temporal:

- **Climatológicos**, utilizan patrones meteorológicos históricos para obtener valores medios de concentraciones de inmisión*, estacionales o anuales.

* **Inmisión:** Se define como la transferencia de contaminantes del aire desde la atmósfera libre a un receptor tal como un ser humano, planta o edificio. De acuerdo a esta definición, inmisión es tasa, medida o proporción de masa, u otra propiedad cuantificable determinada por unidad de intervalo de tiempo, la cual debe ser medida en lo posible en el receptor.

- **A mediano plazo**, se establecen para períodos de tiempo de unos días a unas semanas. Pueden combinar datos históricos con predicciones meteorológicas al fin de obtener una descripción aproximada de la dinámica atmosférica en ese período. Se obtienen medias diarias.
- **Episódicos**, se utilizan para el estudio de la dispersión en condiciones anómalas de unas horas a unos días. Requieren de una descripción y un análisis exhaustivo del evento y de los patrones meteorológicos, para obtener valores de inmisión (generalmente horarios).
- **Simulación en tiempo real**, intenta aplicar un modelo de tipo episódico alimentado con predicciones meteorológicas a corto plazo, o con medidas recibidas en tiempo real. Requiere de un compromiso entre la complejidad del modelo y su tiempo de respuesta. Generalmente, son modelos locales.

IV. *Método de resolución (2):*

- **Modelos analíticos**, también conocidos como modelos de sondeo, se caracterizan por ser una solución analítica de las ecuaciones gobernantes, la cual es posible alcanzar gracias a las numerosas simplificaciones de la hipótesis que se plantea. Son útiles para obtener una primera aproximación al problema, enfocado a la toma de decisiones, ya que lo hace de manera simple y rápida. Este tipo de modelos no se suelen recomendar para aplicación en escenarios que presentan influencia de grandes cuerpos de agua, terrenos con una orografía muy compleja, compuestos o mezclas de compuestos que sufren reacciones químicas, o condiciones de calma, entre otros, ya que estos procesos son considerados despreciables en estos modelos, y forman parte de las simplificaciones de las que se parte para alcanzar la ecuación de la solución analítica. La ausencia o dificultad de obtención de los datos de entrada es, frecuentemente, el criterio básico de decisión para el uso de este tipo de modelos. Entre los modelos más conocidos de esta rama, se encuentran:
 - *Modelos de caja*: son los más sencillos y tratan la zona en estudio como un sistema cerrado en el que se mueven los contaminantes por impulso del viento medio. Son modelos puramente mecánicos, que suelen incorporar un módulo químico para simular la transformación de los contaminantes.
 - *Modelos gaussianos*, son los más utilizados. Consideran que la pluma emitida sigue una distribución gaussiana perpendicular al movimiento convectivo principal. De este modo se pretende simular la dispersión de los contaminantes en la dirección de la componente advectiva dominante. Sin embargo, aunque permiten obtener resultados aproximados muy rápidamente, no han conseguido una descripción real del fenómeno de dispersión.

- **Modelos numéricos**, abordan la resolución de las ecuaciones gobernantes de una manera aproximada, mediante métodos numéricos tales como diferencias finitas, elementos finitos, etc. A diferencia de los anteriores, requieren de datos de entrada más complejos en cuanto a facilidad de obtención o procesamiento previo. Aunque estos modelos ofrecen un resultado más descriptivo y ajustado a la realidad frente a los modelos analíticos, requieren de un análisis más exhaustivo en la fase inicial, lo que implica la participación de un usuario experto. Estos pueden clasificarse en:
 - *Eulerianos*, utilizan un sistema de referencia absoluto y tratan de estimar la dispersión referida a este sistema mediante distintas soluciones de integración numérica.
 - *Lagrangianos*, distinguen dos sistemas de coordenadas para el cálculo del desplazamiento de los contaminantes: uno absoluto, referido a las coordenadas del foco emisor, en el que se calcula la traslación media de los elementos de contaminante considerados; otro relativo, referido a un punto representativo de la traslación media de la pluma, para obtener una mejor descripción de la dispersión debida a la turbulencia.

La U.S.EPA, por su parte, clasifica a los modelos de calidad de aire de acuerdo a su aplicación (1):

- **Modelos de dispersión:** Se usan típicamente en el proceso de permisos para estimar la concentración de contaminantes en receptores específicos a nivel del suelo, que se encuentra en inmediaciones a una fuente de emisión.
- **Modelos fotoquímicos:** Se emplean a menudo en evaluaciones regulatorias para simular los impactos de múltiples fuentes mediante la estimación de las concentraciones de contaminantes y la deposición de los mismos, tanto inertes como químicamente reactivos, sobre grandes escalas espaciales.
- **Modelos de receptores:** Estos modelos constituyen técnicas de observación que utilizan las características físico-químicas de los gases y partículas medidos en la fuente y el receptor para identificar la presencia y para cuantificar las contribuciones de la fuente a las concentraciones del receptor.

A partir de lo expuesto hasta aquí, se profundizará en la descripción de dos tipos de modelos que han sido presentados anteriormente: los **modelos Gaussianos** y los **modelos numéricos**. Si bien estos modelos, presentan diferencias marcadas, tales como el método de resolución de las ecuaciones gobernantes, el nivel de detalle con el que describen los fenómenos físicos y químicos (lo cual se traduce directamente en salidas menos o más descriptivas), ambos modelos son ampliamente utilizados en la gestión de la calidad del aire.

Modelo Gaussiano

Tal como se adelantó en la sección anterior, para resolver las ecuaciones gobernantes es preciso asumir algunas aproximaciones para obtener una solución aplicable. En tal sentido, la ecuación Gaussiana representa la solución analítica más utilizada, y de amplia difusión. Esta ecuación se alcanza por considerar que:

- ✓ las especies contaminantes son inertes, **no reaccionan**. En tal sentido, será aplicable a sistemas reales en el que las reacciones químicas sean lentas comparadas con el transporte turbulento.
- ✓ la difusión turbulenta es isotrópica y constante, igual en todas las direcciones. Por ello, las escalas consideradas (espaciales y temporales características) de los cambios de concentración deberán ser grandes en comparación con las correspondientes a las escalas de transporte turbulento. En tal sentido, la escala espacial empleadas para la aproximación gaussiana va desde *los 100 m a los 10km*, y la escala temporal se define de *una hora*, tiempo para el cuál se promediaran los parámetros utilizados desde la óptica de la aproximación *no estacionaria*.
- ✓ la difusión molecular es mucho menor que la difusión turbulenta en la misma dirección, de modo que resulta despreciable,
- ✓ la hipótesis de atmósfera incompresible conlleva a que la ecuación de continuidad se reduzca a la condición de un campo de vientos con divergencia nula, debido a que la densidad del aire se considera prácticamente constante. En tal sentido, el *vector velocidad del viento*, se mantendrá *constante en dirección y módulo* (magnitud) durante la hora de simulación.

A pesar del gran número de hipótesis simplificadoras que conducen a la ecuación gaussiana y a las limitaciones inherentes de estos modelos, ellos son útiles si se desea conocer la distribución probabilística de las concentraciones en un determinado lugar, causadas por una determinada fuente y modulada su distribución por las condiciones meteorológicas predominantes. Por su simpleza y tiempos de ejecución es el modelo más implementado en la gestión. Las simplificaciones son válidas tanto para emisiones continuas como para fuentes instantáneas, excepto el concepto tiempo promedio (o medio) que no debe aplicarse a una emisión instantánea.

Como se observa en la Figura 3, la pluma se eleva a una altura adicional a la altura de emisión (H_s) como consecuencia de la temperatura mayor que posee el contaminante emitido, con respecto a la temperatura ambiente; y por el propio movimiento vertical que tienen los gases cuando salen de la chimenea. En tal sentido, aparece una magnitud denominada altura efectiva (H_{ef}) que es la suma de la altura de emisión (H_s) y la flotación de la pluma (ΔH): $H_{ef} = H_s + \Delta H$.

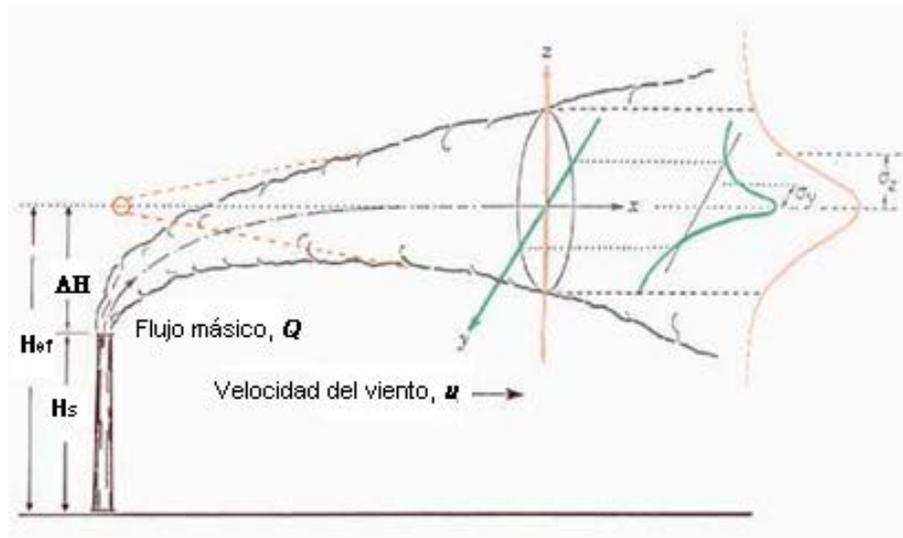


Figura 3: Esquema de una pluma gaussiana. H_{eff} , se define como la altura media del transporte de la pluma; H_s , como la altura de emisión, Δz como la elevación de la pluma, Q es el caudal másico y u es la velocidad del viento.

La formulación matemática para el cual los gases emanan de una altura H y con efecto de reflexión del suelo, se describe como:

$$C_{(x,y,z)} = \frac{Q}{2\pi u_s \sigma_y \sigma_z} e^{\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)} \left\{ e^{\left(-\frac{(z-H_{ef})^2}{2\sigma_z^2}\right)} + e^{\left(-\frac{(z+H_{ef})^2}{2\sigma_z^2}\right)} \right\} \quad \text{Ec. 7}$$

donde C : concentración del contaminantes [g/m³]

x : distancia del receptor a sotavento [m], incluida en la estimación de los coef. dispersión.

y : distancia del receptor, perpendicular aleje de simetría de la pluma [m]

z : altura del receptor [m]

Q : tasa de emisión [g/s]

u_s : velocidad del viento a la altura de la emisión [m/s]

H_{ef} : altura efectiva de la chimenea [m]

\tilde{A}_y, \tilde{A}_z : coeficientes de dispersión lateral y vertical.

En esta ecuación, la superficie actúa como una barrera que limita la dispersión, Se asume que el suelo no es un sumidero, sino que refleja el material que lo alcanza. La reflexión en la superficie se toma en cuenta mediante la introducción de una fuente virtual, similar a la real, ubicada a la profundidad H , como muestra la Figura 4. La concentración, para cualquier posición por encima de la superficie ($z \geq 0$), está dada por la suma de las contribuciones de la fuente real y la fuente virtual.

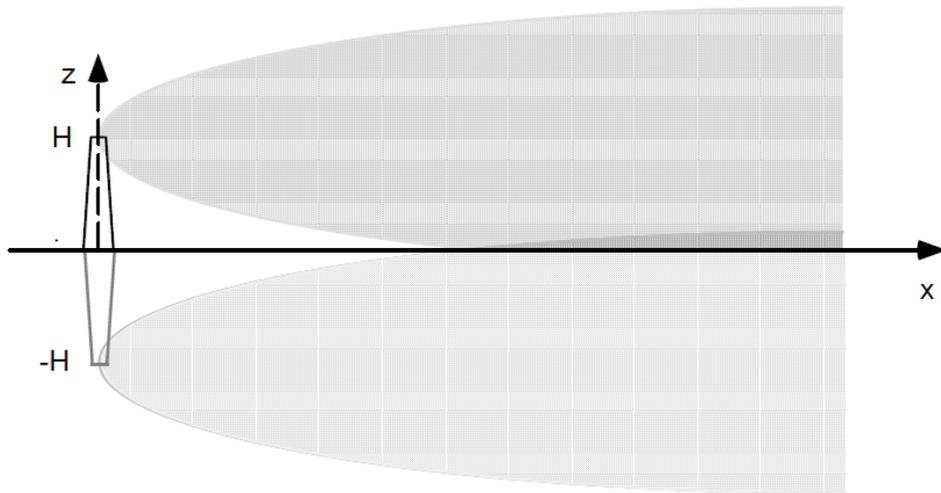


Figura 4: Representación de la fuente de emisión real y una fuente virtual, cuya suma de los aportes representa la reflexión de los gases que alcanzan la superficie.

Para resolver la Ecuación 7, se requiere del empleo de cálculos auxiliares para:

1- Coeficientes de dispersión: \tilde{A}_y, \tilde{A}_z

\tilde{A}_y y \tilde{A}_z se definen como las desviaciones estándar vertical y horizontal, que determinan la forma de la curva de Gauss y dependen de la estabilidad atmosférica. En cada categoría de estabilidad atmosférica, se utiliza una función de variación de \tilde{A}_y con la distancia a la fuente emisora y otra función para \tilde{A}_z . A mayor distancia del foco emisor los coeficientes aumentan en magnitud (mayor ancho y menor altura).

Los coeficientes \tilde{A}_y y \tilde{A}_z representan relaciones empíricas, ya que han sido elaborados a partir de diversos experimentos de difusión en la atmósfera utilizando sustancias trazadoras, y también de fuentes existentes. Numerosas son las ecuaciones que pueden encontrarse en la literatura para su cálculo. A continuación, se abordarán algunas de ellas:

- ✓ Para la especificación de los coeficientes de dispersión, Turner (8) propuso el empleo de monogramas para aproximar el valor de \tilde{A}_y y \tilde{A}_z [m]. Ver Figura 5 y 6.

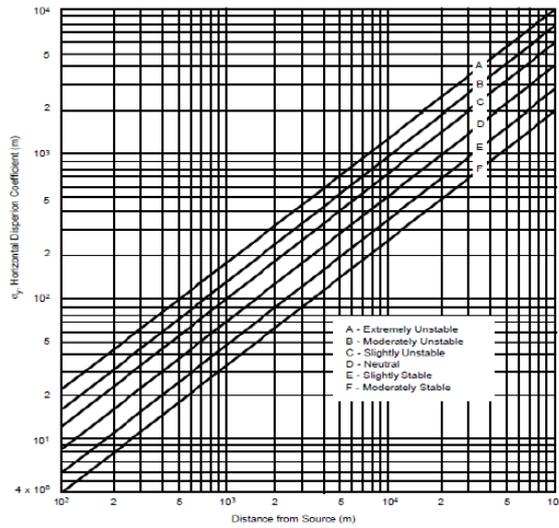


Figura 5: Desviación normal transversal (\tilde{A}_y) a la dirección advectiva del viento, en función de la distancia a la fuente de emisión a sotavento (x), para cada estabilidad atmosférica.

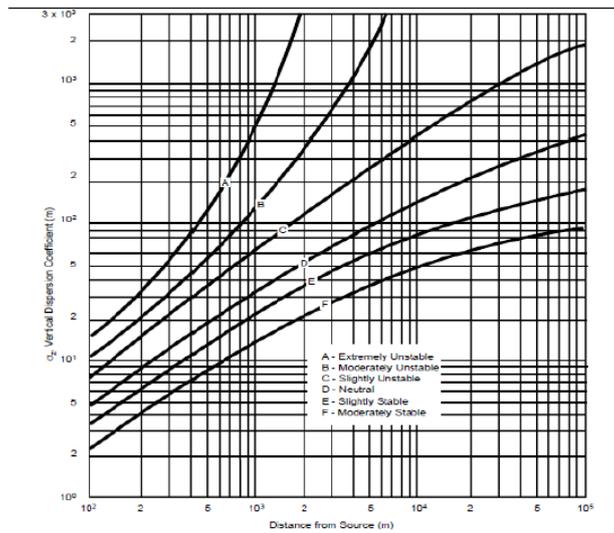


Figura 6: Desviación normal vertical (\tilde{A}_z) en función de la distancia a la fuente de emisión a sotavento (x), para cada estabilidad atmosférica.

✓ Otra alternativa para su cálculo, es emplear correlaciones tales como la de Martin (9),

$$\sigma_y = ax^{0.894} \quad \sigma_z = cx^d + f$$

donde a , c , d quedan establecidos por los valores de la Tabla 1. x es la distancia a sotaventos, desde la fuente [en km], y los valores de \tilde{A}_y y \tilde{A}_z está dada en metros.

Tabla 1: Valores de las constantes a, c, d para las relaciones empíricas propuestas por Martin (9)

Estabilidad	x<1km				x>1km		
	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	2.0
C	104	61	0.911	0	61	0.911	0
D	68	33.2	0.725	-1.7	44.5	0.516	-13.0
E	50.5	22.8	0.678	-1.3	55.4	0.305	-34.0
F	34	14.35	0.740	-0.35	62.6	0.180	-48.6

Existen métodos en bibliografía especializada para tener en cuenta la rugosidad del terreno y su efecto en particular sobre el eje vertical, z. La rugosidad z_0 incluye la vegetación, los cultivos y los edificios, tal como se presentó en la Sección 6 del Capítulo 3. La consideración de la rugosidad afectará directamente la dispersión vertical, por lo que deberá ser considerado en el cálculo de \tilde{A}_z [m].

Los valores de \tilde{A}_z que se obtienen a partir de los parámetros empíricos c y d, presentados anteriormente, pueden usarse como tales para un valor de $z_0 = 0.1$ m. Para otros valores de rugosidad, es necesario introducir una corrección de acuerdo con:

$$\sigma_z = cx^d(10 \cdot z_0)^m, \quad \text{donde} \quad m = 0.53x^{0.22}$$

- ✓ Por su parte, Briggs desarrolló fórmulas para estimar los coeficientes en función de la clase de estabilidad y la rugosidad superficial: Urbana y Rural (10-11)

$$\sigma_y(x) = \frac{s_{y1}x}{\sqrt{1+s_{y2}x}} \quad \sigma_z(x) = s_{z1}(1 + s_{z2}x)^{s_{z3}}$$

Tabla 2: Valores de los parámetros empíricos para estimar los coeficientes de dispersión de Brigs (12).

Rugosidad	Coficiente	A	B	C	D	E	F
Rural-Urbano	S_{y1}	0.22	0.16	0.11	0.08	0.06	0.04
	S_{y2}	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
Rural	S_{z1}	0.2	0.12	0.08	0.06	0.03	0.016
	S_{z2}	0	0	0.0002	0.0015	0.0003	0.0003
	S_{z3}	0	0	-0.5	-0.5	-1	-1
Urbano	S_{z1}	0.24	0.24	0.2	0.14	0.08	0.08
	S_{z2}	0.001	0.001	0	0.0003	0.0015	0.0015
	S_{z3}	0.5	0.5	0	-0.5	-0.5	-0.5

El análisis de Briggs empleó sólo dos clasificaciones de rugosidad superficial: *Urbana* corresponde a una gran rugosidad del terreno, o *Rural* que corresponde a una baja rugosidad superficial. Si la rugosidad del terreno es inferior a 20 cm, se selecciona Rural, de lo contrario se selecciona Urbana.

2- Velocidad del viento a la altura de emisión, u .

El modelo gaussiano requiere conocer el perfil vertical de la velocidad del viento. Un viento en estado estacionario varía significativamente con la altura cerca de la superficie. La dispersión en la dirección del viento se genera principalmente por la cizalladura vertical del viento. El perfil se verá afectado por las irregularidades de la superficie sólida sobre la que se mueve el aire. En tal sentido, los obstáculos tales como árboles, arbustos, e incluso hierba tienen un impacto significativo en el perfil vertical del viento.

Cabe destacar que las formulaciones del perfil del viento se basan en la suposición de que la velocidad y la dirección del mismo, así como todas las demás condiciones atmosféricas, permanecen horizontalmente homogéneas y no cambian durante la duración de la emisión.

Como se trató en el Capítulo 3, para estimar el perfil del viento, pueden utilizarse las aproximaciones de potencia y logarítmica. La expresión más utilizada, por la simplicidad de la información que emplea en sus cálculos es la de *Potencia*, en la cual se utiliza la velocidad del viento y la altura de referencia de medición, junto con los datos de estabilidad atmosférica y rugosidad del terreno para calcular un perfil de viento:

$u_z = u_{zRef} \left(\frac{z}{z_{Ref}} \right)^p$.). En la Tabla 2 del Capítulo 3, se presentan valores experimentalmente del parámetro p .

3- Altura efectiva de la chimenea, H_{ef}

Tal como se adelantó en esta sección, la pluma que sale de una chimenea sufrirá una elevación como consecuencia de la cantidad de movimiento vertical producido cuando los gases salen con una velocidad específica, y cuando poseen altas temperaturas en relación a la temperatura ambiente.

Los factores que se consideran en el cálculo de la elevación de la pluma incluyen a parámetros meteorológicos, naturaleza física y química del efluente, y características de la fuente de emisión.

Al igual que los coeficientes de dispersión, existe numerosa literatura que presenta diferentes propuestas para el cálculo de la elevación de la pluma. Una de ellas es la Holland:

$$\Delta H = \frac{v_s d}{u_s} \left[1.5 + 0.00268 p \cdot d \left(\frac{T_s - T_a}{T_s} \right) \right]$$

donde ΔH se define como la elevación de la pluma [m]

v_s es la velocidad de salida del gas de la chimenea [$m s^{-1}$]

d es el diámetro interno de salida de la chimenea [m]

u_s es la velocidad del viento a la altura de emisión [m s^{-1}]

p es la presión atmosférica [mbar]

T_s es la temperatura con la que son emitidos los gases desde la chimenea [K]

T_a es la temperatura ambiente [K]

Un variante de la ecuación de Holland es:

$$\Delta H = \frac{v_s d}{u_s} \left[1.5 + 0.0096 \frac{Q_h}{v_s d} \right]$$

donde Q_h es la tasa de emisión de calor [KJ s^{-1}]

Lo presentado hasta aquí, sobre el modelo gaussiano, constituye las bases sobre las que se han fundado la mayoría de los modelos que se aplican a la gestión. A la fecha, son numerosas las optimizaciones que se han hecho al modelo a fin de lograr una adecuada descripción (con las limitaciones propias de las hipótesis simplificadoras a las que recurre el modelo) obteniendo software simples y de rápida ejecución. Algunas de las optimizaciones que escapan a los objetivos de este libro, hacen referencia a la consideración de múltiples fuentes y de diferentes tipos (de línea, área y volumen), efectos debido a estelas provocada por edificios, terrenos elevados, entre otras.

Como fortalezas a destacar de los modelos gaussianos, pueden mencionarse:

- Los cálculos se llevan a cabo de forma rápida debido al uso de fórmulas simples.
- Los software que lo emplean, son de fácil adquisición en el mercado; y la mayoría suelen ser de uso libre.
- Su uso es intuitivo y su implementación informática es simple (Ej: Hojas de cálculo de Microsoft Excel[®]/ Open Office)

Sin embargo, posee algunas limitaciones importantes, a destacar:

- Es aplicable únicamente a sistemas de flujo sencillos, lo que hace que en ocasiones se pierda información y se sobreestimen los resultados.
- No contempla las variaciones espaciotemporales de la mayoría de los parámetros de cálculo.

Modelo numérico

Tal como se expuso en párrafos anteriores, los modelos numéricos surgen de la resolución de las ecuaciones gobernantes mediante el uso de métodos numéricos tales como diferencias finitas, elementos finitos y volúmenes finitos.

Cómo grandes fortalezas de estos modelos, se destaca la capacidad de simular sistemas más complejos que en el caso de los modelos analíticos, permitiendo abordar las variaciones espacio-temporales. Asimismo, el grado de confianza de los resultados que se obtiene es, por

lo general, mayor que en el caso de los modelos analíticos si lo que se pretende es una solución sofisticada. Sin embargo, para alcanzar este fin, los modelos numéricos requieren de amplios conocimientos de los sistemas a simular. En tal sentido, requieren gran cantidad de datos de entrada que pueden resultar difíciles de obtener y que pueden consumir muchos recursos (tiempo y costos económicos). Adicionalmente, dado que la fiabilidad de los resultados depende de la calidad de los datos de entrada, es necesario garantizar la bondad de los datos de entrada. Como cuestión no menor, usualmente se requiere de una licencia para su uso.

La implementación computacional de los modelos numéricos, que dan cuenta del comportamiento de los fluidos, se los conoce como modelos CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Estos, básicamente buscan discretizar una región del espacio creando una malla o grilla (divide una región del espacio en pequeños volúmenes de control), y a continuación resuelven en cada uno de ellos las ecuaciones gobernantes, de forma iterativa hasta que el residual es suficientemente pequeño.

Como se describe a continuación, el uso de CFD, requiere del tratamiento en etapas de la información.

a. Etapa de Pre-procesamiento: *Caracterizar el flujo, las condiciones iniciales y de contorno. Mallado.*

El análisis incluye el modelo matemático del problema físico en cuestión, la definición de las condiciones de flujo (compresible/ incompresible, estacionario/ no estacionario, 2D/ 3D, viscoso/ no viscoso), y de las propiedades del fluido, considerando densidad, conductividad y viscosidad, entre otras. También es necesario definir el dominio, y las condiciones iniciales y de contorno, como una primera aproximación. Lo importante, es garantizar que en todo el dominio deben verificarse las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía.

La etapa de pre-procesamiento requiere decidir en primer lugar sobre las consideraciones básicas para simular el flujo en el escenario de interés. Los primeros ensayos computacionales suelen realizarse en 2-Dimensiones, presuponiendo simetría axial de la pluma, sabiendo que ello puede apartarse de la realidad en regiones urbanas. Obtenidos los ajustes buscados, se procede a la extensión a 3-Dimensiones del modelo computacional y a la selección de las ecuaciones de cierre o clausura para los flujos turbulentos.

A continuación, se debe trabajar sobre el diseño de la geometría y el mallado que va a representar al escenario de estudio. Un dato interesante a considerar es que la densidad de la grilla debe ser suficiente para capturar todas las características relevantes del flujo, y no demasiado grande para desbordar la capacidad computacional. De este modo, al tener el mallado un impacto significativo en la velocidad de convergencia del problema, en la precisión de la solución y en el tiempo requerido de ejecución, se convierte en una de las principales etapas de la simulación para alcanzar un resultado representativo.

En tal sentido, es necesario enfatizar en las geometrías más relevantes, y en los entornos de estas geometrías, que podrán actuar como barrera de contención o

como canal de transporte. Esto básicamente va a conducir a concentrar o a diluir a los contaminantes en la atmósfera. Para la primera situación, el nivel descriptivo que ofrece un CFD permite identificar zonas vulnerables por atrapamiento de los contaminantes, por períodos prolongados y en concentraciones perjudiciales para la salud.

Una metodología para la creación del mallado es descripta por Bachi et al. (13). Un aspecto importante a considerar es esta etapa, es el impacto significativo que posee la malla sobre la velocidad de convergencia del problema (incluso en la convergencia o no del mismo), la precisión de la solución y el tiempo requerido de CPU. En este sentido, se deben cuidar características tales como:

- densidad de celdas
- relaciones de volumen y dimensiones en celdas adyacentes
- el tipo de elementos a usar (rectángulos, triángulos, etc.)
- el mallado en la capa límite
- el refinamiento adaptativo de acuerdo a las soluciones preliminares.

La malla podrá ser refinada basándose en resultados del cálculo previo, considerando los valores de interés de la solución, los gradientes y el refinado sobre una frontera o dentro de una región determinada.

b. Cálculo de la solución:

Para el cálculo de la solución, las expresiones discretas de las ecuaciones gobernantes, se resuelven de forma iterativa hasta que la solución converge. Esto se alcanza cuando los cambios en las variables entre una iteración y la siguiente son despreciables, y cuando los residuos son menores que el valor definido por el usuario. Estos últimos constituyen una forma efectiva de monitorear la tendencia y la convergencia.

En el contexto presentado, la precisión de la solución que ha convergido depende de lo adecuado y exacto del modelo físico, de la resolución de la malla y la independencia del mallado, y de la elección correcta de los parámetros del modelo y condiciones de borde.

c. Etapa de post-procesamiento:

El principal propósito en la etapa de post-procesamiento es la abstracción y la comprensión de los resultados obtenidos en cálculos previos. Los resultados serán analizados numérica (valores estadísticos, integrales, etc.) y gráficamente (gráficos vectoriales, contornos, iso-superficies, etc.)

Finalmente, las salidas del modelo pueden ser visualizadas en mapas junto a diferentes capas de información, integradas con Sistemas de Información Geográfica (SIG). Esto permite organizar, manipular y analizar la gran cantidad de datos procedentes de la herramienta, permitiendo identificar las zonas de mayor amenaza.

Los avances en la informática y en las técnicas CFD, han contribuido en la aplicabilidad del modelado CFD a eventos no deseados, concluyendo que los resultados obtenidos por los modelos CFD son más exactos y descriptivos que los modelos Gaussianos y que los de Caja (modelos más simples) debido entre otras cosas a que la velocidad del viento es completamente resuelta en comparación a los modelos más simples, donde esta velocidad es un valor único o, simplemente una función de la altura. (14-22) No obstante, teniendo en cuenta la complejidad del movimiento turbulento del aire en la baja capa límite atmosférica, aún los modelos CFD requieren una especificidad regional y de su validación. Algunos estudio de la dispersión de los contaminantes atmosféricos con CFD se presentan en Labovský and Jelemenský, (23) Yang and Shao (24), Brown and Fletcher (25), Chu et al. (26), Solazzo et al. (27), Murillo et al. (28), Dixon (29), entre otros.

Software disponible

Recientemente Hernández-Garcés y colaboradores (7) analizaron la aplicación de los modelos atmosféricos de dispersión disponibles, desde modelos simples a complejos y evaluaron la idoneidad de las diferentes configuraciones dentro de diferentes entornos, en cuanto a la escala, la complejidad del entorno y los parámetros de concentración, tanto para software comerciales como no comerciales.

Asimismo, la Dirección General de Calidad y Evaluación Ambiental y Medio Natural perteneciente al Ministerio de Agricultura y Pesca, Alimentación y Medio Ambiente (MAPAMA) del Gobierno de España, elaboró un documento donde analiza las limitaciones y fortalezas de diversos software para el estudio del transporte y destino de contaminantes en diferentes matrices como suelo, agua (superficial y subterránea) y atmósfera (2).

A continuación, se presenta un desarrollo descriptivo, de algunos software que aplican a la clasificación de la U.S.EPA (de acuerdo a su aplicación).

Modelos de dispersión

Una de las soluciones más extendidas al problema del comportamiento de los contaminantes en la atmósfera son los modelos de dispersión atmosférica. Su planteamiento general sigue el esquema de un modelo de procesos o fenómenos.

SCREEN 3

Es un modelo de dispersión atmosférica sencillo, analítico- gaussiano de una sola fuente que proporciona concentraciones máximas a nivel del suelo para fuentes puntuales, areales, flamas y de volumen; así como las concentraciones por efecto *downwash*, inversiones térmicas y fumigación costera. Puede modelar escenarios con terreno simple o complejo, y brindar resultados a distancias discretas y/o automatizadas. Asimismo, es un modelo recomendado por la U.S.EPA para estimar las concentraciones de gases neutros y partículas.

Posee una interfaz amigable, por lo que no requiere de un usuario especializado. Es flexible en cuanto a las unidades de ingreso de los parámetros (métricas o inglesas) y las salidas son presentadas tanto en textos como en gráficos 2-Dimensiones. Esto último disponible para la versión *Screen View*, donde se puede observar la concentración del contaminante de interés en función de la distancia a sotavento (Figura 7).

Disponible en:

- ✓ La página oficial de la U.S.EPA (Versión DOS)- Gratuita:
https://www3.epa.gov/scram001/dispersion_screening.htm, con el archivo ejecutable, código fuente y guía para el usuario.
- ✓ Lakes Environmental (Versión *View 4.0*)- Gratuita:
<https://www.weblakes.com/products/Screen/index.html>, con el archivo ejecutable y guía para el usuario.

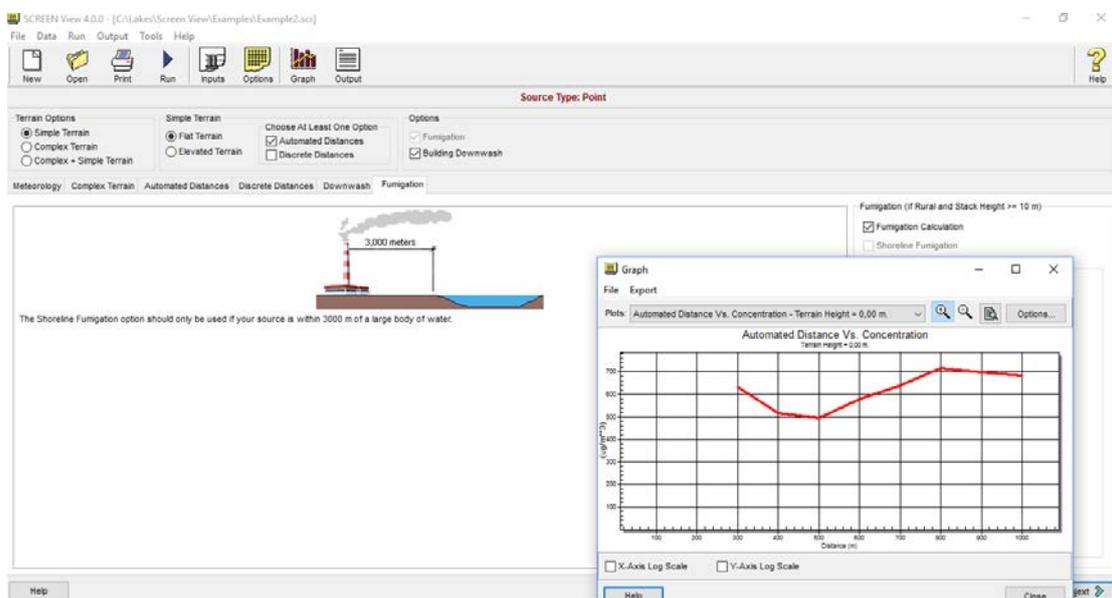


Figura 7: Interfaz y salida gráfica del SCREEN View. Concentración en función de la distancia a sotavento.

Sistema de modelado AERMOD

Es un sistema de modelado numérico de dispersión atmosférica, de pluma en estado estacionario, que la U.S.EPA recomienda como un paquete completo y potente de modelado, ya que introduce conceptos de modelado de última generación basados en las estructuras turbulentas en la PBL, incluyendo el tratamiento de superficies y fuentes elevadas, como así también de terrenos simples y complejos. Es un modelo diseñado para la valoración de emisiones continuas, en lugar de emisiones puntuales de corta duración.

Cuenta con dos procesadores de datos de entrada que son componentes reguladores del sistema de modelado AERMOD:

- ✓ AERMET, un preprocesador de datos meteorológicos que incorpora la dispersión del aire basado en las estructuras turbulentas de la PBL y los conceptos de escalamiento.

- ✓ AERMAP, un preprocesador de datos de terreno que incorpora terreno complejo usando USGS (Datos de elevación digital).

Otros componentes no reguladores de este sistema incluyen:

- AERSCREEN, una versión de sondeo de AERMOD;
- AERSURFACE, un preprocesador de las características de la superficie, y
- BPIPPRIME, un programa de dimensiones multiedificio que incorpora los procedimientos técnicos de GEP para aplicaciones PRIME.

La versión View (Figura 8) de este software posee una interfaz integrada, para evaluar la concentración y la deposición de los contaminantes procedentes de una amplia variedad de fuentes. Incorpora completamente los algoritmos de *building downwash* (descenso de las plumas por influencia de los edificios), parámetros avanzados de deposición, efectos locales del terreno y cálculos de los flujos turbulentos. Requiere de información meteorológica robusta además de los parámetros propios de las fuentes. Como salida, presenta una interfaz totalmente integrada que combina herramientas gráficas, contorneado automático y publicación de resultados. Permite una visualización 3D de toda el área de modelado: las fuentes, los edificios y los resultados del contorno de las concentraciones y/o deposición, se muestran en contexto con el terreno circundante. Se puede exportar como un archivo de extensión *.kml, adecuado para abrir con SIG, ofreciendo una vista superpuesta con otras capas de interés, Ej. Relieve.

Disponible en:

- ✓ La página oficial de la U.S.EPA (Versión DOS)- Gratuita:
https://www3.epa.gov/scram001/dispersion_prefrec.htm, ejecutable, código del modelo y la documentación de la versión 15181 de AERMOD.
- Lakes Environmental (Versión View 9.3)- Comercial:
https://www.weblakes.com/products/air_dispersion.html

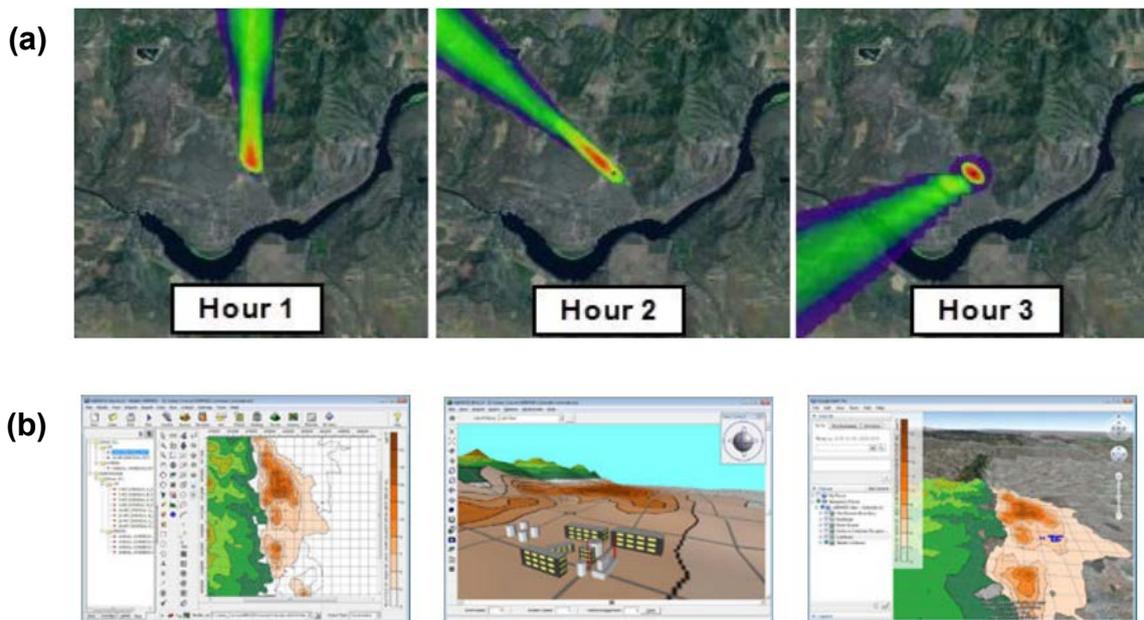


Figura 8: (a) Animación horaria de una pluma. (b) Capturas de pantallas de la interfaz gráfica integrada, de la visualización 3D, y de la salida importada por Google Earth, del AERMOD View. Fuente: Lakes Environmental

Sistema de modelado CALPUFF

CALPUFF es un modelo lagrangiano de nubes aisladas (emisiones discretas) que simula el efecto de las condiciones meteorológicas (con el preprocesador CALMET) variando en el tiempo (no estacionario) y en el espacio sobre el transporte, la transformación y la eliminación del contaminantes. CALPUFF se puede aplicar en escalas de decenas a cientos de kilómetros. Incluye algoritmos para efectos de escala de subgrilla (tales como incidencia de terreno), así como, efectos de mayor alcance (tales como eliminación de contaminantes debido a la deposición húmeda y seca, transformación química y efectos de visibilidad de las concentraciones de partículas). Salidas de la Versión View del CALPUFF se presentan en la Figura 9.

Si bien se trata de un modelo refinado muy apropiado para entorno costero y terrenos complejos en los que la orografía juegue un papel relevante en la dispersión de contaminantes, es complejo en uso, principalmente en la elaboración de ficheros meteorológicos (campos de vientos) representativos de las condiciones de cada emplazamiento.

Disponible en:

- ✓ La página oficial de la U.S.EPA (Versión 5.8.5)- Gratuita:
https://www3.epa.gov/ttn/scram/dispersion_prefrec.htm#calpuff, ejecutable, código fuente, preprocesadores y la documentación de apoyo.
- ✓ Lakes Environmental (Versión View 8.5)- Comercial:
https://www3.epa.gov/ttn/scram/dispersion_prefrec.htm#calpuff

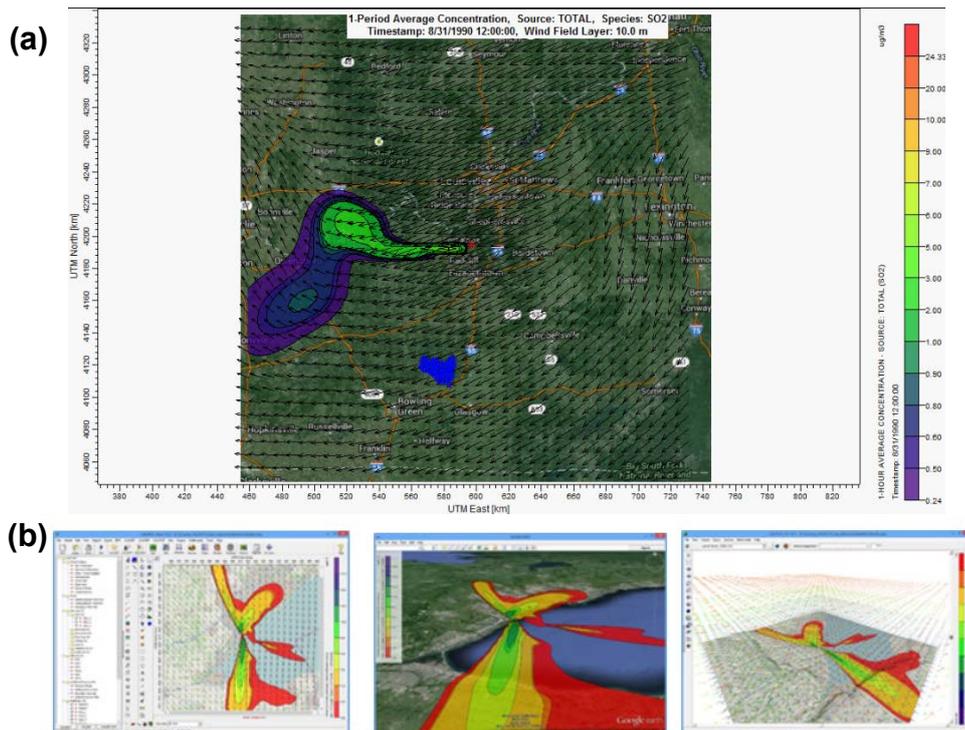


Figura 9: (a) Animación horaria de pluma de SO₂ (b) Capturas de pantallas de la interfaz gráfica integrada, de la visualización 3D, y de la salida importada por Google Earth, del CALPUFF View. Fuente: Lakes Environmental

ANSYS CFD

Es una de las herramientas comerciales de simulación numérica más potente. Posee importantes capacidades de análisis de flujo que se pueden utilizar para diseñar y optimizar nuevos equipos o instalaciones ya existentes. Por otra parte, presenta enormes potencialidades que facilitan su aplicación: ofrece entre otras cosas una herramienta de gestión de proyectos, denominada ANSYS Workbench, que actúa como interfaz de nivel superior y que une todos los módulos del software, Geometría- Malla- Solver-Herramientas de postprocesado. Ofrece su versión para Windows y para Linux.

Ansyes CFD, en su componente fluidodinámica, puede modelar el flujo turbulento, la transferencia de calor y las reacciones para aplicaciones industriales (ej: desde el flujo de aire sobre el ala de una aeronave, la combustión de un horno hasta la emisión de una chimenea- Figura 10-), apto para sistemas multifásicos. La tecnología avanzada de los software ofrece resultados rápidos y precisos, mallas flexibles y procesamiento en paralelo. Las características interactivas de pre-procesamiento, solución y post-procesamiento permiten hacer modificaciones de una forma más simple. La plataforma de ANSYS permite compartir los datos y resultados entre aplicaciones. Una conexión natural con los productos de mecánica estructural de ANSYS permite la detección de los problemas más complejos en la interacción entre fluidos y estructuras en el mismo entorno. Tan amplio es su espectro de escenarios a modelar que puede ser aplicado tanto en una columna de burbujas como en pla-

taformas petrolíferas; o bien simulando el flujo de sangre en una arteria o para el diseño en la fabricación de semiconductores.

Disponible en:

✓ La página de ANSYS- Comercial:

<http://www.ansys.com/products/fluids>

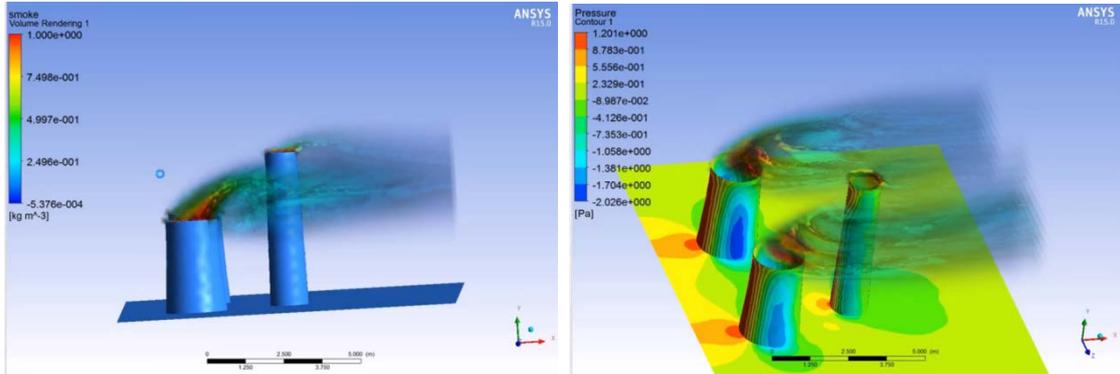


Figura 10: Simulación de chimeneas en una planta termoeléctrica con Ansys CFD. A la izquierda simulación de caudal másico [kg m^{-3}], a la derecha representación de los curvas contornos de presión [Pa].

TANKS

Es un software que se ejecuta en Windows XP (no es compatible con versiones superiores del Sistema Operativo Windows) y que estima las emisiones de compuestos orgánicos volátiles (COV) y otros contaminantes peligrosos del aire (HAP) a partir de los tanques de almacenamiento de techo fijo y flotante. TANKS se basa en los procedimientos de estimación de emisiones partiendo de una compilación de Factores de Emisión de Contaminantes Atmosféricos de la EPA (31). Inicialmente fue diseñado para ser utilizado por agencias gubernamentales, consultores ambientales y otros organismos que necesitan estimar las emisiones de contaminantes del aire desde los tanques de almacenamiento de líquidos orgánicos.

La fortaleza del Programa TANKS es la utilización de datos químicos, meteorológicos, de montaje de tejado y sello de llanta para generar estimaciones de emisiones para varios tipos de tanques de almacenamiento, incluyendo:

- Tanques de techo fijos verticales y horizontales
- Tanques de techo flotante internos y externos
- Cúpulas exteriores de los tanques de techo flotante
- Tanques subterráneos

El software TANKS emplea una base de datos química de más de 100 líquidos orgánicos, y una base de datos meteorológica de más de 240 ciudades en los Estados Uni-

dos. El programa permite agregar nuevas sustancias y ciudades. TANKS es capaz de estimar emisiones de aceites crudos y productos de petróleo refinados seleccionados.

Si bien este software no ha sido actualizado por la U.S.EPA, se sigue utilizando en nuestro país en el ámbito de la gestión de la calidad del aire.

Disponible en:

- ✓ La página oficial de la U.S.EPA (Versión 4.09D)- Gratuita:
<https://www3.epa.gov/ttnchie1/software/tanks/>, ejecutable y manual.

Modelos fotoquímicos

CHIMERE

Desarrollado por EC4MACS (*European Consortium for Modelling of Air Pollution and Climate Strategies*). Es un modelo de transporte químico euleriano, multiescala, diseñado para estimar las concentraciones de las especies químicas habituales, considerando la fisicoquímica de la tropósfera baja. Ideal para modelar aerosoles que contienen sulfatos, nitratos, amonio, aerosol orgánico secundario (SOA), sal marina y polvo. Puede discriminar diferentes tamaños de partículas, como también definirse distintos dominios de resolución (capacidad de abordar la dimensión urbana de una ciudad europea o extenderse a una escala regional, de varios miles de kilómetros). Se requiere información de "Uso del suelo" y un detalle importante de meteorología. Contempla además tasas de fotólisis, tabuladas y con dependencia de altitud.

El modelo configurado presenta mejoras relacionadas con la meteorología, la resolución vertical y las emisiones. El desempeño varía según las estaciones (sobreestimando en invierno en sitios urbanos). Reproduce bien las variaciones temporales (días) de O_3 y logra representaciones fieles de las concentraciones de MP_{10} y $MP_{2.5}$.

CHIMERE es un software muy versátil, lo que lo convierte en una herramienta muy potente de investigación para el desarrollo de parametrizaciones e hipótesis (Ej. Parametrizaciones para las emisiones de sal marina y evaporación de los aerosoles inorgánicos secundarios).

Como muestra la Figura 11, el sistema WRF-CHIMERE-EDGAR es aplicado en Argentina por la Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE) para estimar concentraciones de material particulado $10 \mu m$, ozono troposférico, monóxido de carbono y óxidos de nitrógeno, a escala país.

Disponible en:

- ✓ CHIMERE: <http://www.lmd.polytechnique.fr/chimere/>,

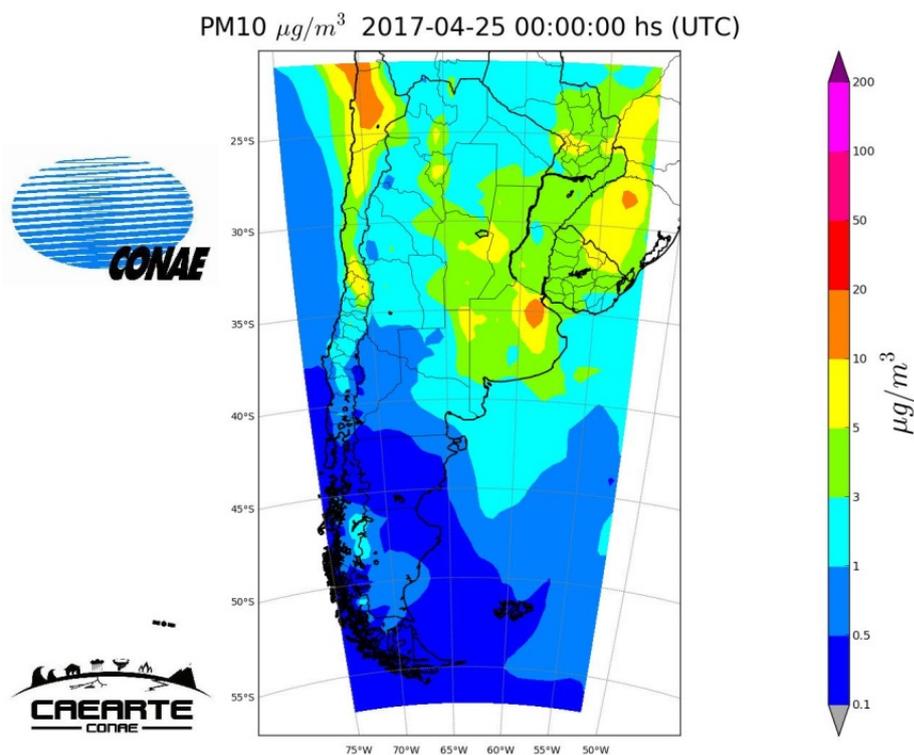


Figura 11: Simulación con sistema WRF-CHIMERE-EDGAR de MP_{10} en Argentina (32).

WRF-CHEM

WRF- CHEM (*Weather Research and Forecasting model coupled to Chemistry*) simula la emisión, transporte, mezcla turbulenta, transformación química y destino de los gases traza y aerosoles simultáneamente con la meteorología. Se utiliza para la investigación de la calidad de aire a escala regional, el análisis de campo y las interacciones de nubes a gran escala.

De gran utilidad en el estudio de formación de aerosoles orgánicos, ozono troposférico, producción de óxidos de nitrógeno, etc. En la práctica ha dado muy buenos resultados en la elaboración de pronósticos de cenizas volcánicas como también en la simulación de tormentas de arena, convirtiéndolo en una herramienta de relevancia para la evaluación de amenazas y gestión de riesgos.

Disponible en:

✓ Página oficial de NOAA

<https://www2.acom.ucar.edu/wrf-chem/>

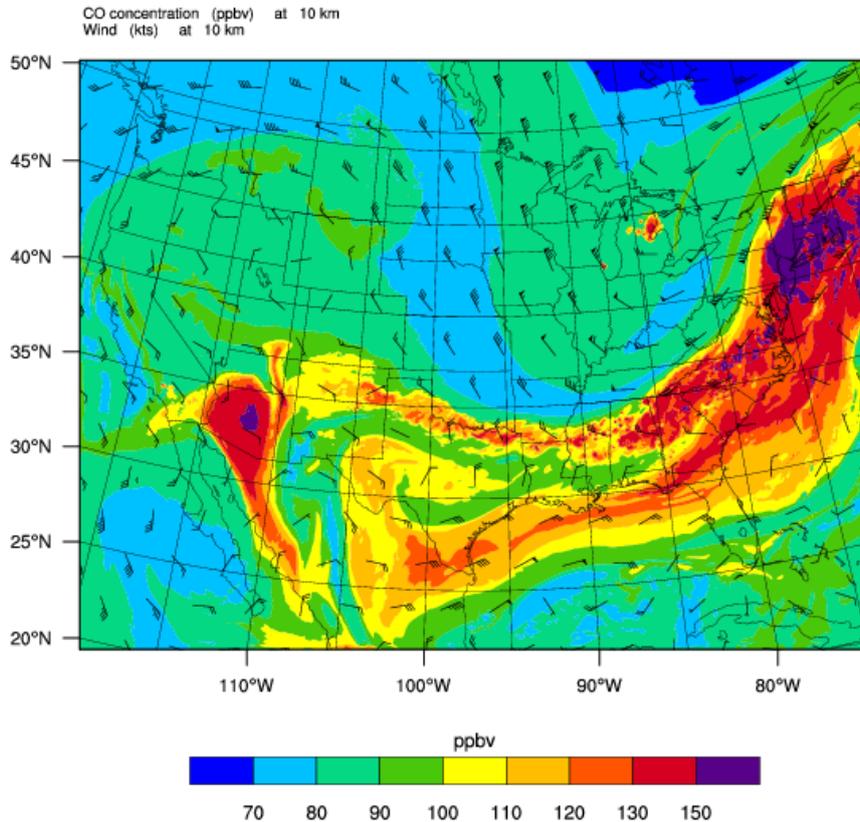


Figura 11: Simulación con WRF-CHEM de monóxido de carbono (ppbv) a 10 km sobre el nivel del mar, en América del Norte. Fuente: NCAR-UCAR

CMAQ

CMAQ (*Community Multiscale Air Quality*) es un proyecto activo de desarrollo de código abierto de la División de Modelación de Ciencias Atmosféricas de la EPA de los Estados Unidos que consiste en una serie de programas para realizar simulaciones de modelos de calidad del aire. CMAQ es apoyado y distribuido por el Centro CMAS.

CMAQ combina los conocimientos actuales en la ciencia atmosférica y el modelado de la calidad del aire con técnicas de procesamiento multiprocesador en un marco de código abierto para proporcionar estimaciones, rápidas y técnicamente sólidas, de ozono, partículas, sustancias tóxicas y deposición ácida.

Se presenta como una herramienta de vanguardia para el modelado de la calidad del aire. Publicada por primera vez en 1998 por la EPA, actualmente cuenta con una comunidad mundial de más de 3.700 usuarios en 95 países(incluyendo universidades, organismos gubernamentales y empresas). CMAQ ha sido utilizado por la EPA y por los organismos estatales de medio ambiente para apoyar las decisiones de política de calidad del aire, siendo de gran utilidad para estudiar los problemas de contaminación atmosférica y crear estrategias de gestión de la calidad del aire. CMAQ proporciona una guía diaria del pronóstico del ozono emitida por el Servicio Meteorológico Nacional. Es una de las herramientas de modelado más respetadas de su género. Ver Figura 12.

Disponible en:

- ✓ Página oficial Centro CMAS (Versión 5.2)

<https://www.cmascenter.org/cmaq/>

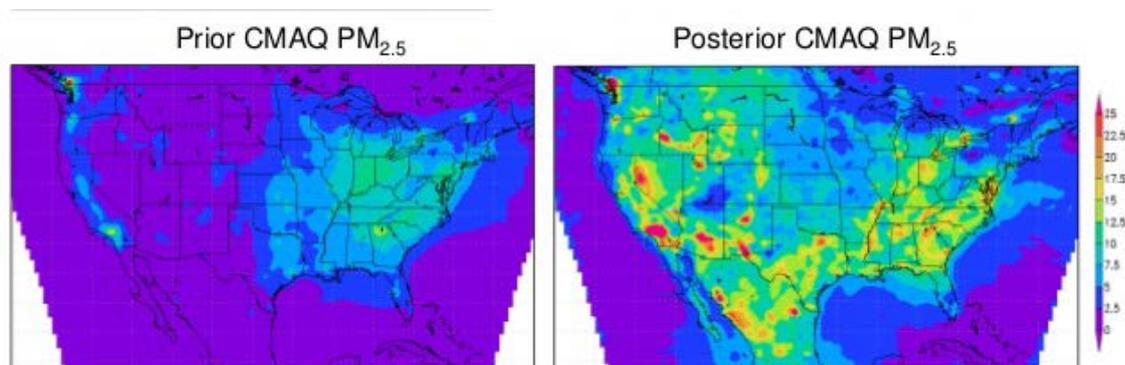


Figura 12: Simulación con CMAQ de concentraciones MP2.5 sobre América del norte (33).

Modelos que aplican a emergencias químicas

ALOHA

ALOHA (*Areal Locations of Hazardous Atmospheres*) es un software que ha sido diseñado inicialmente para responder a emergencias, mediante la estimación de atmósferas peligrosas asociadas a la emisión de alguna sustancia peligrosa. Simula la dispersión de una nube de gas, basándose en las características físico-químicas y niveles guía de exposición de la sustancia de interés, bajo condiciones particulares de emisión y meteorológicas. Dispone de una base de datos de aproximadamente 1000 sustancias químicas, pudiendo ser añadidas otras de interés.

ALOHA es capaz de simular escenarios desde cuatro tipos de fuentes de emisión (directa, evaporación desde charcos, tanques y tuberías), y modelar la dispersión mediante uno de los dos tipos de modelos simples que posee: Gaussiano (nubes neutras) y DEGA-DIS (nubes densas). Para el procesamiento de la información meteorológica, ALOHA solicita el ingreso de nueve parámetros atmosféricos, y en función de ello, la clase de estabilidad atmosférica se selecciona en forma automática por el software.

ALOHA muestra los parámetros estimados de la fuga, y permite definir las áreas (gráfica) en la que las concentraciones estimadas superan a los valores de referencia (LOC) ya sea por aspectos toxicológicos, inflamabilidad, o explosividad. Finalmente, es posible exportar la salida gráfica en formato *.kml y ser procesado por un SIG.

Una fortaleza adicional es que ALOHA permite estimar la concentración de la sustancia tóxica un punto geográfico a sotavento.

Disponible en:

- ✓ Página oficial de la U.S.EPA (Versión 5.4.7) - Gratuito

<https://www.epa.gov/cameo/aloha-software>



Figura 13: Atmósferas peligrosas estimadas con ALOHA para un escape de amoníaco desde un tanque receptor en un Frigorífico. Visualización con Google Earth.

PHAST

Este modelo numérico es una de las herramientas más completa, desarrollada para el análisis de amenazas. Analiza la evolución de un posible incidente, desde la descarga inicial, la dispersión del contaminante (gases neutros, gases densos, soluciones acuosas y mezclas de compuestos) y hasta los efectos potenciales, tóxicos o inflamables. Cuenta con una base de datos que incluye 60 compuestos tóxicos e hidrocarburos, además de la biblioteca con otros 1500 compuestos. El usuario define las condiciones de estabilidad, insolación y presión atmosférica. PHAST es capaz de simular escenarios acordes a emisiones características de más de seis tipos de fuentes (rotura de tanque, fuga por orificio, fuga de válvula, entre otras). PHAST estima zonas de amenaza (salidas textuales o gráficas) en las cuales se superan los niveles de referencia para toxicidad, inflamabilidad, radiación térmica o sobrepresión en el exterior. Dado que calcula parámetros como el tiempo de paso de la nube y la dosis, resulta de utilidad para valorar el daño a receptores.

Disponible en:

- ✓ Página oficial de DNV-GL - Comercial

<https://www.dnvgl.com/services/process-hazard-analysis-phast-1675>

Modelos receptores

Los modelos basados en receptores son procedimientos matemáticos o estadísticos para identificar y cuantificar las fuentes contaminantes del aire en el sitio receptor, a partir de las características químicas y físicas de los gases y partículas medidas. La información resultante del modelo se usa tanto en estudios sobre los efectos en la salud como en los planes de mitigación (34).

Actualmente se cuenta con una amplia variedad de modelos receptores, por lo que la elección del mismo depende del objetivo del estudio y la información disponible. A diferencia de los modelos de calidad del aire (de dispersión o fotoquímicos), los receptores no utilizan datos de emisiones, información meteorológica ni mecanismos de transformaciones químicas para estimar las contribuciones de las fuentes. Debido a esto, los modelos receptores se consideran un complemento natural de los modelos de calidad del aire.

Enfoques de los modelos

La diferencia principal entre los modelos radica en que los modelos de receptor se centran en las propiedades del medio ambiente en el punto de impacto, en oposición a los modelos de dispersión orientados a las fuentes que tienen en cuenta el transporte, la dilución y otros procesos que tienen lugar entre la fuente y el sitio de muestreo. (35)

A continuación se muestra una gráfica que simplifica el conocimiento requerido sobre las fuentes de contaminación para la elección del modelado del receptor:

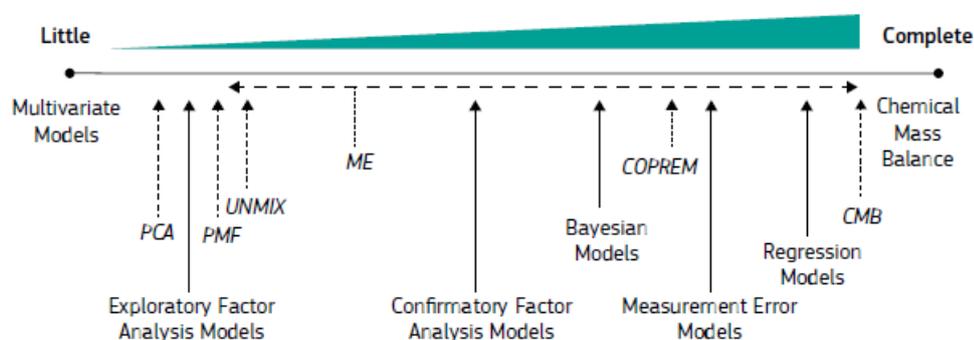


Figura 13: Conocimiento sobre las fuentes de contaminación requeridos para elección del modelo.

Requisitos y alcances

La aplicación de un modelo receptor es adecuada a escalas locales o meso escalas, debido a que en una mayor extensión solo identificaría un número pequeño de fuentes, siendo estas mezclas de todas las fuentes participantes (36).

Los principales requisitos de los modelos receptores incluye (35-36):

- El uso de valores de concentraciones medidas en el receptor (sitio de muestreo) como entradas al modelo (input).
- Una caracterización de las especies químicas de las muestras.

- La elección de un punto de muestreo representativo de la zona de estudio.
- el balance de masa química.
- La independencia lineal de los perfiles de las fuentes entre sí.
- La variabilidad nula de las composiciones de las emisiones de las fuentes el muestreo.
- La disponibilidad de información adicional para restringir la incertidumbre rotacional, propia de los modelos multivariantes.
- La igualdad numérica o diferencia negativa entre el número de fuentes y el número de especies analizadas.

Las principales fortalezas y limitaciones se describen a continuación:

- No depende de los inventarios de emisiones sino que utiliza los perfiles de origen que son requeridos en ciertos modelos.
- No requiere procesadores meteorológicos y químicos complejos.
- Requiere bajo costo computacional.
- Son utilizados principalmente en MP y rara vez en hidrocarburos y gases inorgánicos.
- Apropiado para escalas urbanas y regionales.
- No se consideran los procesos físicos y químicos en la atmósfera. Las especies químicas no reaccionan entre sí, cumpliéndose el principio de linealidad. Su aplicación con especies reactivas requiere términos correctores.

La aplicación de los modelos receptores requiere datos cuantitativos sobre concentraciones de contaminantes atmosféricos, buen conocimiento de los procesos que allí ocurren, buen dominio de la naturaleza química de las emisiones de las fuentes, y competencia en el uso de herramientas computacionales.

El buen desarrollo del modelo se basa en el cumplimiento del balance de masa para cada especie. Tanto las concentraciones como los perfiles resultantes deben ser no-negativos para tener sentido físico y las concentraciones de las componentes en las muestras y en los perfiles de las fuentes deben ser igual o menor a la concentración de entrada de dicha componente. En la distribución de fuentes, es importante tener la capacidad de poder distinguir entre un evento único con un perfil único y un episodio que se produce debido a la mayor contribución de una fuente ya considerada.

Estudio preliminar de la zona de interés

Perfiles de fuentes

Los perfiles químicos de las fuentes locales son de suma importancia en los estudios de la distribución de fuentes. Para una correcta interpretación y uso de estos modelos debe incluirse en el estudio, la caracterización de las fuentes más relevantes, ya sea experimental, de estudios previos, u obtenida de repositorios. La US-EPA ofrece un repositorio

de perfiles químicos SPECIATE (37). Se puede utilizar las estaciones de monitoreo orientadas a fuentes para caracterizar perfiles, siempre y cuando se consideren períodos de tiempo donde se demuestra la no influencia de otras fuentes. (35)

Selección de especies

Las especies químicas a incluir en el análisis deben seleccionarse de acuerdo con los objetivos del estudio, las características del sitio y las fuentes esperadas, teniendo en cuenta los recursos humanos, técnicos y financieros disponibles. (35)

A partir de las especies consideradas trazadoras o marcadoras de las fuentes, el usuario es capaz de caracterizar los perfiles obtenidos. La elección de estas especies dependerá de los contaminantes estudiados y los procesos de las fuentes existentes en el área de estudio.

Modelos disponibles

El PCA (*Principal Component Analysis*), el PMF (*Positive Matrix Factorization*) y el CMB (*Chemical Mass Balance*) constituyen tres de los modelos receptores de mayor uso y difusión (3). Los últimos dos desarrollados por la US-EPA y disponibles en el sitio web de la agencia (<https://www3.epa.gov/scram001/receptorindex.htm>). Estas técnicas necesitan diferentes grados de conocimiento sobre el número de fuentes en un sitio dado así como de los perfiles de origen. El CMB requiere de una base de datos de perfiles químicos para lograr distribuir correctamente las concentraciones medidas mediante un balance de masas, mientras que PMF genera internamente los perfiles de fuentes a partir de los datos ambientales.

Según estudios, se determinó que PMF y CMB son similares en cuanto a la correlación de la mayoría de las fuentes, las magnitudes de sus contribuciones y los perfiles obtenidos en los sitios receptores (36).

CMB

Basado en un método de mínimos cuadrados de varianza efectiva (EVLS) (37), la versión CMBv8.2 del software desarrollado por la US-EPA se encuentra disponible para Windows, es uno de varios modelos que se ha aplicado a problemas de calidad del aire durante las últimas dos décadas. Las soluciones de mínimos cuadrados ponderados resuelven el sistema descrito por un balance de masa entre la concentración ambiental de cada especie química y una suma lineal de productos entre perfiles de fuentes y sus contribuciones.

Como datos de entrada requiere los perfiles específicos de las fuentes potencialmente contribuyentes, idealmente experimentales, y los datos ambientales (concentraciones y sus incertidumbres) correspondientes de muestras analizadas recogidas en un solo sitio receptor. Su resolución se realiza mediante un modelo estadístico lineal, por lo que requiere un número de muestras relativamente pequeño, de tamaño inferior a 25 muestras por punto de medición.

Esta herramienta es útil en aplicaciones en las que los modelos de pluma gaussiana de estado estacionario son inadecuados, permitiendo confirmar o ajustar los inventarios de emisiones. (38)

Análisis multivariado

La técnica multivariante en modelos de receptores se aplica en diversas ciencias como la ecología, la quimiometría, la geología y la teledetección. En el campo de la calidad del aire busca solucionar el problema de la mezcla lineal general para las especies químicas conservadoras, es decir, aquellas que no sufren reacciones en la atmósfera pudiendo representarse mediante el principio del balance de masas.

Los métodos multivariantes están basados en múltiples regresiones lineales usando el principio de una regresión lineal simple. Estos métodos tienen la ventaja de traer más información para influir en un resultado específico. Permiten al usuario tener en cuenta la relación continua entre varias variables, lo cual es imprescindible en estudios donde el control total es imposible. El principio es buscar un borde en el cual la contribución de una fuente es despreciable.

El foco del análisis multivariado está en las relaciones entre variables y no en factores individuales aislados. Como ventajas, se pueden destacar la interpretación en gran medida de la solución del análisis y de los datos de entrada mediante la visualización. Además, permite analizar simultáneamente más datos, proporcionando una mayor potencia estadística. Los modelos de regresión pueden dar mayor comprensión de la relación entre las variables.

El uso de estos métodos requiere un estudio previo de la zona de interés, siendo mayores los esfuerzos en conseguir un número de muestras altos cuando existe poca información. Si bien no se especifica un número mínimo de muestras, la estabilidad de sus soluciones aumenta con la cantidad de las mismas.

Algunos autores consideran que la restricción de la no-negatividad conlleva a pérdida de información, y piensan que este fenómeno debería ser analizado.

PCA

Este método está basado en la reducción de la información mediante la técnica estadística de análisis de componentes principales (38). No se cuenta con un software específico para su resolución pero está presente en programas comerciales de estadística como SPSS o en librerías libres como R y Python. El PCA busca la proyección de datos en términos de mínimos cuadrados, convirtiendo un conjunto de observaciones de variables correlacionadas entre sí en un conjunto de valores de variables sin correlación lineal. Éstas se conocen como las componentes principales y su número no puede ser mayor a la cantidad de variables involucradas. La lectura de los resultados requiere de un conocimiento del área de estudio, debido a que no se aplica la restricción de la no-negatividad.

Como se trata de un método multivariado se requiere de un elevado número de muestras por sitio receptor cuyos datos de entrada son las concentraciones correspondientes a las muestras analizadas.

PMF

Este método está basado en un análisis de factores mediante el algoritmo robusto de mínimos cuadrados (38). El software PMFv5.0 desarrollado por la US-EPA se encuentra disponible para Windows 7.0 y 8.0, para procesadores no menores a 2GHz y 1GB de memoria.

Análogamente al PCA, se requiere de un elevado número de muestras por sitio receptor. Los datos de entrada del software son las concentraciones de las especies identificadas y sus respectivas incertidumbres. Si no se cuenta con este último dato, el software los estima mediante una ecuación cuyo parámetro principal es el límite de detección de cada sustancia. (40)

Su desventaja radica en la restricción de la no-negatividad de los perfiles, pudiendo producir pérdida de información y/o la capacidad de análisis.

Comparación entre los modelos

Actualmente, en la gestión para la calidad del aire se considera que la herramienta más utilizada es el CMB siempre y cuando se cuente con un conocimiento detallado de las fuentes y perfiles de emisiones. En cambio, PCA y PMF son los más utilizados cuando se tiene un conocimiento cualitativo inicial de las fuentes presentes en el área de estudio pero poco conocimiento cuantitativo de las fuentes y sus emisiones. En consecuencia, CMB es más sensible al número de fuentes, mientras que PMF y PCA no se ven afectados. (36,39)

A continuación se presentan las ventajas y desventajas por método:

Tabla 3: Ventajas y desventajas para el CMB, PCA y PMF

Modelo receptor	Ventajas	Desventajas
CMB	<ul style="list-style-type: none">• Software distribuido gratuitamente por US-EPA.• La identificación de las fuentes y sus contribuciones tienen sentido físico.	<ul style="list-style-type: none">• Requiere perfiles de fuentes experimentalmente determinados localmente.• Incapacidad para determinar fuentes desconocidas.• Incapacidad para la distribución de aerosoles secundarios debido a que está preparado para analizar partículas primarias de las emisiones. Las especies secundarias se deben determinar por estequiometría.• Requiere tanto concentraciones especializadas, sus incertidumbres y los perfiles de emisión.• Su ejecución es relativamente lenta.
PCA	<ul style="list-style-type: none">• La identificación de las fuentes es relativamente rápida, no así las contribuciones de las fuentes.• No requiere de un software específico• Bajo requerimiento, solo necesita datos de las	<ul style="list-style-type: none">• La interpretación de las fuentes puede ser relativamente subjetiva. El usuario dilucida la naturaleza de cada fuente (factor) basándose en las especies trazadoras, las cuales pueden presentarse en más de un tipo.• Incapacidad para separar claramente fuentes proporcionales.• Los perfiles obtenidos pueden no te-

	concentraciones especializadas.	ner sentido físico, es decir, ser negativos.
PMF	<ul style="list-style-type: none"> • La identificación de las fuentes y su contribución es relativamente rápida. • Software distribuido gratuitamente por US-EPA • Capacidad de genera perfiles de fuentes internos. • Necesita datos de las concentraciones especializadas y sus incertidumbres. 	<ul style="list-style-type: none"> • La interpretación de las fuentes puede ser relativamente subjetiva. El usuario dilucida la naturaleza de cada fuente basándose en las especies trazadoras, las cuales pueden presentarse en más de un tipo. • Incapacidad para separar claramente fuentes proporcionales.

Tabla 4: Datos de entrada para CMB, PMF y PCA

	CMB	PMF	PCA
DATOS DE ENTRADA			
Concentraciones de las especies	X	X	X
Incertidumbres de las especies	X	X	-
Perfiles de emisión de las fuentes	-	-	-
Número de muestras por sitio	<25	~ 50	~ 50
Interpretación	objetiva	subjetiva	Subjetiva
Software específico	US-EPA	US-EPA	Comercial
Tiempo de ejecución	lento	rápido	rápido

En el análisis de diferentes literaturas, provenientes tanto del ámbito académico como de la gestión, puede encontrarse diversas aplicaciones de los que han sido mencionados software y escenarios de estudios. Algunos ejemplos se presentan en Chen et al (41), Jeong et al (42) y Barrera López (43).

Bibliografía

1. U.S.EPA. Air Quality Models. Disponible en: <https://www3.epa.gov/scram001/aqmindex.htm>, accedido en marzo 2017.
2. Dirección General de Calidad y Evaluación Ambiental y Medio Natural-MAPAMA. *Análisis de herramientas de evaluación de la difusión y comportamiento* de agentes químicos en el marco de la normativa de responsabilidad medioambiental. España. Disponible en: http://www.mapama.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/responsabilidad-mediambiental/Herramientas_de_evaluacion_de_difusion_y_comportamiento_de_agentes_químicos_tcm7-270598.pdf, accedido en marzo 2017
3. Zannetti, P. 1990. *Air pollution modeling: theories, computational methods, and available software*. Southampton: Computational Mechanics.
4. Hernández-Garcés A., Jáuregui-Haza U., González J.A., Casares-Long J.J., Saavedra-Vázquez S., Guzmán-Martínez F., Torres-Valle A. Lagrangian atmospheric dispersion model CALPUFF applications. *Ciencias de la Tierra y el Espacio*. 2016, 17 (1): 32-44, ISSN 1729-3790.
5. Jacobson, M.Z. (2005). *Fundamentals of Atmospheric Modeling*. 2nd Edition. U.S.A.: Cambridge University Press.
6. Castro, M.; Gonzalez, R. y Portela A. Parametrización de la capa límite atmosférica en los modelos numéricos de pronóstico meteorológico. *Física de la Tierra*, núm. 3. 103-138. Ed. Univ. Compl. Madrid, 1991.
7. Hernández-Garcés, A., Jáuregui-Haza, U., Souto-González, J. A., Casares-Long, J. J., Saavedra-Rodríguez, S., Guzmán-Martínez, F., Torres Valle, A. (2015). Estado actual de los modelos de dispersión atmosférica y sus aplicaciones. *UCE Ciencia. Revista de postgrado*.
8. Turner, D.B. *Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates*, Environmental Protection Agency, Office of Air Programs, Research Triangle Park, North Carolina, 1970.
9. Martin D.O (1976) Comment On "The Change of Concentration Standard Deviations with Distance", *Journal of the Air Pollution Control Association*, 26:2, 145-147
10. Briggs, Gary A. 1973. *Diffusion estimation for small emissions: preliminary draft*. Oak Ridge, TN: Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory.
11. Hanna, Steven R., Gary A. Briggs, Rayford P. Hosker, United States. Dept. of Energy. Office of Energy Research and United States. Dept. of Energy. Office of Health and Environmental Research. 1982. *Handbook on atmospheric diffusion: prepared for the Office of Health and Environmental Research, Office of Energy Research, U.S. Department of Energy*. [Oak Ridge, TN]: Technical Information Center, U.S. Dept. of Energy.
12. Jones, R.; Lehr, W.; Simecek-Beatty, D.; Michael Reynolds, R. 2013. ALOHA[®] (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) 5.4.4: Technical Documentation. U. S. Dept. of Commerce, NOAA Technical Memorandum NOS OR&R 43. Seattle, WA: Emergency Response Division, NOAA. 96 pp.

13. Bachi, F.; Scarabino, A.; Giacomini, P. (2011) Introducción a CFD I: Uso práctico de FLUENT.
14. Dandrieux A, Dimbour JP, Dusserre G. (2006) J. Loss Prev. in Proc. Industries; 19: 683–689.
15. Beychok M. Fundamentals of stack gas dispersion. 3rd Ed. Irvine, CA, 1994.
16. Bird RB, Stewart WE, Lightfoot EN. (2002) Transport Phenomena. John Wiley & Sons.
17. Tominaga Y., Stathopoulos T. (2013). Atmospheric Environment; 79: 716-730
18. Blocken B, Tominaga Y., Stathopoulos T. (2013). Building and Environment; 64: 225–230
19. Capelli., L.; Sironi, S.; Del Rosso, R.; Guillot, JM. (2013). Atmospheric Environment; 79: 731-743.
20. Sanchez EY., Colman Lerner JE., Porta A., Jacovkis PM. (2013). Atm. Environment; 79: 486-494.
21. Sanchez E. Y., Colman Lerner J. E., Porta A. A, Jacovkis P. M. (2013). Atm. Environ.; 64: 47-55
22. Xiea, Z.T.; Haydenb, P.; Wood C.R. (2013) Atmospheric Environment; 71: 64-74
23. Labovský, J; Jelemenský L. (2011) Verification of CFD pollution dispersion modelling based on experimental data. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 24: 166-177
24. Yang Y. and Shao Y. (2008) Numerical simulations of flow and pollution dispersion in urban atmospheric boundary layers. Environmental Modelling & Software 23:) 906-921.
25. Brown G. and Fletcher D. (2005) CFD Prediction of odour dispersion and plume visibility for alumina refinery calciner stacks. Process Safety and Environmental Protection, 83(B3): 231–241
26. Chu, A.; Kwok, R.; Yu K. (2005) Study of pollution dispersion in urban areas using Computational Fluid Dynamics (CFD) and Geographic Information System (GIS). Environmental Modelling & Software 20: 273–277.
27. Solazzo, S.; Vardoulakis, S.; Cai X. (2011) A novel methodology for interpreting air quality measurements from urban streets using CFD modelling. Atmospheric Environment 45: 5230-5239.
28. Murillo, C.; Munoz F.; Dufaud O.; Perrin L. (2013) Dust explosions: CFD modeling as a tool to characterize the relevant parameters of the dust dispersion. Chemical Engineering Science 104: 103–116.
29. Dixon, C. (2012) Gas dispersion with openfoam. Major Hazards Management Centre of Expertise. Copyright of Shell Research.
30. CIEMAT. Modelización de la contaminación atmosférica. Disponible en: <http://mca-retemca.ciemat.es/MCAportal/portal.do?IDM=52&NM=3>, accedido marzo 2017
31. U.S.EPA. AP-42: Compilation of Air Emission Factors. Disponible en: <https://www.epa.gov/air-emissions-factors-and-quantification/ap-42-compilation-air-emission-factors>, accedido en abril 2017.
32. Garcia F. (2015) Implementación experimental del sistema de modelado para la calidad del aire en Argentina WRF-CHIMERE-EDGAR. Unidad Emergencias Ambientales y CAEARTE-CONAE

33. Sousan, S.; Kumar, N.; Spak, S.; Beranek-Collins, A.; Carmichael, G.; Stanier, C. Use of surface measurements and MODIS aerosol optical depth for improved model-based PM_{2.5} prediction in the United States. Annual American Association for Aerosol Research Conference, Minneapolis, MN, October 26-30, 2009.
34. US-EPA. Receptor Modelling. <https://www.3.epa.gov/scram002/receptorindex.htm>. Accedido Marzo, 2017.
35. Belis C.A., Larsen B.R., Amato F., Haddad I.E., Favez O., Harrison R.M., Hopke P.K., Nava S., Paatero P., Prévôt A., Quass U., Vecchi R. and Viana M. (2014). European Guide on Air Pollution Source Apportionment with Receptor Models, JRC reference reports.
36. Viana M., Pandolfi M., Minguillón M.C., Querol X., Alastuey A., Monfort E. and Celades I. (2007). Inter-comparison of receptor models for PM source apportionment: Case study in an industrial area. *Atmospheric Environment*. 42 .2008. 3820–3832.
37. US-EPA, 1999. SPECIATE: EPA's repository of total organic compound and particulate matter speciated profiles for a variety of sources for use in source apportionment studies. U.S. Environmental Protection Agency OAQPS, Research Triangle Park, NC, 1999. <https://www.epa.gov/air-emissions-modeling/speciate-documentation>. Accedido Abril, 2017.
38. US-EPA, 1987. Protocol for applying and validating the CMB model (ed. Office for Air Quality Planning and Standards).
39. • or• evi• , D., Petrovi• , S., Reli• , D., & Mihajlidi-Zeli• , A. (2013). Applying receptor models UNMIX and PMF on real data set of elements in PM for sources evaluation of the sea coastal side region (Southeast Adriatic Sea). *Atmospheric Measurement Techniques Discussions*, 6(3), 4941-4969.
40. Paatero, P., Tapper, U., 1994. Positive matrix factorization: a non-negative factor model with optimal utilization of error estimates of data values. *Environmetrics* 5, 111–126.
41. Chen, L. W. A., Watson, J. G., Chow, J. C., DuBois, D. W., & Herschberger, L. (2011). PM_{2.5} source apportionment: reconciling receptor models for US nonurban and urban long-term networks. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 61(11), 1204-1217.
42. Jeong, C. H., McGuire, M. L., Herod, D., Dann, T., Dabek-Zlotorzynska, E., Wang, D., & Evans, G. (2011). Receptor model based identification of PM 2.5 sources in Canadian cities. *Atmospheric Pollution Research*, 2(2), 158-171.
43. Barrera López, V. A. (2015). Caracterización elemental de pm 15 y pm 2.5 para la identificación de fuentes contaminantes en la ZMCM. Tesis de Maestro en Ingeniería (Ambiental). Universidad Nacional Autónoma de México.