

DISPERSION DE CONTAMINANTES EMITIDOS DESDE SUPERFICIE EN UNA
CAPA LIMITE ATMOSFERICA ESTRATIFICADA NEUTRALMENTE

Ana G. Ulke y Nicolás A. Mazzeo (*)

Departamento de Meteorología

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Universidad de Buenos Aires

Buenos Aires, Argentina

RESUMEN

El proceso de la contaminación atmosférica puede ser resumido en tres etapas principales: emisión-transporte y difusión de contaminantes-contacto con receptores.

Un modelo de difusión atmosférica permite relacionar la concentración de los contaminantes en el aire con su intensidad de emisión.

En este trabajo se presenta un modelo de advección-difusión de contaminantes emitidos desde superficie en una capa límite neutralmente estratificada, resuelto mediante métodos numéricos.

El perfil vertical del viento en la capa es obtenido a partir de la aplicación de la hipótesis del transporte-gradiente y de una forma funcional de la difusividad turbulenta hallada experimentalmente. El modelo incluye esas expresiones, y sus resultados son comparados satisfactoriamente con datos observacionales y con los obtenidos mediante otros procedimientos.

Asimismo, se obtienen valores de parámetros utilizados en modelos operativos de difusión atmosférica.

ABSTRACT

Air pollution process may be summarized into three main steps: emission-atmospheric transport and diffusion-receptors.

An atmospheric diffusion model relates air pollution concentration with emission rates.

In this paper an advection-diffusion model for ground level emissions and in neutral stratified atmospheric boundary layer conditions is solved by numerical techniques.

The wind profile in the atmospheric boundary layer is obtained from the gradient-transfer hypothesis combining with a diffusion coefficient empirical profile. These profiles are included in the model. The results are in reasonable agreement with observational data and with other models.

Furthermore, several parameters used in operational atmospheric diffusion models are obtained.

(*) Miembro de la Carrera del Investigador Científico del CONICET

INTRODUCCION

Los contaminantes ingresan a la atmósfera desde diversas fuentes. Luego de un período inicial en el que las condiciones en que se realiza la emisión son importantes, son transportados por el viento y dispersados por la turbulencia. En algunos casos, los gases y aerosoles se transforman químicamente y son removidos por la absorción en superficies sólidas y líquidas y por la precipitación. Sin embargo, cuando la masa de contaminantes ingresada a la atmósfera es mayor que la removida, surgen los problemas de contaminación del aire.

Sus efectos pueden ser principales e inmediatos (seres humanos, animales y plantas), secundarios y retardados (aumento de la acidez del suelo o lagos) o terciarios (cambios climáticos).

Para el control de la contaminación, la estrategia principal es la reducción de las emisiones.

El método básico utilizado en la predicción de la concentración de contaminantes en el aire consiste en emplear modelos de dispersión atmosférica que transforman datos de emisión en distribución espacial y/o temporal de concentración. Además de los valores de emisión, dichos modelos requieren de datos meteorológicos y topográficos.

La mayoría de las investigaciones destinadas a desarrollar modelos de difusión atmosférica utiliza la ecuación semiempírica de difusión-advención. Excepto en condiciones muy especiales, las soluciones analíticas de esta ecuación no son generalmente obtenibles, debiendo resolverse mediante diferencias finitas.

En este trabajo, se analiza el caso de una emisión continua de contaminantes cerca de la superficie en una capa límite atmosférica neutralmente estratificada, se resuelve numéricamente la expresión correspondiente y los resultados son comparados con algunos modelos analíticos y datos experimentales. Se obtienen parámetros generalmente utilizados en fórmulas prácticas de difusión atmosférica.

EL MODELO DE DIFUSION ATMOSFERICA

Se utiliza la siguiente ecuación bidimensional semiempírica de difusión-advención (Pasquill, 1974):

$$\bar{u}(z) \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(z) \frac{\partial C}{\partial z} \right] \quad (1)$$

donde x es la dirección horizontal, z la dirección vertical, $\bar{u}(z)$ la velocidad media del viento, C la concentración lateral integrada y $K(z)$ el coeficiente de difusividad turbulenta.

Las condiciones de contorno son $C=0$ para $x \rightarrow \infty$, $z \rightarrow \infty$ y $z < 0$.

El coeficiente de difusividad turbulenta $K(z)$ se supone igual al de difusión vertical para la cantidad de movimiento $K_m(z)$.

Se supone que la velocidad de fricción (u_{*o}) y K_m varían con la altura dentro de la capa límite atmosférica de acuerdo a las siguientes relaciones empíricas, correspondientes a una extensión de la teoría de la semejanza de Monin-Obukhov (1954) a la capa límite atmosférica (Yokoyama y otros, 1977, 1979):

$$u_* = u_{*o} \left(1 - \frac{z}{h}\right) \quad (2)$$

$$K_m(z) = k u_{*o} h \left(\frac{z}{h}\right) \left(1 - \frac{z}{h}\right) \quad (3)$$

donde el subíndice "o" indica el valor en superficie, k es la constante de von Kármán, y h es el espesor de la capa límite.

Considerando las expresiones (2) y (3) junto con la de la hipótesis del transporte-gradiente, se obtiene el perfil vertical del viento en la capa:

$$\bar{u}(z) = \frac{u_{*o}}{k} \left[\ln \frac{z}{z_0} - \frac{(z-z_0)}{h} \right] \quad (4)$$

donde z_0 es la longitud de rugosidad.

La ecuación (4) tiende al perfil logarítmico del viento cuando $z \rightarrow z_0$. En la Figura 1 se presentan los valores encontrados mediante (4) y el perfil logarítmico del viento, para diferentes rugosidades del terreno. Se observa que el apartamiento relativo entre ambos aumenta con la rugosidad, con un máximo del 2% alrededor de los 100 m de altura.

Asimismo, se efectúa la comparación entre el perfil de $K_m(z)$ dado por (3) y el válido en la capa de superficie en condiciones neutrales (Pasquill, 1974):

$$K_m(z) = k u_{*o} z \quad (5)$$

En la Figura 2 se observa que cerca de superficie el apartamiento relativo entre ambos es pequeño, (varía entre un 1% a los 10 m y un 11% a los 100m), aumentando considerablemente a mayores alturas. El perfil propuesto crece hasta alcanzar un máximo en la mitad de la capa y luego disminuye

simétricamente, hasta anularse en el tope.

RESOLUCION

Si j y n son los subíndices de los puntos de retículo en las direcciones z y x respectivamente, los términos de (1) se pueden expresar en diferencias finitas de la siguiente forma:

$$\bar{u}(z) \frac{\partial C}{\partial x} = U_j \frac{C_{n+1,j} - C_{n,j}}{x_{n+1} - x_n} \quad (6)$$

$$\frac{\partial [K(z) \frac{\partial C}{\partial z}]}{\partial z} = \frac{z K_j(z)^+ (C_{n+1,j+1} - C_{n+1,j})}{(z_{j+1} - z_j)(z_{j+1} - z_j)} - \frac{z K_j(z)^- (C_{n,j} - C_{n,j-1})}{(z_{j+1} - z_j)(z_j - z_{j-1})} \quad (7)$$

siendo $K_j(z)^+$ el valor de $K(z)$ en el punto $(z_{j+1} + z_j)/2$ y $K_j(z)^-$ es el valor de $K(z)$ en $(z_j + z_{j-1})/2$.

Sustituyendo en (1) y escribiendo la ecuación resultante en términos de $C_{n+1,j}$ y $C_{n,j}$, se obtiene:

$$c_j C_{n+1,j-1} + a_j C_{n+1,j} + b_j C_{n+1,j+1} = d_j C_{n,j} \quad (8)$$

$$(C_{n+1,-1} = 0 ; C_{n+1,N+1} = 0)$$

$$\text{con } c_j = \frac{-z K_j(z)^-}{(z_{j+1} - z_{j-1})(z_j - z_{j-1})} \quad b_j = \frac{-z K_j(z)^+}{(z_{j+1} - z_{j-1})(z_{j+1} - z_j)} \quad d_j = \frac{U_j}{x_{n+1} - x_n}$$

$$a_j = d_j - c_j - b_j$$

Para $0 \leq j \leq N$, la expresión (8) conduce a sistemas de ecuaciones algebraicas simultáneas con matrices tridiagonales que pueden ser resueltos mediante fórmulas de recurrencia (Van Buijtenen y otros, 1973).

Las condiciones de contorno toman las siguientes formas:

$$x=0 \begin{cases} C_j = 0 & z_j \neq H \\ C_j = 2Q/U_j (z_{j+1} - z_{j-1}) & z_j = H \end{cases}$$

H = altura de la fuente

$z = z_0$ $C_0 = C_1$ (no se considera depósito).

Con el objeto de obtener una mejor descripción de la difusión en los puntos cercanos a la fuente se utilizan incrementos espaciales variables en ambas direcciones.

En cuanto al recinto de resolución, fijada su extensión vertical, el cálculo

de la concentración se efectúa hasta una distancia horizontal en la cual la frontera superior no afecte la difusión en niveles bajos (Taylor, 1921; Wallington, 1968).

Mediante el esquema descrito, con las adecuadas condiciones de contorno y habiendo calculado previamente los perfiles verticales de viento y difusividad dados por (4) y (3) se obtiene el campo bidimensional de concentración.

El valor de la longitud de rugosidad (z_0), la velocidad de fricción (u_{*0}), la altura de la capa (h) y la intensidad de la fuente (Q) se obtienen en base a los datos provenientes del Proyecto Prairie Grass, (Barad (ed), 1958), con el fin de posibilitar la comparación de los resultados del modelo con los valores experimentales de este proyecto.

Considerando las rondas cercanas a la neutralidad, se obtiene $z_0 = 0,008$ m, con $k = 0,41$ (Wieringa, 1980) y con el perfil logarítmico del viento se calcula u_{*0} . Finalmente, se computa h en base a los datos de los radiosondeos. Los valores obtenidos son los siguientes:

Ronda Nº	u_{*0} [ms ⁻¹]	h [m]	Q [g s ⁻¹]
57	0,46	1660	101,5
22	0,51	350	48,4

RESULTADOS Y DISCUSION

En la Figura 3 se presenta el campo bidimensional de la concentración lateral integrada obtenido mediante el modelo para los valores de la ronda 57 y la comparación del mismo con el resultante de suponer que la expresión (5) y el perfil vertical logarítmico correspondientes a la capa de superficie son válidos en toda la capa límite atmosférica.

Se observa que no existen apartamientos significativos dentro de la capa de superficie y cerca de la fuente, pero a mayores alturas los valores de la concentración difieren en uno o varios órdenes de magnitud.

Asimismo, se estudia la variación de la concentración a nivel del suelo con la distancia a la fuente y se comparan los valores obtenidos con los datos experimentales y con los provenientes de las soluciones analíticas correspondientes al modelo exponencial general (Pasquill, 1974; Mazzeo y Ulke, 1984) y al modelo de la pluma gaussiana (Turner, 1969), (Fig. 4).

A corta distancia existe un ajuste satisfactorio entre los datos y los resultados numéricos, pero a mayores distancias el apartamiento aumenta, lo que podría deberse al efecto del depósito del trazador, no simulado en los modelos numérico y analíticos.

Los valores obtenidos difieren en promedio en un 25% respecto de los datos

experimentales y en un 23 y 20% de los modelos gaussiano y exponencial, respectivamente.

En la Figura 5 se muestran los perfiles verticales de la concentración relativa $C(z)/C(z_0)$ (con $z_0=0,5m$) a una distancia $x=100m$ de la fuente, calculados por el modelo y por la fórmula exponencial general para las rondas experimentales. Se observa que cerca del suelo los valores provenientes del modelo exponencial general son mayores que los de la simulación numérica, disminuyendo esta diferencia con la altura.

Por último, a partir de los valores provenientes del modelo se obtienen diferentes parámetros utilizados en el modelado operativo de la difusión atmosférica: el factor de forma del perfil vertical de los contaminantes (S), la altura media de los contaminantes (\bar{z}), el coeficiente vertical de difusión (σ_z) y la variación de ellos con la distancia a la fuente.

Suponiendo el modelo exponencial para la distribución vertical:

$$C(z) = C(z_0) \exp[-c(z-z_0)^2] \quad (9)$$

y aplicando logaritmos a ambos miembros, resulta:

$$\ln \left[\ln \frac{C(z)}{C(z_0)} \right] = \ln c + S \ln(z-z_0) \quad (10)$$

Con esta expresión, mediante un ajuste por cuadrados mínimos a los resultados numéricos se obtiene S .

En particular, si $x=100m$, es posible comparar el valor hallado con el correspondiente a los datos experimentales. El apartamiento resultante es del 4% y del 7% para las rondas 57 y 22 respectivamente.

La variación de S con la distancia a la fuente se observa en la Figura 6, en la que también se han graficado los valores hallados mediante otra metodología utilizada por Mazzeo y Venegas (1982a, 1984, 1985) y los experimentales.

Los resultados del modelo numérico y del analítico difieren, en promedio, en un 6% dentro del rango considerado ($3 \times 10^3 \leq x \leq 6 \times 10^4$).

Sin embargo, se debe mencionar que en el caso de los resultados numéricos se observa que S crece rápidamente cerca de la fuente hasta alcanzar un máximo entre los 150 y 200m y luego decae lentamente, comportamiento que no se había presentado en otros trabajos (Mazzeo y Venegas, 1982a, 1984, 1985). Asimismo, del estudio de los perfiles verticales de la concentración a distintas distancias de la fuente se pudo concluir que eso se debe a que en

los tramos iniciales los resultados del modelo se apartan de una distribución vertical exponencial, en especial en los niveles más alejados de la superficie y a medida que aumenta la distancia a la fuente los valores comienzan a aproximarse al exponencial general. Las diferencias medias relativas varían entre el 60% cerca de la fuente (25m) y el 15% a 100m de la misma.

El desplazamiento vertical medio de la nube de contaminantes y la desviación estandar vertical pueden definirse por las siguientes relaciones (Pasquill, 1974):

$$\bar{z} = \frac{\int_0^{\infty} z C dz}{\int_0^{\infty} C dz} \quad (11)$$

$$\sigma_z = \left[\frac{\int_0^{\infty} z^2 C dz}{\int_0^{\infty} C dz} \right]^{1/2} \quad (12)$$

A partir de los valores calculados de la concentración se pueden estimar cuantitativamente $\bar{z}(x)$ y $\sigma_z(x)$, resolviendo numéricamente las integrales de las expresiones (11) y (12).

Los resultados obtenidos se comparan con los que provienen de la hipótesis de la semejanza lagrangeana (Mazzeo y Venegas, 1982b). Además, si $x=100m$, es posible comparar con los valores experimentales (Mazzeo y Venegas, 1982b). En las Figuras 7 y 8 se presentan los valores mencionados.

En el caso de σ_z se ha graficado también la curva correspondiente a condiciones neutrales obtenida por Pasquill-Gifford (Turner, 1969).

Cerca de la fuente, los valores de \bar{z} y σ_z dados por el modelo son mayores que los analíticos, relación que se invierte a mayores distancias. Por otra parte, en los tramos finales, se tienen valores diferentes para las simulaciones de cada ronda experimental. Dicho apartamiento podría deberse a la distinta extensión vertical del recinto en ambos casos. Este aspecto será objeto de un posterior estudio.

Los valores de \bar{z}/z_0 calculados mediante el modelo analítico y las simulaciones numéricas de las rondas 57 y 22 difieren en un 8 y 12% respectivamente.

Para σ_z/z_0 la discrepancia es del 6 y 11%, mientras que de la comparación con la curva de Pasquill-Gifford surge un apartamiento medio del 7 y 5%.

En el caso de los valores de \bar{z}/z_0 en $x=100m$, existe un apartamiento de los resultados numéricos del 7% y 24% respecto de los datos, y del 0,5% y 16% de los analíticos para las rondas 57 y 22 respectivamente. En cuanto a σ_z/z_0 , se verifican, en el mismo orden, discrepancias del 3% y 20% y del 1% y 18% y

respecto a la curva de Pasquill-Gifford del 6% y 10%. Se debe notar que todas las comparaciones a $x=100m$ sólo representan apartamientos respecto de dos rondas experimentales y a una única distancia. Por lo tanto, sería necesario realizar otras verificaciones experimentales.

CONCLUSIONES

La aplicación de la resolución numérica de la ecuación bidimensional semiempírica de difusión-advección con perfiles verticales de la difusividad turbulenta y de la velocidad del viento obtenidos de datos experimentales y de la aplicación de la teoría K a una fuente puntual continua posibilita las siguientes conclusiones:

- los valores de la concentración de contaminantes a mayores alturas y distancias son afectados por las formas de \bar{u} y de K que se utilicen, ya sea las correspondientes a la capa límite o a la capa de superficie,
- la concentración de los contaminantes disminuye con la distancia de acuerdo con los datos observacionales, siendo la variación relativa media entre ambos del 25%,
- existe concordancia cualitativa con los modelos exponencial general y gaussiano,
- la variación de la concentración con la altura se aproxima a la predicha por el modelo exponencial general, para distancias mayores que 100m, sin embargo, cerca de la fuente existe una discrepancia entre ambos modelos,
- la altura media de los contaminantes y el coeficiente de dispersión vertical utilizado en el modelo gaussiano responden cualitativamente bien, y varían poco cuantitativamente respecto de los obtenidos por otras metodologías.

BIBLIOGRAFIA

- Barad (ed), 1958: Proyect Prairie Grass, a field program in diffusion, Geophys. Res. Paper, Vol. I y II.
- Mazzeo, N.A. y Ulke, A.G., 1984: Velocidad de transporte de contaminantes en la capa límite atmosférica, Pub. N° 16, Depto. de Meteorología, FCEyN, UBA.
- Mazzeo, N.A., y Venegas, L.E., 1982a: Distribución vertical de los contaminantes en la atmósfera, Meteorológica, Vol. XIV, N° 1 y 2.
- Mazzeo, N.A. y Venegas, L.E., 1982b: Hipótesis de la semejanza lagrangeana y difusión vertical de los contaminantes en la capa de superficie atmosférica, Meteorológica, Vol. XIII, N° 1.
- Mazzeo, N.A. y Venegas, L.E., 1984: El perfil vertical de la concentración de contaminantes en la atmósfera, Pub. N° 19, Depto. de Meteorología, FCEyN, UBA.
- Mazzeo, N.A. y Venegas, L.E., 1985: Variación horizontal de la distribución

- vertical de la concentración de contaminantes en la atmósfera, Pub. N° 28, Depto. de Meteorología, FCEyN, UBA.
- Monin, A.S. y Obukhov, A.M., 1954: Basic Laws of turbulent mixing in the ground layer of the atmosphere, Tr. Geofiz. Inst. Akad. Nauk., SSSR, 151.
- Pasquill, F., 1974: Atmospheric Diffusion, New York, John Wiley & Sons Inc.
- Taylor, G.I., 1921: Diffusion by continuous movements, Proc. London Math. Soc., Ser. 2, 20, 196.
- Turner, D.B., 1969: Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates, PHSP N° 999-A-26.
- Van Buijtenen, C.J.P., Holland, J. y Van Leeuwen, D., 1973: A numerical diffusion model for continuous releases, Boundary-Layer Met., 5.
- Wallington, C.E., 1968: Numerical solution of Atmospheric Diffusion equations, England, J. W. Arrowsmith Ltd.
- Wieringa, J., 1980: A revaluation of the Kansas mast influence on measurements of stress and cup anemometer overspeeding, Boundary-Layer Met., 18.
- Yokoyama, O., Gamo, M. y Yamamoto, S., 1977: On the Turbulence Quantities in the Neutral Atmospheric Boundary Layer, J. Met. Soc. of Japan, Vol. 55, N° 3.
- Yokoyama, O., Gamo, M. y Yamamoto, S., 1979: The Vertical Profiles of the Turbulence Quantities in the Atmospheric Boundary Layer, J. Met. Soc. of Japan, Vol. 57, N° 3.

$h=1000m$

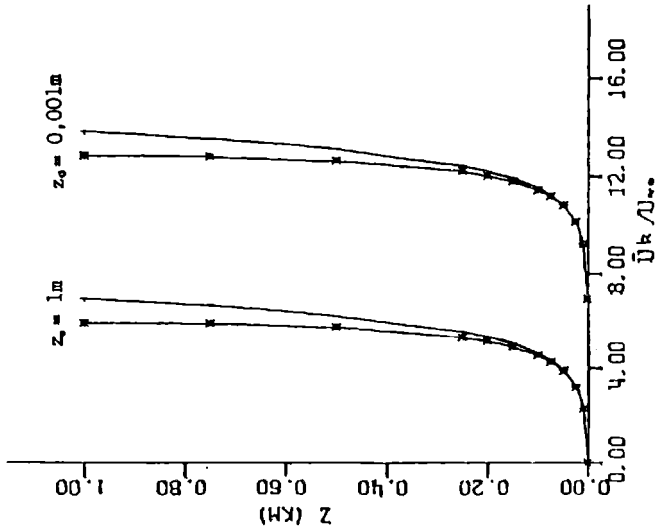


Figura 1. Perfiles verticales del viento

—■—■—
proposito
—x—x—
logaritmico

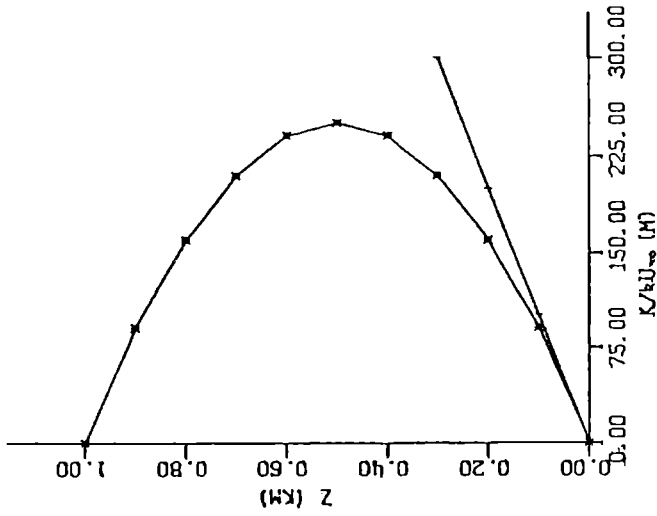


Figura 2. Perfiles verticales de la difusividad

turbulenta
—■—■—
proposito
—x—x—
logaritmico

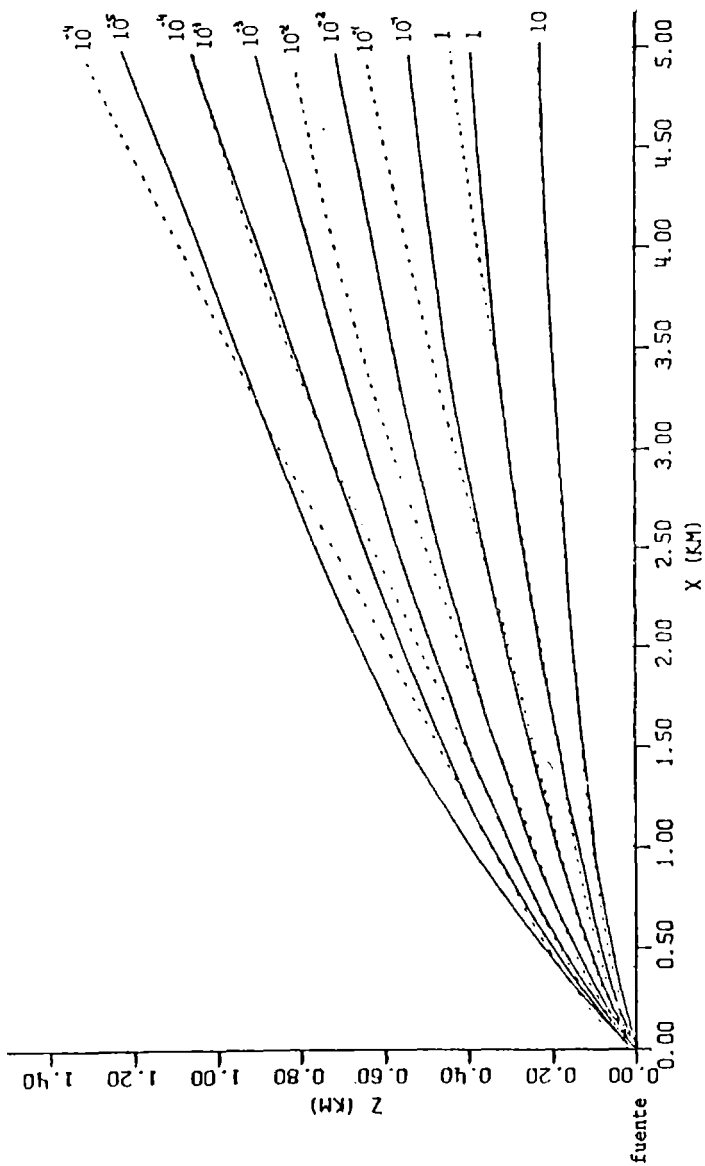


Figura 3. Isolíneas de concentración lateral integrada (mgm^{-2}) para condiciones de neutralidad atmosférica.
 ———— perfiles verticales $\bar{u}(z)$ y $K(z)$ propuestos
 - - - - - perfiles verticales $\bar{u}(z)$ y $K(z)$ capa de superficie

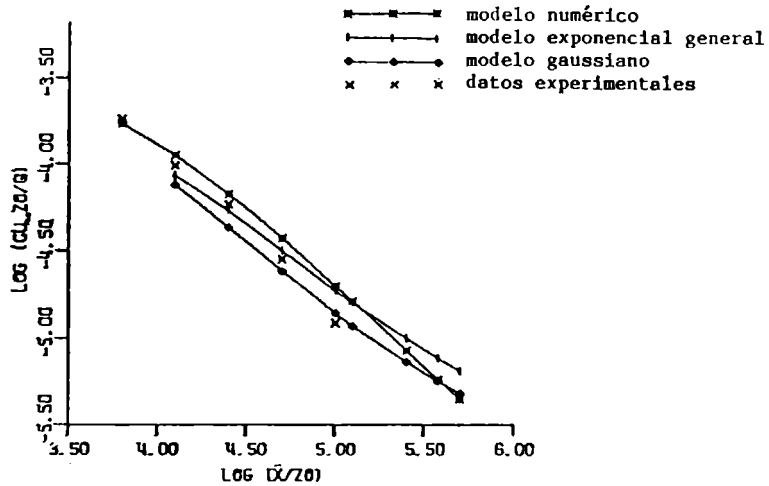
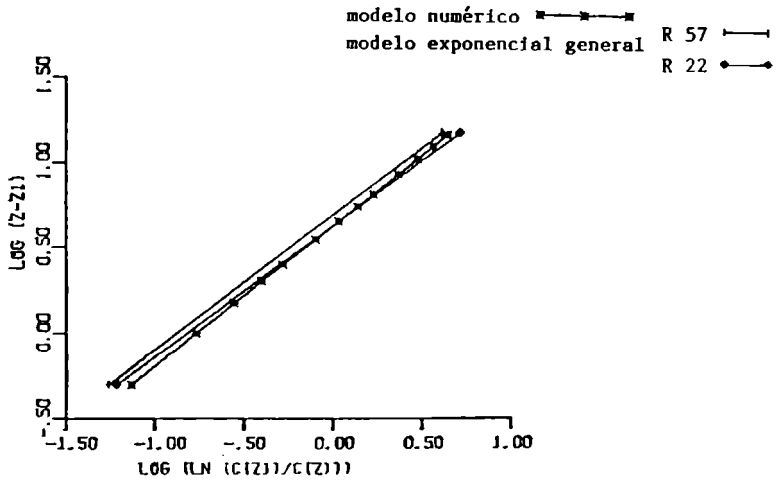


Figura 4. Variación de la concentración en superficie con la distancia en condiciones de neutralidad atmosférica.



$(z-z_0)$ [m]

Figura 5. Perfiles verticales de concentración a $x=100m$ de la fuente para condiciones neutrales.

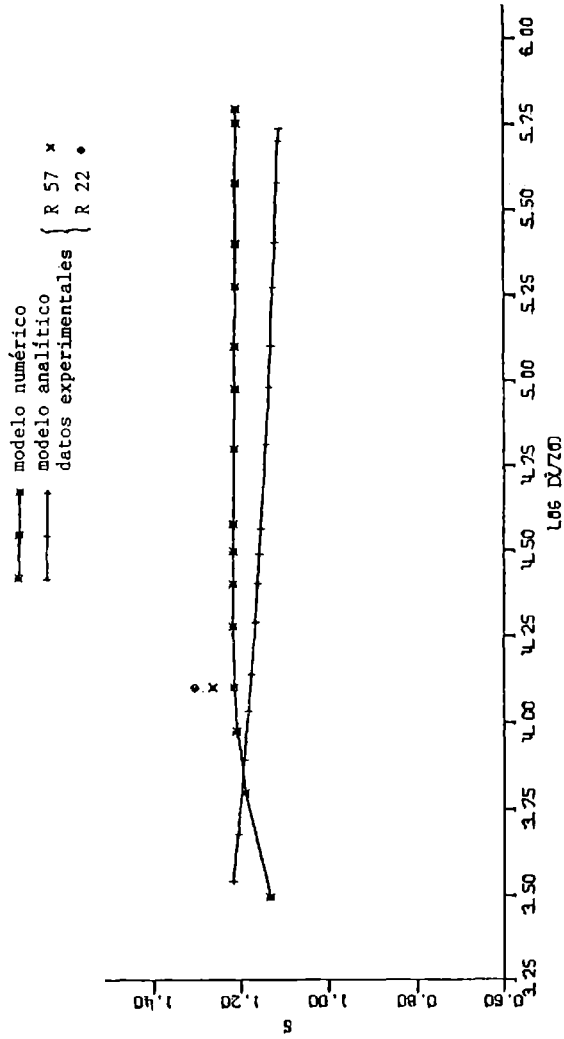


Figura 6. Variación de s con la distancia a la fuente en condiciones de neutralidad atmosférica.

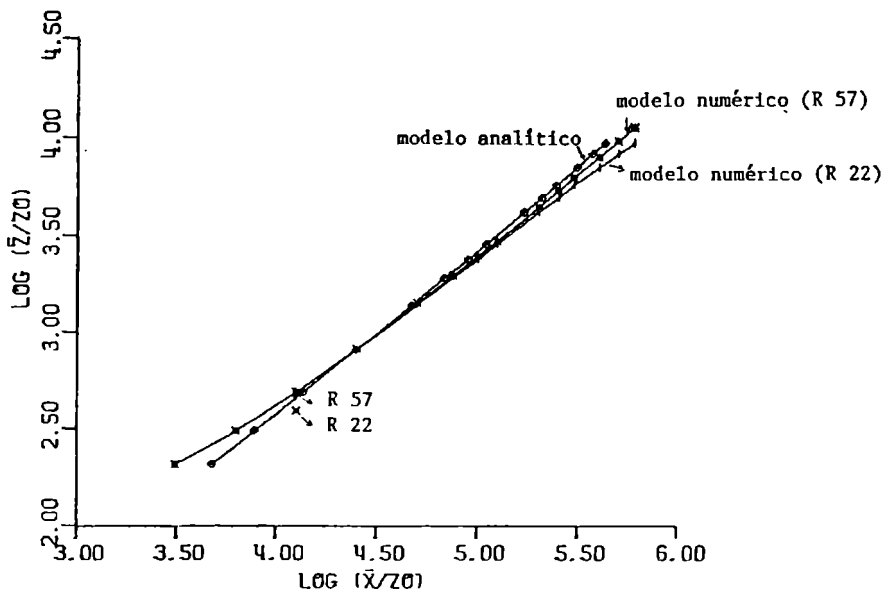


Figura 7. Variación de \bar{z}/z_0 con la distancia a la fuente en condiciones de neutralidad atmosférica.

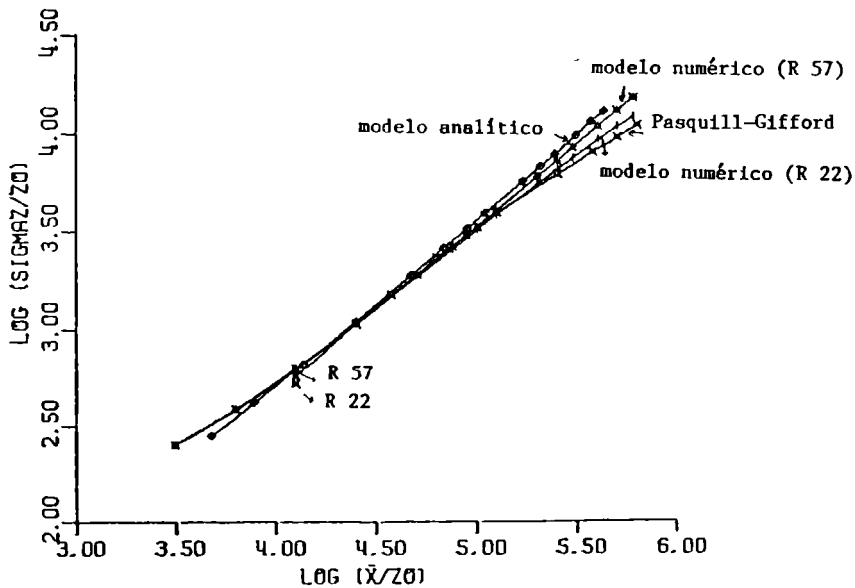


Figura 8. Variación de σ_z^2/z_0 con la distancia a la fuente en condiciones de neutralidad atmosférica.