

**SISTEMA DE EVALUACION DE LA
DISPERSION EPISODICA DE
CONTAMINANTES ATMOSFERICOS**

Anel Hernández Garces

**DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUÍMICA
DOCTORADO EN INGENIERÍA QUÍMICA Y AMBIENTAL
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERIA**

SANTIAGO DE COMPOSTELA

2016




D. ANEL HERNÁNDEZ GARCES, estudiante del Programa de Doctorado en Ingeniería Química y Ambiental de la Universidade de Santiago de Compostela,

EXPONE:

Que presenta esta memoria de investigación titulada “**Sistema de evaluación de la dispersión episódica de contaminantes atmosféricos**”, como Tesis Doctoral para optar al grado de Doctor en Ingeniería Química por la Universidade de Santiago de Compostela.

Santiago de Compostela, 2 de Enero de 2016

Anel Hernández Garces





D. JUAN JOSÉ CASARES LONG, Catedrático de Universidad, y D. JOSÉ ANTONIO SOUTO GONZÁLEZ, Profesor Contratado Doctor, ambos del Departamento de Ingeniería Química de la Universidade de Santiago de Compostela, y D. SANTIAGO SAAVEDRA VAZQUEZ, Doctor en Ingeniería Química,

INFORMAN:

Que la presente memoria titulada “**Sistema de evaluación de la dispersión episódica de contaminantes atmosféricos**”, que presenta D. Anel Hernández Garces para optar al grado de Doctor en Ingeniería Química por la Universidade de Santiago de Compostela, ha sido realizada bajo nuestra supervisión en el Departamento de Ingeniería Química de esta Universidad.

Santiago de Compostela, 2 de Enero de 2016

Catedr. Juan José Casares Long

Prof. José Antonio Souto González

Dr. Santiago Saavedra Vazquez



AGRADECIMIENTOS

A Juan Casares, por la confianza primera, por la oportunidad.

A Jose Antonio Souto, por ser el maestro, el ejemplo, el amigo; por brindarme la excelencia de su talento, por permitirme trabajar a su lado, por su tiempo, por su generosidad.

A Santiago Saavedra, por su rigor, por su exigencia.

A Eli, mi Eli, por su apoyo, por su escolta, por estar ahí, por Anelito.

A mi familia, por mantener el hogar.

A Ulises, Guzmán y Tony, por su complicidad.

A Ranses del INSMET, A Yolanda de Geocuba, A Leonor, Elieza y Fonseca de Cubaenergía, por su colaboración.

Al Guti y Victorero, a Yuniel y Mylene, por su cooperación en la búsqueda y descarga.

A toda la lista interminable de amigos que me dieron albergue en diversos rincones de Europa, por aliviar mi lejanía y soledad.

Al programa de becas para estancias predoctorales destinadas a docentes e investigadores de América Latina, Programa Banco Santander-USC, por su contribución.

Al Programa STEP del ICTP, por su aporte.

A la C.T. As Pontes, por el suministro de datos sobre su instalación y su entorno.

A todos ellos, muchas gracias.



INDICE

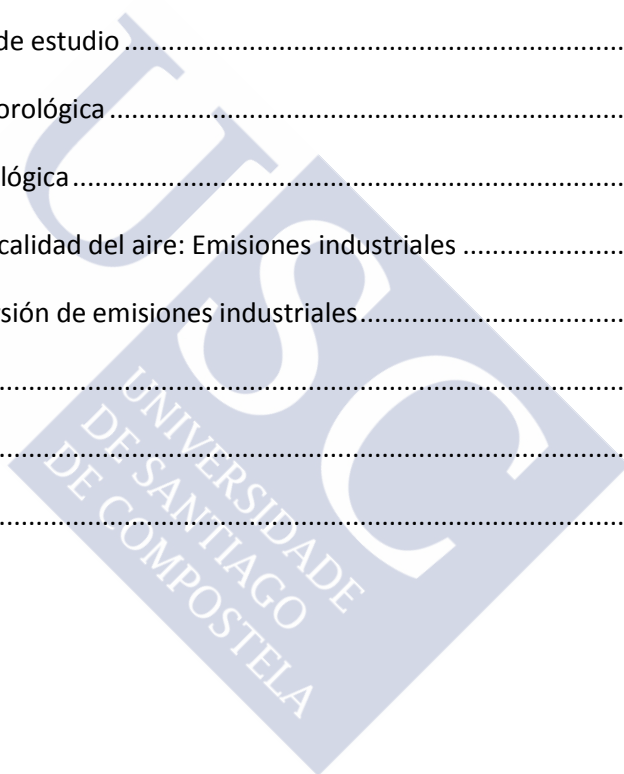
RESUMEN.....	1
SUMMARY	5
1 Introducción	9
1.1 Modelos matemáticos de calidad de aire	10
1.2 Modelos de dispersión atmosférica. Planteamiento general	13
1.2.1 Soluciones euleriana y lagrangiana; la aproximación gaussiana.....	13
1.3 La solución euleriana.....	14
1.4 Las aproximaciones lagrangianas	15
1.4.1 Modelo de puff.....	16
1.4.2 Modelos de partículas	17
1.5 Aplicaciones de modelos atmosféricos	19
1.5.1 Aplicaciones de modelos eulerianos	20
1.5.2 Aplicaciones de modelos lagrangianos.....	23
1.5.3 Aplicaciones del modelo CALPUFF	25
1.6 Modelos meteorológicos.....	27
1.6.1 Modelos de diagnóstico meteorológico.....	31
1.6.2 Modelos de predicción meteorológica.....	32
1.6.3 Aplicaciones del modelo CALMET	33
2 Modelo meteorológico CALMET.....	37
2.1 Primer paso.....	39
2.1.1 Efectos cinemáticos del terreno.....	39
2.1.2 Flujos en pendiente	40
2.1.3 Efectos de bloqueo	42
2.2 Segundo paso	42
2.2.1 Interpolación	42
2.2.1.1 Extrapolación vertical	44
2.2.2 Brisas costeras o de aguas interiores	45

2.2.3	Suavizamiento	45
2.2.3.1	Cálculo de las velocidades verticales.....	45
2.3	Minimización tridimensional de la divergencia.....	46
2.4	Acoplamiento de modelos de pronóstico	47
2.4.1	Factor de ponderación del terreno	49
2.5	Modelo micrometeorológico. Flujos superficiales de calor y de cantidad de movimiento	51
2.5.1	Capa límite atmosférica sobre tierra.....	52
2.5.2	Capa límite atmosférica sobre el agua	57
2.6	Campo tridimensional de temperaturas	57
2.6.1	Temperaturas sobre el agua.....	58
3	Modelo de dispersión atmosférica.....	59
3.1	La solución lagrangiana	59
3.2	La aproximación gaussiana.....	60
3.3	Modelo de dispersión atmosférica CALPUFF.....	63
3.4	Dispersión en modelos de puffs	64
3.4.1	Cálculo de la contribución de un puff circular simétrico a la concentración en un receptor .	66
3.4.2	Cálculo de la contribución de un puff deformado a la concentración en un receptor	69
3.4.3	Comparación de los modelos de puff deformado y puff circular simétrico: Modelo híbrido .	76
3.5	Coeficientes de dispersión gaussiana, σ_y y σ_z	77
3.5.1	Componentes derivadas de la turbulencia atmosférica.....	79
3.5.2	Flotabilidad - Dispersión inducida	88
3.5.3	Tamaño inicial del penacho	88
3.5.4	División del puff (cizalladura vertical del viento)	88
3.5.5	Enfoque P.D.F. para la capa límite convectiva.....	90
3.5.5.1	Parámetros del enfoque PDF para la velocidad vertical.....	91
3.5.5.2	Tratamiento de la fuente directa	92
3.5.5.3	Tratamiento fuente indirecta	93
3.5.5.4	Implementación del enfoque PDF en CALPUFF.....	95

3.5.6	Deformación vertical del Puff (convergencia horizontal).....	95
3.6	Flujo descendente tras obstáculos	97
3.6.1	Modelo de Huber-Snyder	98
3.6.2	Modelo de Schulman-Scire.....	100
3.7	Sobreelevación del penacho.....	101
3.7.1	Ecuaciones básicas de sobreelevación del penacho	101
3.7.2	Descenso inicial del penacho debido a su baja velocidad de salida.....	102
3.7.3	Penetración parcial del penacho en una inversión térmica	102
3.7.4	Flujo descendente tras obstáculos	104
3.7.5	Cizalla vertical del viento	105
3.8	Dispersión costera y sobre el agua	106
3.9	Efectos del terreno complejo	110
3.9.1	Algoritmo de terreno complejo para parámetros de escala submalla (CTSG).....	111
3.9.1.1	Modelizado por regiones.....	111
3.9.1.2	Representación de la elevación del terreno.....	115
3.9.1.3	Capa superior.....	117
3.9.1.4	Capa Inferior	122
3.9.2	Ajustes simples de la dispersión debida al terreno	124
3.9.2.1	Ajuste ISC.....	125
3.9.2.2	Ajuste por coeficiente de trayectoria del penacho	125
3.9.2.3	Ajuste CALPUFF basado en la deformación.....	126
3.9.2.3.1	Influencia del terreno sobre el impacto	126
3.9.2.3.2	Cálculo de la deformación	129
3.10	Deposición	133
3.10.1	Deposición seca	133
3.10.2	Modelo de resistencias.....	134
3.10.3	Resistencias para gases	138
3.10.3.1	Resistencia atmosférica de la capa superficial (C).....	138

3.10.3.2	Resistencia de la capa de deposición (D).....	139
3.10.3.3	Resistencia de la cubierta vegetal (E).....	139
3.10.3.4	Resistencia mesofílica.....	141
3.10.3.5	Resistencia cuticular.....	141
3.10.3.6	Resistencia tierra/agua.....	142
3.11	Dispersión del puff durante períodos de calmas.....	142
4	La Central Térmica As Pontes y su entorno.....	145
4.1	Orografía del entorno.....	146
4.2	Climatología.....	147
4.3	C.T. As Pontes: Medidas de emisión, meteorológicas y de calidad del aire.....	151
4.3.1	Sistemas de Control de Emisiones.....	151
4.3.2	Red de Vigilancia de la Calidad del Aire.....	153
4.3.3	Estación Meteorológica Central.....	155
4.3.4	Unidad Central de Adquisición de Datos y Gestión de la Información.....	157
4.3.5	Datos meteorológicos en el entorno del foco emisor.....	157
4.3.5.1	Estaciones meteorológicas en superficie adicionales.....	157
4.3.5.2	Radiosondeos meteorológicos operacionales.....	159
5	Sistema CALMET/CALPUFF para validación.....	161
5.1	Validación de modelos atmosféricos.....	162
5.2	Dominio de simulación.....	162
5.3	Configuración de modelos.....	165
5.4	Modelo CALMET para validación.....	165
5.4.1	Simulaciones meteorológicas con el modelo WRF.....	169
5.4.2	Medidas meteorológicas.....	170
5.5	Modelo CALPUFF para validación.....	171
6	Períodos de validación de los modelos CALMET y CALPUFF.....	175
7	Local-scale meteorological model validation: WRF and CALMET.....	177
7.1	Validation methodology of the CALMET and WRF meteorological models.....	177

7.2	Meteorological measurements	179
7.3	Results	180
7.3.1	Surface validation	180
7.3.2	Upper-air validation.....	183
8	Atmospheric dispersion model validation: CALPUFF	187
8.1	Validation methodology of the CALPUFF model	188
8.2	Air quality sites for validation.....	189
8.3	Results	190
9	Aplicación del sistema CALMET/CALPUFF en el Caribe.....	193
9.1	Dominio y período de estudio.....	193
9.2	Modelización meteorológica.....	194
9.3	Validación meteorológica.....	197
9.4	Modelización de la calidad del aire: Emisiones industriales	201
9.5	Análisis de la dispersión de emisiones industriales.....	203
	CONCLUSIONES	209
	CONCLUSIONS	213
	BIBLIOGRAFIA	215





RESUMEN

Frente a la contaminación de otros medios (aguas, suelos), en la era preindustrial se había considerado a la atmósfera como un medio de depuración de contaminantes suficientemente eficaz como para que, salvo en contadas excepciones, las emisiones de contaminantes a la atmósfera resultasen inocuas para el medio y las personas; reduciéndose a un problema de molestias (olores, visibilidad), sin mayores consecuencias. Esta consideración errónea agudizó el problema de la contaminación atmosférica con la introducción de la máquina de vapor, origen de la revolución industrial, para cuyo funcionamiento comenzaron a quemarse grandes cantidades de carbón; a lo que hay que sumar el uso de otros combustibles fósiles en la industria y transporte, el manejo y emisión de sustancias procedentes de la industria química, y de otras actividades humanas. A partir de ese momento, la preocupación por la calidad del aire que respiramos ha ido pareja al reconocimiento de las incertidumbres en los procesos atmosféricos que afectan a los contaminantes, de carácter altamente no lineal y que experimentan grandes variaciones en función de la dinámica meteorológica, ya de por sí compleja. Estos procesos complejos, sin embargo, son los que permiten la depuración de los contaminantes en la atmósfera y, en consecuencia, la minoración de su impacto; por lo que se ha reconocido la necesidad de conocerlos y, cuando era posible, cuantificarlos.

Así que, el conocimiento de los procesos atmosféricos relacionados con la contaminación atmosférica partió inicialmente del análisis de datos experimentales de campo, de una parte, y de modelos teóricos de los procesos atmosféricos y su posible relación con la dispersión física de los contaminantes. La simplicidad de las soluciones analíticas de dichos modelos teóricos, sin embargo, dificultaba su aplicación a problemas reales.

Con el desarrollo de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) y la generalización de la computación avanzada, muchos de estos modelos teóricos atmosféricos pudieron ser resueltos con mucha mayor precisión mediante técnicas numéricas, lo que junto con el acceso y manejo de grandes bases de datos ambientales ha posibilitado su aplicación a problemas reales. Al mismo tiempo, las técnicas de medida en la atmósfera han ido mejorando y automatizándose, favoreciendo su implantación sistemática, en especial, en los países desarrollados. Como consecuencia, el seguimiento y control de la contaminación atmosférica ha experimentado una considerable evolución en los últimos 40 años, tanto en lo que se refiere a las políticas de control como en las tecnologías desarrolladas y aplicadas en el mismo. En particular, los modelos atmosféricos han alcanzado un nivel de desarrollo que, aún con las incertidumbres asociadas al sistema altamente no lineal que es la atmósfera, son actualmente herramientas fundamentales en el estudio, cuantificación e, incluso, resolución de problemas de contaminación atmosférica.

Dentro de los modelos atmosféricos, los modelos de calidad del aire tratan de cuantificar los procesos que afectan a los contaminantes en la atmósfera y, en consecuencia, pretenden relacionar las emisiones de estos contaminantes con sus concentraciones en la atmósfera, y en las superficies en que se depositan. Al mismo tiempo, estos procesos están altamente condicionados por la dinámica atmosférica, lo que obliga a determinar también con la mayor precisión posible las condiciones meteorológicas y su evolución temporal; los modelos meteorológicos basados en las ecuaciones de conservación de las propiedades físicas de la atmósfera se han mostrado altamente capaces de proporcionar esa información. Hasta el punto de que, si bien ambos tipos de modelos, meteorológicos y de calidad del aire, precisan de algunos datos experimentales para su aplicación (especialmente, en cuanto a la dependencia de la atmósfera respecto de sus condiciones iniciales), la robustez física de sus ecuaciones dinámicas y su aplicación amplia y sistemática en muchos entornos los ha convertido en soluciones matemáticas altamente generalizadas en el cálculo de los procesos atmosféricos.

Al respecto de su resolución matemática, es importante reseñar que muchos de estos modelos requieren su formulación en forma diferencial, dada la alta variabilidad espacial y temporal de la atmósfera terrestre. A fin de obtener una representación matemática realista de los procesos atmosféricos. La resolución matemática de sus ecuaciones diferenciales se ha visto altamente favorecida por el gran desarrollo de los sistemas de computación.

Aún a pesar del gran desarrollo que han experimentado los modelos atmosféricos, la gran variabilidad de la atmósfera terrestre y de los distintos entornos del planeta hace necesaria la validación de cualquier modelo atmosférico, antes de su aplicación al estudio de un problema de contaminación atmosférica. Lo que requiere la disponibilidad de datos atmosféricos representativos del problema a estudiar en cada entorno concreto. Así, los modelos meteorológicos requieren ser contrastados frente a medidas meteorológicas, habitualmente disponibles en superficie; pero, teniendo en cuenta que la dispersión de los contaminantes atmosféricos se produce sobre todo a cierta altura, también es necesario comparar los resultados de los modelos meteorológicos con medidas en altura. En cuanto a los modelos de calidad del aire también precisan, en último término, contrastar sus resultados con las concentraciones de contaminantes medidas en el aire que respiramos, es decir, a nivel del suelo: la inmisión.

De entre los modelos de calidad del aire, aquellos que centran sus mayores esfuerzos (en cuanto a sus soluciones matemáticas) en la mezcla o dilución de los contaminantes en la atmósfera, son los modelos de dispersión atmosférica. Si bien estos modelos pueden considerar las transformaciones químicas que experimentan los contaminantes en la atmósfera, sus soluciones están más enfocadas al ya complejo problema de la dispersión física, dependiente de la turbulencia atmosférica; por lo que resultan especialmente adecuados cuando el contaminante estudiado puede considerarse prácticamente inerte a la escala espacial/temporal de interés en el

entorno de estudio. Para la resolución matemática de los modelos de calidad del aire, dos son las aproximaciones habitualmente consideradas: los modelos Eulerianos, basados en la resolución de sus ecuaciones diferenciales sobre una malla espacial fija mediante técnicas de diferencias finitas; y los modelos Lagrangianos, que representan la dispersión de los contaminantes mediante una función matemática del proceso de desplazamiento y mezcla de los mismos, por lo que su resolución no está ligada a una malla espacial concreta.

Si bien los modelos Eulerianos son los únicos capaces de resolver también complejos mecanismos de transformación química de los contaminantes atmosféricos, los modelos Lagrangianos alcanzan mejores resultados en el cálculo de la dispersión física de los contaminantes, especialmente cuando el número de focos emisores es muy reducido, de tal forma que los gradientes de concentraciones de contaminantes son grandes y altamente variables. Esto hace a los modelos Lagrangianos especialmente adecuados para el estudio de la dispersión de contaminantes desde un foco emisor singular, especialmente si pueden considerarse inertes en la escala espacial considerada.

Como se ha indicado previamente, todo modelo de calidad del aire requiere de su validación frente a datos experimentales en el entorno a estudiar o, cuando menos, en entornos similares. Se han llevado a cabo multitud de experimentos de validación de modelos de calidad del aire, muchos de ellos basados en la realización de campañas de medida específicas con gran profusión de sensores meteorológicos y de contaminación atmosférica; y partiendo de focos emisores controlados, que introducen artificialmente un trazador pasivo (inerte) durante el experimento. Si bien estos experimentos tienen un gran valor para la validación y generalización de los modelos atmosféricos, presentan limitaciones en cuanto a las condiciones de emisión, en particular, su altura y el volumen de gases emitidos. Estas limitaciones pueden condicionar la validez de sus resultados cuando se pretenden aplicar los modelos a focos emisores reales, con una altura y caudal de emisión mucho mayores. Así, también se han llevado a cabo en ocasiones experimentos de validación de modelos de calidad del aire basados en datos experimentales de focos emisores singulares, habitualmente industriales, que pudiesen considerarse como únicos en el entorno dado que su aportación de algún contaminante atmosférico es mucho mayor que la de cualquier otro foco emisor que lo rodease. Lo que facilita establecer una relación directa en la emisión de ese contaminante y su inmisión medida. Por el contrario, estos experimentos presentan la limitación del número y variedad de medidas experimentales disponibles.

Precisamente, este trabajo de investigación se ha enfocado a la validación de modelos atmosféricos frente a medidas experimentales sobre dos entornos distintos con focos emisores reales (en Galicia y en la Isla de Cuba), en uno de los cuales se disponía de las condiciones adecuadas para establecer una relación directa entre las emisiones de un foco industrial y la inmisión medida en su entorno. Como modelos atmosféricos se han elegido el modelo de

pronóstico meteorológico WRF-ARW, y el modelo meteorológico de diagnóstico CALMET, en ocasiones aplicado al primero; validándose ambos modelos frente a las medidas meteorológicas experimentales disponibles, en superficie y en altura. Los resultados del modelo CALMET han proporcionado las condiciones meteorológicas al modelo Lagrangiano de dispersión atmosférica regulatorio CALPUFF, que también ha sido validado frente a medidas de inmisión de un contaminante singular, considerado a efectos prácticos como un trazador pasivo.

La importancia de los resultados que se pretende alcanzar en este trabajo se centra en la extensión de este tipo de modelos a distintos entornos y condiciones reales de dispersión atmosférica, sobre focos emisores reales, lo que demostrará la validez general de este tipo de modelos, siempre que se apliquen de la manera adecuada a cada entorno. Teniendo en cuenta que los modelos de calidad del aire constituyen ya hoy en día herramientas de carácter regulatorio tan válidas como las medidas experimentales que, de manera sistemática, también se llevan a cabo para el seguimiento y control de la contaminación atmosférica.



SUMMARY

Air has been considered in preindustrial times a sink for pollutants emitted both from the soil and water sources and was regarded as an effective means of transformation of pollutants so that, with few exceptions, emissions of pollutants into the atmosphere were considered harmless for the environment and people; reduced to a local problem of inconvenience occasionally (odour, visibility), without any other consequence. This erroneous consideration exacerbated the problem of air pollution with the introduction of the steam engine, the origin of the industrial revolution, that initially operated burning large quantities of coal; with eventually the addition of other fossil fuels in industry, transport, and domestic use, handling and releasing pollutants from industry in general, and the power industry in particular, and other human activities. Since that moment, concerns about the quality of air we breathe has gone hand in hand with the recognition of the uncertainties associated with the atmospheric processes involving air pollution, with a highly nonlinear character and extremely variable depending on the meteorological dynamics, already complex. These complex processes, however, are those that enable the removal of pollutants in the atmosphere and, therefore, the reduction of the impact caused; so it becomes obvious the need to analyze and quantify.

So, knowledge of atmospheric processes related to air pollution initially came from the analysis of experimental data field on the one hand, and theoretical models of atmospheric processes and their possible relationship to the physical dispersion of pollutants. The simplicity of the analytical solutions of these theoretical models, however, hindered its application to real problems.

With the development of information technology and communications (ICT) and generalization of advanced computing, many of these atmospheric theoretical models could be solved with much greater accuracy using numerical techniques, which together with the access and management of large environmental databases has enabled its application to real problems. At the same time, measurement techniques in the atmosphere have been improved and automated, promoting their systematic implementation, especially in developed countries. As a result, monitoring and control of air pollution has evolved considerably in the last 40 years, both regarding control policies and technologies developed. In particular, atmospheric models have achieved a level of development that, even with the uncertainties associated with a highly nonlinear system as the atmosphere, are now essential tools in the study, quantification and even the solution of air pollution problems.

Within atmospheric models, air quality models try to quantify processes that affect pollutants in the atmosphere and therefore intended to relate these polluting emissions with concentrations in the atmosphere and on surfaces where they are deposited. At the same time, these processes are highly conditioned by atmospheric dynamics, which generates the need to determinate as accurately as possible the weather and its evolution; meteorological models based on the equations of conservation of the physical properties of the atmosphere have proven highly capable

of providing that information. To the extent that, although both types of models, weather and air quality, require some experimental data for application (especially in terms of the atmosphere dependence on initial conditions), physical robustness of its dynamic equations and extensive and systematic application in many environments, has developed highly generalized mathematical solutions in the calculation of atmospheric processes.

Concerning its mathematical resolution, it is important to note that many of these models require their formulation in differential form, given the high spatial and temporal variability of the atmosphere, in order to obtain a realistic mathematical representation of atmospheric processes. The mathematical resolution of the differential equations has been highly favoured by more powerful computer systems.

In spite of the great development experienced for atmospheric models, the great variability of the atmosphere and the different environments on the planet requires the validation of any atmospheric model before its application to the study of air pollution problem. This requires the availability of atmospheric data representative of the problem to be studied in each particular environment. Thus, the meteorological models need to be validated against meteorological measurements, usually available in surface; but, given the dispersion of air pollutants produced at singular point, it is also needed to compare the results of meteorological models with aloft measurements. As for air quality models it is also required, ultimately, to compare results with measures of pollutant concentrations in the air we breathe: ground level concentration (glc).

From the air quality models, those that focus their greatest efforts (in terms of their mathematical solutions) in the mixing or dilution of pollutants in the atmosphere are the atmospheric dispersion models. While these models may consider chemical transformations of pollutants in the atmosphere, their solutions are more focused to the already complex problem of physical dispersion, under atmospheric turbulence; making them particularly suitable when the pollutant studied can be considered practically inert to the spatial/temporal scales of interest in the environment studio. For solving mathematical models of air quality, there are two approaches usually considered: the Eulerian models, based on the resolution of their differential equations on a spatial mesh fixed by finite difference techniques; and the Lagrangian models, representing the dispersion of pollutants by a mathematical function of the displacement process and mixing thereof, so their resolution is not tied to a particular spatial grid.

While Eulerian models are also the only ones capable of solving complex mechanisms of chemical transformation of air pollutants, the Lagrangian models achieve better results in the calculation of physical dispersion of pollutants, especially when the number of emission sources is very small, such that gradients of contaminant concentrations are large and highly variable. This makes Lagrangian models particularly suitable for studying the dispersion of pollutants from a single emission source, especially if they can be considered inert in the spatial scale considered.

As previously indicated, all air quality models require validation against experimental data to study the environment, or at least, in similar environments. They have been conducted in many occasions to validate air quality models, many of them based on specific campaigns measured with great profusion of meteorological sensors and air pollution; and based on controlled emission sources, which artificially introduced a passive tracer (inert) during the experiment. While these experiments are valuable for validation and generalization of atmospheric models, they have limitations as to the terms of emission, in particular, its height and volume of gases emitted. These limitations may determinate the validity of their results when they intend to apply the models to actual emission sources, with a height and flow much larger issue. So, it have also been carried out occasionally validation experiments modeling air quality based on experimental data of unique, usually industrial emission sources, which could be considered as unique in the environment as its contribution of any air pollutant is much higher than any other sources; making it easy to establish a direct relationship in the pollutant emission and glc. On the contrary, these experiments have the limitation of the number and variety of experimental measurements available.

Indeed, this research has focused on validation of atmospheric models against experimental measurements on two different environments with real emission sources (in Galicia and Cuba), one of which had about the right conditions for establishing a direct link between emissions from an industrial source and the glc in its environment. As atmospheric models have been selected a weather forecast model WRF-ARW, and a diagnostic meteorological model CALMET sometimes applied to WRF; validating both models against experimental meteorological measurements available at surface level and height. The CALMET model results have provided the weather conditions to the Lagrangian atmospheric regulatory dispersion model CALPUFF, which has also been validated against measurements of glc for a single pollutant considered, for practical purposes, as a passive tracer.

The importance of the results achieved in this work confirms the extension of this type of models for different environments and real conditions of atmospheric dispersion on actual emission sources, and demonstrates the general validity of these models, always when they are applied taking in consideration the singularities of each environment. Considering that air quality models are already today a regulatory tool as valid as experimental measurements that, in a systematic way, are also carried out to monitor and control air pollution.



1 Introducción

En los últimos 100 años ha crecido la preocupación por el cuidado medioambiental; y dentro de sus múltiples tópicos se destaca el de la calidad del aire. Para esta última, la modelización del comportamiento de la contaminación atmosférica constituye una de las herramientas más importantes para analizar y prevenir su deterioro.

En la actualidad, la modelización de la contaminación atmosférica es imprescindible para desarrollar diferentes tareas que tienen como objetivo garantizar la buena calidad del aire, y así impedir que alguna alteración pueda dañar a las personas o al medio ambiente (Zannetti, 1990).

La modelización de la calidad del aire juega un papel importante en el establecimiento de legislaciones para el control de las emisiones de contaminantes atmosféricos, determinando los valores máximos permitidos para los caudales y concentraciones de emisión; así como en la evaluación de estrategias de control de emisiones; en la selección de localizaciones de futuros focos emisores, con el fin de minimizar el impacto sobre el entorno; en el establecimiento de planes de intervención inmediata en el control de episodios de elevada contaminación en determinadas regiones: sistemas de alerta y reducción de emisiones en tiempo real; la identificación de responsabilidades en los niveles de contaminación existentes en cada momento, mediante la evaluación de la interrelación directa entre el emisor y el receptor, entre otros.

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 sensores automáticos, con la resolución espacial que pueden proporcionar algunos modelos, resultaría extremadamente costosa de instalar y mantener de forma permanente en correcto funcionamiento. Igualmente viabilizan la identificación de errores en la medición de la contaminación, ya sea por fallos en el sistema de medida o por una localización incorrecta del instrumento; esto último implica que los modelos de calidad del aire son una herramienta muy útil en la definición de redes óptimas de seguimiento de la contaminación atmosférica.

En el caso de focos de emisión industriales, los modelos de calidad de aire posibilitan la definición de la altura de emisión necesaria para garantizar que sus emisiones no afecten a la región circundante.

Estos modelos también brindan capacidad de predicción del comportamiento de contaminantes atmosféricos, para la prevención de alarmas de contaminación, dado que un modelo bien calibrado y suficientemente validado puede representar adecuadamente la realidad, su dinámica y sus respuestas a diferentes perturbaciones en el futuro.

En definitiva, una parte importante del estudio de la contaminación atmosférica requiere el desarrollo y aplicación de modelos capaces de describir y predecir el comportamiento de los contaminantes atmosféricos.

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. 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 debidas a la actividad humana, y las concentraciones de estas sustancias, u otras que se originan a partir de ellas, en la atmósfera.

Esta relación, aclara Zannetti (1990), se ha tratado de determinar por dos vías:

- *Modelos físicos*, son aquellos que a partir de experimentos de laboratorio a pequeña escala, tratan de obtener representaciones globales o parciales del fenómeno. Como ejemplo podemos indicar los trabajos en túneles de viento (Willis y Deardorff, 1981; Ohba y col., 1990; Snyder, 1990; White y Kavanagh, 1991) o en tanques de agua (Ohba y col., 1991; Bara y col., 1992). Su principal aportación práctica se ha limitado, por el momento, a la obtención de una mejor comprensión de algunos fenómenos que caracterizan el flujo de un penacho en la atmósfera, como son la sobreelevación inicial o la difusión interna; de hecho, sus resultados se aplican a menudo en los modelos matemáticos.
- *Modelos matemáticos*, están constituidos por un conjunto de ecuaciones algebraicas y/o diferenciales, que describen los aspectos físicos y químicos del problema. En este campo ya se han obtenido un gran número de modelos aplicables a experimentos reales, aunque con limitaciones en sus resultados, que con frecuencia requieren una calibración específica sobre cada problema considerado.

1.1 Modelos matemáticos de calidad de aire

Los modelos matemáticos Zannetti (1990) los clasifica, dependiendo de la naturaleza de su planteamiento básico, en:

- *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).
- *Estadísticos*, son los basados en las relaciones estadísticas entre los datos de emisión, meteorología y concentración de contaminantes medidas en diferentes localizaciones del entorno considerado.

Hay otras clasificaciones que tienen en cuenta otros criterios; y es posible que un mismo modelo pueda estar incluido en varias de las categorías.

Si se considera el 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 difusión atmosférica, estos tratan de definir la distribución de una sustancia extraña que se emite a la atmósfera basándose en la representación matemática de los diferentes fenómenos de transporte y transformación que puede experimentar dicha sustancia.

Teniendo en cuenta el alcance espacial, se pueden clasificar los modelos en:

- Regionales o nacionales, son utilizados para el estudio de transporte y difusión de contaminantes a grandes distancias (de 100 a 1500 km). Habitualmente, utilizan datos meteorológicos históricos.
- Locales, evalúan la convección y difusión 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 atmosférica. Dentro de estos se distinguen:
 - De corto alcance, de 1 a 15 km, suelen resultar más sencillos puesto que permiten un tratamiento cuasi-mecanicista del problema. La difusión no es muy acusada, fundamentalmente porque para que exista inmisión apreciable el foco emisor ha de estar situado casi a nivel del suelo.
 - De medio alcance, tratan de realizar una estimación de la inmisión a distancias entre 15 y 100 km del foco emisor. Por su alcance medio requieren una descripción meteorológica lo más aproximada posible de la zona de aplicación e incluso, para una respuesta con la suficiente anticipación, una predicción meteorológica local a corto plazo.

Según la resolución temporal; es decir, el ámbito temporal de aplicación:

- Climatológicos, utilizan patrones meteorológicos históricos para obtener medias de inmisión estacionales o anuales.
- A mediano plazo, se establecen para períodos de tiempo de unos días a unas semanas. Pueden combinar datos históricos con predicciones meteorológicas con el fin de obtener una descripción aproximada de la atmósfera 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 una descripción exhaustiva del episodio meteorológico 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 un compromiso entre la complejidad del modelo y su tiempo de respuesta, por lo que su descripción es ligeramente diferente de los anteriores. Generalmente, son modelos locales.

Según el método de simulación:

- Modelos probabilísticos, de correlación o estadísticos, se basan en la utilización de datos históricos de meteorología, emisión e inmisión para establecer, mediante técnicas estadísticas diversas, la inmisión probablemente alcanzable con unas condiciones meteorológicas y de emisión. 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.
- Modelos de difusión atmosférica, propiamente dichos, se trata, de una manera aproximada, de resolver las ecuaciones de difusión que gobiernan el movimiento de los contaminantes en el flujo turbulento atmosférico. Y según el método de solución se subdividen en:
 - Modelos de caja, son los más sencillos, 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 el penacho emitido sigue una distribución gaussiana perpendicular al movimiento convectivo principal. De este modo se pretende simular la difusión de contaminantes en la dirección no dominante. Sin embargo, no han conseguido una descripción real del fenómeno de difusión, aunque permiten obtener resultados aproximados muy rápidamente.
 - Modelos de diferencias finitas, tratan de resolver la ecuación de difusión atmosférica utilizando diferentes planteamientos físicos:
 - Eulerianos, utilizan un sistema de referencia absoluto y tratan de calcular la difusión 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 considera dos; otro relativo, referido a un punto representativo de la traslación media del penacho, para obtener una mejor dispersión del penacho debida a la turbulencia.

De Castro (2001) destaca que existe un gran número y variedad de alternativas aplicadas en la representación del flujo de contaminantes en la atmósfera, lo que nos lleva a pensar que no nos encontramos ante un único problema, sino ante una combinación de fenómenos, y que la elección de una u otra solución depende fundamentalmente de las escalas de espacio y tiempo exigidas, que condicionan la consideración de estos fenómenos. Por ejemplo, las aproximaciones habitualmente consideradas para el tratamiento de la turbulencia implican distintos grados de isotropía del medio. Estas aproximaciones no representan exactamente el comportamiento de la atmósfera real, y su desviación depende de las condiciones meteorológicas (estabilidad

atmosférica), del tamaño de la región considerada y de la escala de tiempo de predicción y de resolución temporal exigidas.

1.2 Modelos de dispersión atmosférica. Planteamiento general

Los modelos de dispersión atmosférica son una de las soluciones más extendidas al problema del comportamiento de los contaminantes en la atmósfera. Su planteamiento general sigue el esquema de un modelo de procesos o fenómenos, es decir, consisten en aplicar un modelo matemático a cada fenómeno que experimentan los contaminantes en la atmósfera, y sumar las contribuciones de todos los modelos de proceso en una ecuación de balance o conservación para cada propiedad considerada.

El balance de contaminante en la atmósfera aplicable de forma general es:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(u_j c_i) = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j \partial x_j} + R_i(c_1, \dots, c_N, T) + S(\vec{x}, t) \quad , \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (\text{Ec 1.1})$$

donde el primer término representa la variación de concentración de contaminante i con el tiempo; el segundo, la entrada neta de contaminante asociada al flujo atmosférico (advección y turbulencia); el tercero, la variación de la concentración de contaminante debido a la difusión molecular; el cuarto, la velocidad de desaparición del contaminante por reacción química; y el quinto, la aparición de contaminante en el entorno considerado, proveniente de focos emisores en el propio entorno.

Sin embargo, la resolución analítica de estas ecuaciones no es posible, puesto que no se conoce la forma de la función $u_j c_i$ ni de la difusión turbulenta asociada. Además, hay que tener en cuenta que es necesario resolver las N ecuaciones diferenciales simultáneamente, para tener en cuenta la influencia de la concentración de un contaminante c_j en la velocidad de reacción R_i de los otros contaminantes y , por tanto, en su balance. Por ello existen dos aproximaciones generales a la resolución de este problema, la vía euleriana y la vía lagrangiana; y muchas soluciones particulares, especialmente para la vía lagrangiana.

1.2.1 Soluciones euleriana y lagrangiana; la aproximación gaussiana.

Para poder resolver cualquier problema de transporte de contaminantes en la atmósfera hemos de establecer las correspondientes ecuaciones de balance de materia. La forma en que esta resolución se lleve a cabo puede ser bastante diferente; y así, clásicamente, se han planteado dos soluciones genéricas al problema.

Una de ellas es la solución euleriana, según la cual se establece un sistema de referencia fijo (habitualmente, centrado en el foco emisor), y se tratan de resolver las ecuaciones de balance de materia, para cada contaminante, con diferentes grados de aproximación. La otra es la solución lagrangiana, que utiliza dos sistemas de coordenadas, uno fijo (el foco emisor) para el movimiento

general de los contaminantes (advección) y otro móvil, que se desplaza con el penacho, para la descripción de la difusión turbulenta en el seno del penacho.

En ambas soluciones, se asume el conocimiento de las variables que definen el flujo atmosférico y condicionan la dispersión de los contaminantes.

Las dos soluciones son alternativas válidas al mismo problema y, además, se puede demostrar (Seinfeld, 2012) que aplicando las mismas aproximaciones en las dos vías se obtiene la misma solución analítica: la ecuación de difusión gaussiana. Sin embargo, al margen de estas aproximaciones, sus resultados y sus posibilidades de aplicación son muy diferentes.

1.3 La solución euleriana.

Si tenemos N componentes inertes de un fluido, la concentración de cada uno de ellos, que debe verificar el balance de materia sobre un elemento de volumen, se expresa según la ecuación de difusión atmosférica:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_j \frac{\partial c}{\partial x_j} = v_c \frac{\partial^2 c}{\partial x_j^2} + S_c \quad (\text{Ec 1.2})$$

donde v_c es la difusividad molecular del componente en el aire, S_c es el término de la entrada del contaminante desde los focos emisores, c es la concentración de contaminante en el instante t y la posición x_j , cuya dispersión está afectada por el flujo u_j .

Para la solución completa del problema, en el medio atmosférico, además han de verificarse las ecuaciones de Navier-Stokes, de conservación de la energía, la ecuación de continuidad (balance de materia global) y la ecuación de estado de los gases ideales (Seinfeld, 2012). Esto supone que, para resolver el problema sería preciso que se cumplieran simultáneamente los balances de materia, energía y cantidad de movimiento. Sin embargo, y situando el problema al fenómeno que nos ocupa, dado que las especies contaminantes siempre se encuentran en la atmósfera en concentraciones muy pequeñas (del orden de ppm), se asume que su presencia no afecta al flujo atmosférico ni a los balances de materia global o de energía. De acuerdo con esto, velocidad y temperatura del aire se consideran independientes de las concentraciones de las diferentes especies, y la ecuación de difusión atmosférica puede resolverse independientemente.

La resolución de esta ecuación para cada contaminante, sobre un sistema de referencia fijo, es la base de los modelos eulerianos. Los modelos lagrangianos consideran un sistema de referencia móvil y obtienen soluciones propias bajo esa premisa.

De la aplicación de un balance de componente a cada especie contaminante, en un volumen infinitesimal, se desarrolla la ecuación de difusión atmosférica (Ec 1.1).

En régimen turbulento, las velocidades son funciones aleatorias del espacio y el tiempo; habitualmente, esto se expresa desglosando cada variable en una componente media u_j y su fluctuación u'_j ; la ecuación que define la distribución de cada contaminante será, por tanto,

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\bar{u}_j + u'_j)c_i] = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j \partial x_j} + R_i(c_1, \dots, c_N) + S_i(\bar{x}, t) \quad (\text{Ec 1.3})$$

Esta expresión proviene de la aplicación de la teoría de la perturbación turbulenta, según la cual $\bar{u}'_j = 0$.

Dado que u'_j son variables aleatorias, c_i también será una variable aleatoria y, por tanto, no es posible la determinación biunívoca de c_i en función del espacio y el tiempo. El planteamiento del problema cambia radicalmente, puesto que hemos de definir un nuevo objetivo: ahora, trataremos de definir la probabilidad de que la concentración de una especie i se encuentre dentro de un intervalo, para un lugar y un momento determinados; pero esta función de densidad de probabilidad no puede ser definida fácilmente para un proceso de alto grado de aleatoriedad como es la difusión atmosférica, por lo que hemos de limitarnos a estimar algunas propiedades estadísticas de c_i . Se define así la media $\langle c_i \rangle$ como el promedio de las concentraciones resultantes de infinitos experimentos realizados en las mismas condiciones medias. Si expresamos $c_i = \langle c_i \rangle + c'_i$, con la condición de que $\langle c'_i \rangle = 0$, la ecuación resultante que engloba el conjunto infinito de experimentos será:

$$\frac{\partial \langle c_i \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} (\bar{u}_j \langle c_i \rangle) + \frac{\partial}{\partial t} (u'_j c'_i) = D_i \frac{\partial^2 \langle c_i \rangle}{\partial x_j \partial x_j} + \langle R_i(\langle c_1 \rangle + c'_1, \dots, \langle c_N \rangle + c'_N) \rangle + S_i(\bar{x}, t) \quad (\text{Ec 1.4})$$

dado que $\bar{u}'_j = 0$ y $\langle c'_i \rangle = 0$.

Si los contaminantes son inertes ($R_i=0$) tendremos cuatro variables independientes para cada especie, $\langle c_i \rangle$, $\langle u'_j c'_i \rangle$, $j=1, 2, 3$, y solo tres ecuaciones ($j=1, 2, 3$): no es posible entonces resolver el sistema. Para resolverlo, será necesario plantear hipótesis adicionales que permitan el establecimiento de alguna nueva relación entre las variables independientes, antes indicadas: un modelo de difusión turbulenta.

1.4 Las aproximaciones lagrangianas

Zannetti (1990) distingue dos variantes en lo que refiere a los modelos lagrangianos numéricos:

- Modelos de estructuras (*puffs*).
- Modelos de partículas.

Los modelos de *puffs* permiten definir la distribución de contaminante en el interior de la estructura de muy diferentes formas, según convenga; tradicionalmente, se han tomado como base las funciones de distribución gaussianas para este propósito puesto que, como hemos visto, la solución gaussiana se obtiene analíticamente de la ecuación de difusión mediante la aplicación de algunas hipótesis.

Los modelos de partículas utilizan como representaciones matemáticas de los contaminantes partículas matemáticas que, se considera, contienen una cantidad de contaminante dada; no se plantea, por tanto, la distribución de contaminante alrededor de cada partícula, dado que la cantidad de contaminante en un volumen considerado vendrá dada por el número de partículas contenidas en ese volumen. Esto permite que la distribución de contaminante en el entorno pueda adoptar cualquier forma, siempre que se utilicen el suficiente número de partículas para alcanzar una representación estadísticamente próxima a la aleatoriedad. Esto implica que el tiempo de cálculo que requieren estos modelos es muy alto, y solo en los últimos años están resultando de aplicación prácticamente.

Los modelos lagrangianos más extendidos son los modelos de estructuras (*puffs*).

La aproximación lagrangiana tiene la principal ventaja, sobre la euleriana, de necesitar requerimientos de tiempo de cálculo y memoria de máquina mucho menores, por lo que resulta muy adecuada cuando se desea determinar la influencia de un único foco emisor sobre el entorno en tiempo real con una buena resolución en la distribución de inmisiones obtenida. De ahí que sea la alternativa elegida cuando se pretende simular la influencia de un número reducido de focos emisores sobre el entorno, con un cierto detalle espacial (resolución de 1 km o menor) y en el caso de que el comportamiento químico del contaminante considerado sea sencillo.

1.4.1 Modelo de puff

Los modelos de puff han sido desarrollados para estudiar emisiones no estacionarias en condiciones de dispersión no homogéneas. Tienen además, la ventaja de ser capaces, al menos teóricamente, de simular las calmas.

Estos modelos consideran que de cada emisión de contaminante, de duración Δt , penetra en la atmosfera una masa $\Delta M = Q\Delta t$, donde Q es la velocidad de emisión variable en el tiempo. El centro del puff de masa ΔM es arrastrado según el vector de viento local variable en el tiempo. Si en el tiempo t , el centro del puff se localiza en $p(t) = (x_p, y_p, z_p)$, entonces la concentración del puff en el receptor $r = (x_r, y_r, z_r)$ se calcula como:

$$\Delta c = \frac{\Delta M}{\sqrt{(2\pi)^3 \sigma_h^2 \sigma_z}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x_p - x_r}{\sigma_h} \right)^2} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{y_p - y_r}{\sigma_h} \right)^2} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{z_p - z_r}{\sigma_z} \right)^2} \quad (\text{Ec 1.5})$$

la cual a veces incluye los términos de deposición/decaimiento y reflexión. La integración analítica de esta ecuación en condiciones de transporte homogéneas y estacionarias da como resultado la ecuación del penacho gaussiano (Ec 3.13).

La ecuación Ec 1.5 requiere una evaluación adecuada de los coeficientes, horizontal (σ_h) y vertical (σ_z), de cada crecimiento del puff. La concentración total en un receptor, al tiempo t se calcula adicionando la contribución ΔC de todos los puff existentes generados por todas las fuentes. La

ecuación Ec 1.5 difiere de Ec 3.13 fundamentalmente porque un término de difusión horizontal extra ha sido sustituido por el término de transporte, con la consiguiente desaparición de la velocidad del viento \bar{u} . En otras palabras, en los modelos de puff, la velocidad del viento afecta solo el cálculo de la concentración por el control de la densidad del puff en la región (o sea, mientras mas débil sea el viento, más cerca estará el puff del próximo puff generado por el mismo foco). Por lo tanto, al menos en teoría, el modelo de puff puede tratar las calmas, y esta aproximación representa su mayor ventaja.

Para la difusión relativa, Hanna et al. (1982) recomiendan la fórmula de Batchelor:

$$\sigma_h^2 = \varepsilon t^3 \quad (\text{Ec 1.6})$$

para tiempos de tránsito del puff, menores que 10^4 s, donde ε es la velocidad de disipación turbulenta. También recomendaron calcular ε localmente al principio, y luego a la altura $z = \frac{z_i}{2}$ como σ_z se aproxima a $0,3z_i$.

Para tiempos de tránsito superiores a 10^4 s, Hanna et al. (1982) sugieren:

$$\sigma_h^2 = \text{const} \cdot t \quad (\text{Ec 1.7})$$

donde *const* puede ser determinada ajustando 7-52 para satisfacer 7-47 para $t=10^4$ s, por lo tanto:

$$\text{const} = 100\sqrt{\varepsilon} \quad (\text{Ec 1.8})$$

Para σ_z se propone un procedimiento similar, excepto que σ_z se mantendría constante e igual a $0,3z_i$ después de alcanzar este valor.

1.4.2 Modelos de partículas

La modelación de partículas es una poderosa herramienta de cálculo para la discretización de un sistema físico. La cual ha sido particularmente exitosa en un amplio espectro de aplicaciones (Hockney y Eastwood, 1981), en un rango desde la escala atómica (flujo de electrones en semiconductores, dinámica molecular) hasta la escala astronómica (dinámica de galaxias), con otras importantes aplicaciones al plasma y la dinámica de fluidos turbulentos. Los modelos de partículas operan los términos de transporte de manera sencilla, cuyo tratamiento numérico correcto es muy difícil con modelos eulerianos. Las partículas, de hecho, tienen naturaleza lagrangiana, ya que se mueven siguiendo el flujo principal. Por ello, estas son llamadas frecuentemente partículas lagrangianas.

Los modelos de partículas usan cierto número de partículas computacionales (ficticias) para simular la dinámica de un parámetro seleccionado (masa, calor, densidad de carga eléctrica, etc). El movimiento de las partículas puede ser producido tanto por las velocidades deterministas como por pseudovelocidades semialeatorias generadas por las técnicas de Monte-Carlo. En este último caso, la trayectoria de una partícula sencilla representa simplemente una discretización de un conjunto infinito de posibles soluciones. Sin embargo, se pueden inferir importantes características

del proceso de difusión a través del cálculo de las propiedades medias del conjunto de partículas, las cuales no son afectadas por la aleatoriedad de las pseudovelocidades si se utilizan suficientes partículas.

Se pueden definir tres tipos principales de modelos de partículas:

- Modelos partícula-partícula (PP), en los cuales todas las fuerzas de interacción (gravitacionales o eléctricas) entre partículas son calculadas al mismo tiempo.
- Modelos partícula-malla (PM), en los cuales las fuerzas se calculan a través de una ecuación de campo (en la malla) para el potencial.
- Modelos PP-PM (P^3M), es una aproximación híbrida, en la cual las fuerzas de interacción entre partículas se dividen en componentes de corto alcance (calculadas usando el método PP) y una variación lenta (representada en una malla por el método PM).

Las escalas de longitud y tiempo (como en todos los sistemas de discretización) juegan un importante papel en los modelos de partículas. En particular, la relación entre las partículas físicas reales (o elementos) y las modeladas es un factor importante para la interpretación de los resultados de la simulación. En general, se pueden encontrar tres posibles casos (Hockney y Eastwood, 1981):

- Correspondencia uno a uno entre las partículas reales y simuladas, como por ejemplo las simulaciones de dinámica molecular.
- Descripción de elementos de fluido (posición, vorticidad) como partículas, como por ejemplo en las simulaciones de la vorticidad de fluidos, donde se pierde totalmente la correspondencia con las partículas físicas (moléculas).
- Uso de superpartículas, por ejemplo la simulación de partículas que representan una nube de partículas físicas de similares características.

Los modelos de partículas son aplicados fundamentalmente para simular (y entender) la estructura espiral de las galaxias, para simular la dinámica del plasma y el flujo de electrones en semiconductores, y para obtener representaciones realistas de la turbulencia en fluidos.

En aplicaciones de la contaminación del aire producida por la emisión de material gaseoso, usando el método de partículas lagrangianas, se caracterizan por un conjunto de partículas calculadas y cada una de ellas se mueve al mismo tiempo a pseudovelocidades, los cuales tienen en cuenta los tres componentes básicos de dispersión:

1. El transporte debido la velocidad del fluido principal;
2. Fluctuaciones (aparentes) de la turbulencia aleatoria de las componentes del viento (ambos, horizontal y vertical);
3. La difusión molecular (si no es despreciable).

Después de los trabajos precedentes de Smith (1968) y Hall (1975), Lamb (1978) simuló la turbulencia vertical asignándole a cada partícula una velocidad:

$$w = w_d + w_s \quad (\text{Ec 1.9})$$

donde w_d fue determinado por el modelo euleriano de Deardorff (1974), y, w_s es un término estocástico que describe el efecto de las fluctuaciones submalla no incluidas en el modelo numérico.

Posteriormente, Zannetti (1981a, 1984) introdujo un esquema para la inclusión de la correlación cruzada entre las fluctuaciones de la velocidad. Baerentsen y Berkowicz (1984) emplearon dos ecuaciones separadas para describir el ascenso y descenso de las partículas, asumiendo que la física de los dos fenómenos es diferente.

Como mostró de Baas et al. (1986) la mayoría de los estudios de modelación de partículas vinculados con la calidad del aire son soluciones numéricas de la ecuación diferencial estocástica de Langevin (Reid, 1979; Gifford, 1982; Sawford, 1984):

$$dw = -\frac{w}{T_L} dt + d\mu \quad (\text{Ec 1.10})$$

donde w es cualquier componente de la velocidad de la partícula lagrangiana, T_L es la escala de tiempo lagrangiano, y, $d\mu$ es el incremento de la velocidad aleatoria.

1.5 Aplicaciones de modelos atmosféricos

Se han reportado buenos resultados para los modelos lagrangianos, tanto para llanuras con condiciones homogéneas y estacionarias (Oetl et al., 2001; Raza et al., 2001; Venkatesan et al., 2002; Tsuang, 2003) como para condiciones no homogéneas e inestables en terreno complejo (Du, 2001; Hurley et al., 2003; Jung et al., 2003).

Holmes (2006) describe a los modelos GRAL (Oetl et al., 2005), TAPM (Hurley et al., 2003), ARIA Regional (Aria Technologies, 2007) y comenta algunas de sus aplicaciones.

Para el modelo GRAL (euleriano-lagrangiano), que está diseñado para modelar la dispersión de compuestos inertes dentro de campos de viento no homogéneos, aclara que está limitado por no poder tener en cuenta toda la formación química de las partículas. Sin embargo, Oetl et al. (2005) y Oetl et al. (2003) reportan buena precisión al simular las concentraciones de SF_6 durante diferentes estudios en terrenos, tanto llanos como complejos.

Por otro lado, TAPM, modelo regional de dispersión euleriano que incluye un modulo lagrangiano para partículas en las cercanías de los focos emisores, mostró buena concordancia en la comparación de la concentración de las partículas con medidas, en un estudio en Melbourne (Hurley et al., 2003). TAPM se evaluó, igualmente, frente a dos de los estudios de validación de Indianápolis y Kincaid (Luhar y Hurley, 2003), que simulan las concentraciones urbanas y rurales

típicas en terreno plano. En este estudio se comparó con CALPUFF (Scire et al., 2000b) y AERMOD (Perry et al., 1994), y TAPM mostró buenos resultados. Los autores concluyeron que esto demostraba que TAPM proporciona una predicción precisa de la meteorología local.

El Modelo ARIA Regional, se desarrolló con el fin de analizar la dispersión de gases y partículas, procedentes de focos emisores industriales, de transporte, en dominios de hasta 1000 km, con una resolución entre el 1 km y 10 km. Este, utiliza dos enfoques teóricos diferentes que permiten al usuario elegir el modelo de dispersión más adecuado: el Modelo FARM, que se basa en la aproximación de Euler y el SPRAY basado en el enfoque de Lagrange.

El modelo SPRAY ha sido utilizado para estudiar la dispersión de contaminantes pasivos en terreno complejo (Nanni et al., 1996; Anfossi et al., 1998; Carvalho et al., 2002a; Gariazzo et al., 2004). El más reciente (Gariazzo et al., 2004) mostró que a pesar de calcular con precisión la velocidad del viento, se observaron algunas discrepancias en la velocidad de fricción; el ajuste en general, fue muy bueno.

1.5.1 Aplicaciones de modelos eulerianos

Varias son las experiencias de aplicaciones de modelos eulerianos (Huijnen et al., 2010; Langmann et al., 2012).

En una de ellas, Méndez et al. (2003) aplicaron el modelo STEM-II (Carmichael et al., 1986) para entender la influencia de la reducción de las emisiones de SO₂ de un foco emisor en la deposición en sus cercanías. Analizaron además, los principales procesos que intervienen en la deposición de contaminantes patrones.

En otro estudio, Folch et al. (2012) utilizan el modelo de dispersión de cenizas FALL3D (Costa et al., 2006) y validan, comparando los resultados con medidas terrestres y obtenidas desde aeroplanos, durante las emisiones del volcán Eyjafjallajökull en el 2010.

Por su parte, Pan et al. (2010) obtuvieron simulaciones anuales de mercurio atmosférico en Asia oriental mediante STEM-Hg (módulo de mercurio de STEM-III, Carmichael et al., 1991) para estudiar la acumulación de mercurio en la región.

Otro, es el trabajo de Pisoni et al. (2010) quienes analizaron la sensibilidad a la resolución espacial de un modelo de calidad del aire, considerando un enfoque multi-objetivo. El dominio seleccionado fue el norte de Italia, un área a menudo afectada por la alta exposición a las PM₁₀ y utilizando el sistema GAMES, (Volta y Finzi, 2006) que contiene tres módulos principales: el modelo fotoquímico TCAM (Carnevale et al., 2008), el preprocesador meteorológico PROMETEO y el procesador de emisiones POEMPM (Carnevale et al., 2006).

Por otro lado, Sofiev et al. (2010) desarrollaron un esquema no iterativo para diagnosticar las características de la capa superficial de viento, los perfiles de temperatura y humedad, como parte de una interfaz general para el acoplamiento HIRLAM/SILAM (Sofiev et al., 2006). La verificación del esquema incluyó la comparación a largo plazo con medidas de estaciones meteorológicas en los Países Bajos, y Finlandia.

Mientras que, Renner y Wolke (2010) realizaron simulaciones regionales de aerosoles de sulfato, nitrato y amonio con el modelo COSMO-MUSCAT (Wolke et al., 2004).

El modelo WRF/Chem (Grell et al., 2005) fue utilizado por Misenis et al. (2010) para examinar la sensibilidad de las predicciones de calidad del aire para dos esquemas de capa límite planetaria y tres modelos de la superficie terrestre.

Por otro lado, Zeng et al. (2010) desarrollaron el sistema METEX para el cálculo de trayectorias que se destaca por su flexibilidad y facilidad de uso.

Mientras que van Velzen et al. (2010) emplearon el modelo LOTOS-EUROS (Schaap et al., 2008) para predecir el smog y la dispersión de los aerosoles en los Países Bajos.

Por su parte Gómez et al. (2010) aplicaron el modelo FEOM (Shorter et al., 1999) a la solución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que describe los mecanismos de las reacciones químicas en un modelo ideal de transporte de contaminantes.

Otro es el estudio de Monteiro et al. (2012) quienes aplicaron un análisis estadístico y modelizaron un episodio de inmisión de ozono producido en una zona montañosa en el norte de Portugal, con el objetivo de identificar su origen y formación. Con este fin utilizaron un acoplamiento MM5/EURAD -IM (Elbern et al., 2007).

Cohan et al. (2010) aplicaron una técnica de análisis de sensibilidad de orden superior para cuantificar el grado en que la incertidumbre de la velocidad de reacción influye en las estimaciones de las concentraciones de ozono y su sensibilidad a las emisiones de precursores, durante un episodio de contaminación del aire en Houston, Texas, utilizando el modelo CAMx (Tesche et al., 2001). Otro reporte de este modelo fue el de Song et al. (2010) quienes investigaron la sensibilidad de la producción de ozono a las emisiones de precursores en cinco condiciones meteorológicas diferentes en la Zona Metropolitana del Valle de México utilizando un acoplamiento con WRF (Skamarock y Klemp, 2008). Mientras que Borrego et al. (2010) evaluaron la contaminación fotoquímica en el Área Metropolitana de Porto Alegre, Brasil, durante un período de verano, acoplándolo con MM5 (Grell et al., 1994) y comparándolo con un acoplamiento de MM5 y CALGRID (Yamartino et al., 1992). Por su parte, Astitha et al. (2010) exploraron el origen y destino de los aerosoles continentales, en el océano Atlántico central, en términos de composición química, número y distribución de tamaño, utilizando la combinación de las últimas versiones del

modelo de polvos SKIRON (Kallos et al., 1997) y CAMx, datos satelitales y medidas. Ferreira et al. (2012) aplicaron el acoplamiento MM5/CAMx en Norteamérica para todo un año, en el marco de la Iniciativa Internacional de Evaluación de Modelos de Calidad del Aire (AQMEII, Rao et al., 2011). El trabajo se centró en ozono, dióxido de nitrógeno, dióxido de azufre y monóxido de carbono, que son los contaminantes regulados para la protección de la salud humana, e incluyeron análisis cualitativos y cuantitativos de la distribución temporal y espacial de las concentraciones modeladas.

Uno de los modelos eulerianos más usados es CMAQ (Byun y Ching, 1999). Kim et al. (2010) llevaron a cabo una serie de análisis de sensibilidad con cinco esquemas de capa límite diferentes, asociados con tres modelos diferentes de superficie terrestre, para examinar el impacto de las variables meteorológicas en las concentraciones de ozono predichas usando CMAQ con perspectiva local. Por su parte, Chemel et al. (2010) llevaron a cabo una evaluación integral del modelo CMAQ, como parte de la estimación de la contaminación en el Reino Unido. El rendimiento del modelo fue evaluado para los valores límites normativos de los contaminantes y de las especies que contribuyen a la deposición ácida y nitrogenácea con medidas de las redes nacionales de vigilancia. Mientras que Borge et al. (2010) investigaron la influencia de las condiciones químicas de contorno sobre la respuesta del modelo CMAQ sobre la Península Ibérica.

Por un lado, Im et al. (2010) investigaron los altos niveles invernales de PM_{10} , sulfato, y nitrato de amonio en Estambul, utilizando un acoplamiento de alta resolución WRF/CMAQ. Mientras que Mao et al. (2010) llevaron a cabo varias simulaciones regionales de calidad del aire, enfocada en el transporte del este de los EE.UU., y las sometieron a una evaluación exhaustiva utilizando medidas en superficie y en altura. Al mismo tiempo, Lim et al. (2010) estudiaron las salidas de CMAQ en dos resoluciones, para evaluar la discrepancia debido a la discretización del espacio, variando el tamaño de la celda. Wang et al. (2010), identificaron las rutas regionales de transporte atmosférico de PM_{10} a través de una modelización integrada, utilizando el modelo lagrangiano HYSPLIT (Draxler y Hess, 1998) y un acoplamiento MM5/CMAQ; y análisis de patrones de presión sinóptica, con un estudio de caso en Beijing, al norte de China. Y posteriormente, San José et al. (2013) estimaron las concentraciones de benzo(a)pireno en la atmósfera, mediante el uso de CMAQ, con la inclusión de los procesos de transporte, barrido y deposición.

Un reporte novedoso fue el de Djalalova et al. (2010) quienes crearon un conjunto multimodelo de predicción de la calidad del aire, a partir de siete modelos (dos de ellos eulerianos MAQSIP-RT (McHenry et al., 2004) y CMAQ), ejecutados en tiempo real durante el experimento TEXAQS-II (Parrish, 2009). La evaluación, de ozono superficial y material particulado se realizó con medidas.

Los resultados de los modelos de varias instituciones que siguieron la erupción del volcán Eyjafjallajökull fueron compilados por Langmann et al. (2012). Ellos indicaron que el responsable

de Toulouse de la vigilancia sobre los volcanes empleó MOCAGE (Peuch et al., 1999). Simultáneamente, se aplicaron otros modelos de dispersión durante la erupción para contribuir al pronóstico del transporte de las cenizas volcánicas en la atmósfera, o para reconstruir su distribución y estimar sus concentraciones. Entre ellas se encuentran los modelos EURAD (Ackermann et al., 1998), FALL3D, REMOTE (Langmann et al., 2008;) y CMAQ.

El modelo CHIMERE (Vautard et al., 2001) ha sido utilizado por varios grupos de investigación para estimar las concentraciones de contaminantes en el aire en diferentes países europeos. Vivanco et al. (2009) realizaron una evaluación del rendimiento del modelo, en los períodos de primavera y verano en España, ingestado con emisiones EMEP. En otra aplicación de CHIMERE, Valari et al. (2010) propusieron una metodología general, aplicable a cualquier otro modelo de calidad del aire, que combina la información, a escala submalla, de emisión y uso del suelo, con el fin de desagregar el flujo de emisión promedio de la malla en un conjunto de focos emisores específicos. Mientras que Szopa et al. (2009) acoplaron CHIMERE con el módulo LMDz-INCA (Hauglustaine et al. 2004), e investigaron el beneficio para la simulación Europea de ozono, de utilizar variaciones diarias de las condiciones de contorno químicas, producidas por una plataforma global de pronóstico del tiempo y químico; en lugar de medida mensuales en las fronteras de un modelo regional. En otra aplicación, Borrego et al. (2012) investigaron el origen de altas concentraciones de ozono aplicando un acoplamiento WRF/CHIMERE en el noroeste de la Península Ibérica. La configuración se aplicó con alta resolución con el fin de estudiar tanto la contribución de los focos emisores locales así como la influencia de la contaminación transfronteriza.

Kukkonen et al. (2009) recopilaron información sobre los modelos de predicción de la calidad del aire de 10 modelos regionales (BOLCHEM, CAC, CHIMERE, EMEP, EURAD, MATCH, MOCAGE, MM5-UAMV (SAI, 1995), NAME (Ryall y Maryon, 1998) y SILAM). Intercompararon además, y evaluaron su estructura física y química, en el marco del programa COST ES0602.

Una extensa comparación de NO₂ troposférico, sobre Europa, fue presentada por Huijnen et al. (2010) a partir de medidas con la mediana de un conjunto de ocho modelos eulerianos, regionales de calidad del aire (BOLCHEM (Mircea et al., 2008), CAC (Gross et al., 2007), CAMx, CHIMERE, EMEP (Simpson et al., 2003), EURAD-IM, MATCH (Andersson et al., 2007) y SILAM); y una intercomparación de estos con dos modelos globales, uno de ellos euleriano: TM5 (Krol et al., 2005).

1.5.2 Aplicaciones de modelos lagrangianos

Kovalets et al. (2013) investigaron el impacto de los campos de viento de diagnóstico, en los resultados del cálculo, a microescala, de la dispersión atmosférica en condiciones de terreno moderadamente complejos. Compararon los resultados de un amplio conjunto de datos

radiológicos y meteorológicos, recogidos en el sitio del reactor de investigación de Chalk River Laboratories (CRL) en Canadá, con JRODOS (Ievdin et al., 2010), sistema de respuesta de emergencia nuclear de los Estados Unidos, utilizando SF₆ como trazador. JRODOS se compone por un preprocesador meteorológico (que incorpora el procedimiento de minimización de la divergencia) y de los modelos de dispersión, a elegir por el usuario, ATSTEP (Päsler-Sauer, 2004), RIMPUFF (Thykier Nielsen et al., 1998) y DIPCOT (Andronopoulos et al., 2010). En sus resultados, DIPCOT RIMPUFF mostraron aproximadamente la misma exactitud, superaron a ATSTEP. Finalmente recomiendan utilizar RIMPUFF ya que es computacionalmente más eficiente que DIPCOT, a pesar de que los resultados del primero en condiciones de terreno llano podrían ser no plenamente representativos de las condiciones del terreno moderadamente complejo.

En otro trabajo, Wen et al. (2012) propusieron un modelo de calidad del aire lagrangiano, de retrotrayectorias, sobre la base de la inversión del tiempo de trayectorias de partículas estocásticas. El modelo simula el transporte de paquetes de aire, que se mueven hacia atrás en el tiempo utilizando conjuntos de partículas ficticias generados a partir del modelo lagrangiano STILT (Lin et al., 2003). El modelo fue utilizado para simular concentraciones de O₃ y NO_x en ocho estaciones de la provincia canadiense de Ontario. Las concentraciones pronosticadas fueron comparadas con medidas y mostraron buena correspondencia con el O₃. Además, de mostrar un rendimiento mejor. Sin embargo, el modelo subestimó al NO_x en sitios alejados de las grandes ciudades, posiblemente debido a la incapacidad de las grandes celdas de emisiones de resolver los focos puntuales.

El entorno de la Planta térmica As Pontes, al noroeste de la península ibérica ha sido ampliamente estudiado. Souto et al. (1998) desarrollaron un modelo de difusión atmosférica no reactivo, y lo emplearon para la simulación de la concentración de SO₂ en su entorno. Luego compararon la forma de los penachos. En un trabajo posterior (Souto et al., 2000) probaron la nueva versión APM2 (Ludwig et al., 1989), utilizando un foco único, muy elevado, sobre terreno complejo, durante cuatro periodos representativos. Más tarde, (Souto et al., 2001) predijeron el transporte y la dispersión de contaminantes en la capa inferior atmosférica utilizando los acoplamientos entre el modelo de desarrollo propio PMETEO (Souto et al., 1999) con LPM (Pielke, 1984), y con APM2, de la concentración a nivel del suelo de SO₂, en condiciones inestables. Compararon además, los resultados con medidas. A continuación (Souto et al., 2009), justificaron el uso del sistema experto SAGA. En el mismo, los pronósticos meteorológicos, se obtienen mediante el uso de un modelo meteorológico no hidrostático, nombrado Advanced Regional Prediction System, ARPS, (Xue et al., 1995), ajustado específicamente a la región de la planta. Sus resultados pueden ser utilizados como ingesta de los modelos APM2 y LPM.

Un modelo lagrangiano de amplio uso es FLEXPART (Stohl et al., 1998). Uno de los primeros reportes fue el de Stohl et al. (1998) quienes publicaron una validación completa de FLEXPART.

Utilizaron para ello, medidas de tres experimentos, con trazadores, de gran escala, el Cross-Appalachian Tracer Experiment (CAPTEX), el Across North America Tracer Experiment (ANATEX) y el Experimento Europeo de Trazadores (ETEX). Por su parte, Wei et al. (2011) utilizaron un acoplamiento (WRF-FLEXPART) para describir el impacto de un anticiclón sobre la calidad del aire en el norte de China. Igualmente, Bei et al. (2013) presentaron los resultados de un análisis, de las condiciones meteorológicas y los patrones de transporte del penacho durante el estudio Cal-Mex2010, llevado a cabo en Tijuana, México, utilizando el mismo acoplamiento. Mientras que, Halse et al. (2013) desarrollaron, basado en FLEXPART un sistema de pronóstico para predecir y evaluar, a largo plazo, el transporte atmosférico de episodios de compuestos bifenilospoliclorados, en sitios remotos en el sur de Noruega.

Los resultados de los modelos de varias instituciones que siguieron la erupción del volcán Eyjafjallajökull fueron compilados por Langmann et al. (2012). Ellos indicaron que el responsable londinés, de la vigilancia sobre los volcanes de Islandia, utilizó el modelo lagrangiano NAME. Mientras que los de Montreal emplearon MLDP0 (D'Amours et al., 2010). Simultáneamente, se aplicaron otros modelos de dispersión durante la erupción del Eyjafjallajökull para contribuir al pronóstico del transporte de las cenizas volcánicas en la atmósfera, o para reconstruir su distribución y estimar sus concentraciones; entre ellos se encuentra FLEXPART.

Son numerosos los reportes de utilización de HYSPLIT. Davis et al. (2010) compararon y combinaron, mediante dos enfoques diferentes, la evaluación diaria de las concentraciones vespertinas de ozono a nivel de suelo, en los alrededores del Valle de Shenandoah, en Virginia. Otro estudio es el de Wang et al. (2010) quienes identificaron, en Beijing al norte de China, las rutas regionales de transporte atmosférico de PM_{10} a través de una modelización integrada, utilizando, entre otros, HYSPLIT. Carvalho et al. (2010) caracterizaron las condiciones atmosféricas que conducen a episodios de inmisión de ozono en el noreste de Portugal y analizaron las anomalías de los patrones sinópticos y las retrotrayectorias. Mientras que Adame et al. (2012) calcularon retrotrayectorias con este modelo para tratar de comprender el origen de un evento raro de inmisión de ozono, monóxido de carbono y PM_{10} , en el sudeste de la península ibérica.

Otro modelo de dispersión lagrangiano de amplio uso es CALPUFF cuyas experiencias se describirán en epígrafe aparte.

1.5.3 Aplicaciones del modelo CALPUFF

El modelo de dispersión lagrangiano de puffs, CALPUFF, ha sido recomendado por el Grupo Interinstitucional sobre Modelos de Calidad del Aire (IWAQM) para la caracterización del transporte y dispersión de contaminantes (EPA, 1998). En ese mismo año, un panel de tres revisores, concluyó que el sistema de modelación CALMET/CALPUFF es científicamente sólido y

representa un importante avance en la modelización regulatoria de la calidad del aire (Allwine et al., 1998).

Diversas son las configuraciones implementadas en CALPUFF en varios estudios, en los cuales se evidencian su versatilidad. Villasenor et al. (2003) estudiaron la dispersión del polvo procedente de Ciudad México; Cohen et al. (2005), describieron las emisiones provenientes de vehículos automotores en Portland, Oregón; Taseko (2008) lo emplearon en una zona minera en Canadá; Song et al. (2008) evaluaron un complejo industrial que incluye producción química, textil, cuero, alimentos, papel y pulpa; Lonati et al. (2010) analizaron las emisiones de buques en un puerto italiano de la costa del mar Jónico; MacIntosh et al. (2010) lo utilizaron en la industria metalúrgica; Poplawski et al. (2011) investigaron cruceros en West Virginia; Fishwick y Scorgie (2011), caracterizaron una región minera en Queensland; Ranzato et al. (2012) examinaron compuestos olorosos en los alrededores de una planta de tratamiento mientras que Curci et al. (2012) estimaron las emanaciones de una planta térmica de biomasa, estas dos últimas en Italia. Posteriormente Tartakovsky et al. (2013) estudiaron canteras y minas a cielo abierto. No obstante, la mayoría de las experiencias van dirigidas a la industria de los hidrocarburos, donde se destacan las plantas térmicas y las refinerías, las cuales han recibido especial atención debido a la existencia en estas, de numerosos focos con altos índices de emisión (Ames et al., 2002; Levy et al., 2002; Levy et al., 2003; Zhou et al., 2003; Lopez et al., 2005; Yau et al., 2010; Abdul-Wahab y Sappurd, 2011; Dresser y Huizer, 2011; Valdenebro et al., 2013).

Muchas son las especies posibles a modelizar con CALPUFF. La literatura recoge experiencias sobre SO₂ (NDDH, 2003; Yim et al., 2010; Dresser y Huizer, 2011; Abdul-Wahab y Sappurd, 2011); material particulado (PM), (Villasenor et al., 2003; Fishwick y Scorgie, 2011; Tartakovsky et al., 2013); SF₆ como trazador (Chang et al., 2003; Yau et al., 2010; Cui et al., 2011), NO_x (O'Neill et al., 2001) y compuestos olorosos (Ranzato et al., 2012). Otros, en dependencia del tipo de foco emisor utilizan diferentes mezclas y combinaciones. Ejemplos son los reportes de SENES (2009), que emplea PM, dibenzodioxinas y dibenzofuranos policlorados (PCDD/PCDF), HCN y difenilos policlorados (PCB); Taseko (2008), SO₂, SO₄, NO, NO_x, NO₂, HNO₃, NO₃, CO y compuestos orgánicos volátiles (COV); Fonseca (2013), SO₂, SO₄, NO_x, HNO₃, NO₃, CO, PM₁₀ y PM_{2,5}; Lonati et al. (2010) NO_x, SO_x, PM, CO y COV; Levy et al. (2002), Levy et al. (2003), Protonotariou et al. (2004), Lopez et al. (2005) y Poplawski et al. (2011), SO₂, NO_x y PM; Curci et al. (2012), SO₂, NO_x, PM₁₀, SO₄ y NO₃; Ghannam y El-Fadel (2013), CO, NO_x, y PM; Valdenebro et al. (2013), benceno; Cohen et al. (2005), benceno, 1,3-butadieno y PM de diesel; Rincón de Hoyos (2012), CO, NO_x, PM, SO₂ y COV; Collazo (2011), SO₂ y NO_x; Song et al. (2008), compuestos sulfurados (H₂S, sulfuro de dimetilo, CS₂, disulfuro de dimetilo, y CH₃SH) y MacIntosh et al. (2010), cadmio, plomo, y zinc.

La elección del tipo de fuente depende del objeto de estudio y determina los mecanismos de dispersión. CALPUFF permite combinar, en número y tipo, diversas fuentes. O'Neill et al. (2001), Villasenor et al. (2003), Taseko (2008), Lonati et al. (2010), Rincón de Hoyos (2012), Ranzato et al. (2012) y Tartakovsky et al. (2013) optaron por fuentes de área, esta última con emisión variable en el tiempo. Mientras que Song et al. (2008), (30 m); Curci et al. (2012), (40 m); Abdul-Wahab y Sappurd (2011), (60 m); Cui et al. (2011), (70 m); Levy et al. (2002), (168 m); Dresser y Huizer (2011), (183 m); Yau et al. (2010), (187 m); NDDH (2003) y Zhou et al. (2003), (210 m); y Collazo (2011), (267 m); eligieron fuentes puntuales (entre paréntesis la altura de la mayor de las fuentes).

Por otra parte, Chang et al. (2003) mezclaron fuentes lineales y puntuales; Protonotariou et al. (2004) y Fishwick y Scorgie (2011), puntuales y de área; Cohen et al. (2005), lineales y de área; y Ghannam y El-Fadel (2013), puntuales, de área y lineales.

En las aplicaciones regionales es obvio que se incluyan áreas urbanas, zonas y parques industriales, con distintos tipos de industrias y diversas fuentes, incluidas las emisiones urbanas; (NDDH, 2003; SENES, 2009; Whitford, 2009; Protonotariou et al., 2004; Yim et al., 2010; Collazo, 2011; Rincón de Hoyos, 2012; Ghannam y El-Fadel, 2013).

1.6 Modelos meteorológicos

Las diferentes fuerzas que actúan sobre el aire atmosférico conforman un equilibrio o balance de energía mecánica que puede ser formulado matemáticamente a fin de calcular las propiedades de flujo atmosférico. Dado que en la atmósfera también se producen intercambios de energía térmica (tanto calor sensible como latente), para el cálculo del flujo atmosférico es necesario resolver un balance de energía térmica. Y finalmente, a fin de facilitar la resolución matemática del sistema de ecuaciones resultante, es de aplicación el balance global de materia (aire), que da lugar a la ecuación de continuidad (Ec 1.12 y Ec 1.13).

Sin embargo, la principal característica del sistema de ecuaciones resultante de esta combinación de balances (mecánico, térmico y de masa) se deriva del hecho de que el flujo atmosférico es altamente variable en el espacio y en el tiempo y, en consecuencia, sus soluciones solo resultan útiles en la medida en que permitan conocer sus propiedades en cada punto del espacio y en cada instante de tiempo. Esto requiere la formulación diferencial de los balances que, típicamente, ha llevado a la aplicación de las denominadas "ecuaciones de Navier-Stokes" al flujo atmosférico. Así, los balances diferenciales configuran un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales cuya resolución en la atmósfera exige la aplicación de técnicas de resolución numérica. Típicamente, en el caso de la atmósfera estas ecuaciones se resuelven mediante las denominadas técnicas de "diferencias finitas".

La base fundamental de la descripción del flujo turbulento atmosférico está compuesta por cinco ecuaciones: la ecuación de estado, las ecuaciones de conservación de materia global, de humedad, de energía calorífica y de cantidad de movimiento. Este fundamento teórico es imprescindible para comprender las distintas soluciones desarrolladas para la descripción del flujo de contaminantes en la atmósfera, aunque su resolución genérica, tanto analítica como numérica, está muy limitada, y habitualmente se utilizan soluciones originadas por la aplicación de diversas aproximaciones.

Se considera que se cumplen las leyes de los gases ideales, puesto que las condiciones termodinámicas de la atmósfera y su composición lo permiten si se plantea la ecuación ligeramente modificada:

$$p = \rho RT_v \quad (\text{Ec 1.11})$$

donde p es la presión,
 ρ es la densidad del aire con su contenido de humedad,
 T_v es la temperatura virtual absoluta, y,
 R es la constante de los gases para el aire seco.

El balance global de materia, o ecuación de continuidad, puede presentarse en dos formas:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{Ec 1.12})$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{Ec 1.13})$$

Si V y L son las escalas típicas de longitud y velocidad en la capa límite atmosférica, puede simplificarse considerablemente la ecuación de continuidad si se cumplen las siguientes condiciones:

$$V \ll 100 \text{ m/s} \quad L \ll 12 \text{ km} \quad L \ll \frac{c_s^2}{g}, \quad L \ll \frac{c_s}{f},$$

donde c_s es la velocidad del sonido, y,
 f es la frecuencia las ondas de presión.

Bajo estas condiciones, que generalmente se verifican para todos los fenómenos turbulentos

dentro de la mesoescala, se ha demostrado que $\frac{\partial \rho}{\rho \partial t} \ll \frac{\partial u_j}{\partial x_j}$; por tanto, la segunda expresión de

la ecuación de continuidad se reduce a:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{Ec 1.14})$$

que es equivalente a la que resulta de aplicar la aproximación de incompresibilidad.

El balance de cantidad de movimiento o momento, 2ª Ley de Newton, puede expresarse en la notación de suma de Einstein, tal como:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\delta_{i3}g - 2\varepsilon_{ijk}\Omega_j u_k - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (\text{Ec 1.15})$$

donde el término

	I	II	III	IV	V	VI
	I	II	III	IV	V	VI
	I	II	III	IV	V	VI

es la acumulación (inercia),
es la advección: entrada - salida,
es la generación en la dirección vertical debida a la fuerza gravitatoria,
es la generación debida a la rotación de la Tierra (efecto Coriolis),
es la generación debida a las fuerzas de presión, y,
es la generación debida al rozamiento: esfuerzos viscosos.

Las componentes del vector velocidad angular Ω_j son $(0, \omega \cos \varphi, \omega \sin \varphi)$, donde φ es la latitud y $\omega = 2\pi \text{rad}/24 \text{h} = 7.27 \cdot 10^{-5} \text{s}^{-1}$ es la velocidad angular de la Tierra. Este término suele escribirse como $+f_c \varepsilon_{ij3} u_j$, donde $f_c = 2\omega \sin \varphi = 1.45 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1} \sin \varphi$ es el parámetro de Coriolis.

Se asume habitualmente que el aire en la atmósfera se comporta como un fluido newtoniano, de modo que la expresión para los esfuerzos viscosos es:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right] \quad (\text{Ec 1.16})$$

Derivando y considerando viscosidad homogénea:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\mu}{\rho} \left[\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (\text{Ec 1.17})$$

y si, además, se tiene en cuenta la aproximación de incompresibilidad, la ecuación se reduce a:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \quad (\text{Ec 1.18})$$

La ecuación de balance final resulta ser:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\delta_{i3}g - f_c \varepsilon_{ij3} u_j - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \quad (\text{Ec 1.19})$$

Por otra parte, el balance de humedad (q_T), tanto agua líquida como vapor de agua, es relativamente sencillo si se asume ya la condición de incompresibilidad:

$$\frac{\partial q_T}{\partial t} + u_j \frac{\partial q_T}{\partial x_j} = \nu_q \frac{\partial^2 q}{\partial x_j^2} + \frac{S_{qT}}{\rho_{aire}} \quad (\text{Ec 1.20})$$

donde ν_q es la difusividad molecular del vapor de agua en el aire, y,
 S_{qT} es el término de entrada neta de humedad para los procesos no incluidos en la ecuación.

Si distinguimos el vapor (q) del agua líquida (q_L), $q_T = q + q_L$, $S_{qT} = S_q + S_{qL}$, podemos escribir dos ecuaciones como:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + u_j \frac{\partial q}{\partial x_j} = \nu_q \frac{\partial^2 q}{\partial x_j^2} + \frac{S_q}{\rho_{aire}} + \frac{E}{\rho_{aire}} \quad (\text{Ec 1.21})$$

$$\frac{\partial q_L}{\partial t} + u_j \frac{\partial q_L}{\partial x_j} = \frac{S_{qL}}{\rho_{aire}} - \frac{E}{\rho_{aire}} \quad (\text{Ec 1.22})$$

I II VI VII VIII

donde E representa la cantidad neta de vapor de agua por unidad de volumen y unidad de tiempo que se genera debido al cambio de fase desde líquido o sólido. Las precipitaciones en forma de lluvia, nieve, etc, que disminuyen la humedad atmosférica se incluyen en el término VII. Por otra parte, en la ecuación del agua líquida no aparece el término VI de difusión molecular, dado que parece obvio que este tipo de transporte tiene una influencia muy pequeña sobre el movimiento de líquido o sólido. Los términos I, II y VI son análogos a los términos correspondientes en el balance de cantidad de movimiento.

Por otro lado, el balance de energía calorífica, o 1ª Ley de la Termodinámica, representa la conservación de entalpía. En la atmósfera existe el cambio de fase asociado a la humedad, por lo que en el cambio de entalpía se deben tener en cuenta las contribuciones del transporte de calor sensible y de calor latente. Habitualmente, en el estudio de la atmósfera se utiliza la magnitud E contenida en los balances de agua líquida y vapor de agua; de este modo, puede escribirse el balance como:

$$\underbrace{\frac{\partial \theta}{\partial t}}_I + \underbrace{u_j \frac{\partial \theta}{\partial x_j}}_{II} = \underbrace{v \theta \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_j^2}}_{VI} - \underbrace{\frac{1}{\rho C_p} \frac{\partial Q_j^*}{\partial x_j}}_{VII} - \underbrace{\frac{L_p E}{\rho C_p}}_{VIII} \quad (\text{Ec 1.23})$$

donde ν_q es la difusividad térmica,
 L_p es el calor latente asociado al cambio de fase neto E , para cuyo cálculo hay que tener en cuenta los cambios de fase gas-líquido, líquido-sólido y gas-sólido para el agua,
 Q_j^* es la componente de la radiación en la dirección j -ésima, y,
 C_p es la capacidad calorífica del aire húmedo.

Los términos I, II y VI corresponden a los términos de acumulación, advección y difusión molecular. El término VII es un término de generación asociado a la pérdida de calor por radiación y el término VIII está asociado a la generación o absorción del calor latente en los cambios de fase.

La resolución conjunta de estas ecuaciones de balance, sobre un sistema de referencia fijo como es el caso de la mayoría de los modelos meteorológicos, es a base de los modelos eulerianos.

Las ecuaciones de la atmósfera antes expuestas son la base de los modelos atmosféricos, cuyo objetivo es su resolución matemática, mediante métodos numéricos. Así, los modelos meteorológicos tienen como objetivo determinar el estado físico de la atmósfera. Este estado físico incluye el viento y otras propiedades del flujo atmosférico (turbulencia), la temperatura, el contenido en humedad, agua líquida y hielo. Además de considerar la aportación esencial de la radiación solar, como motor del flujo atmosférico; y la influencia de la superficie terrestre sobre dicho flujo. Estos parámetros deben ser determinados en todos los puntos del espacio, siendo además de interés su evolución en el tiempo.

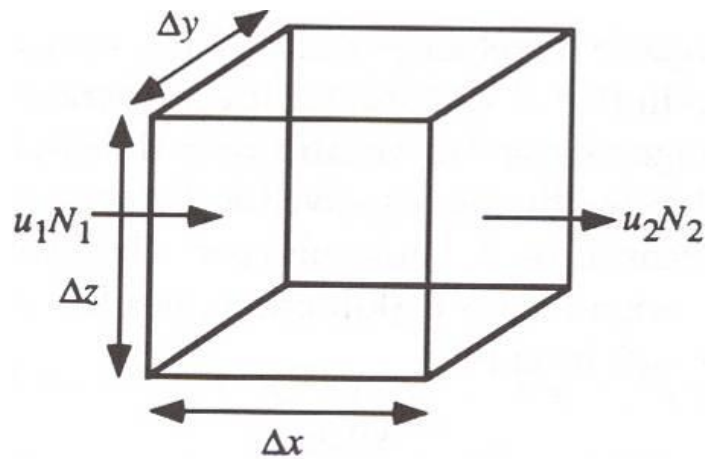


Figura 1.1 Celda de una malla euleriana sobre la que se resuelven los modelos atmosféricos.

La resolución de estas ecuaciones se lleva a cabo mediante la aplicación de métodos numéricos de integración sobre una malla de celdas (Figura 1.1) que abarca todo el dominio o espacio atmosférico que se pretende conocer: es la solución euleriana. Esta integración mediante diferencias finitas calcula el cambio de cada parámetro atmosférico de una celda a otra de la malla, mediante la aplicación de las ecuaciones atmosféricas.

1.6.1 Modelos de diagnóstico meteorológico

El transporte de los contaminantes en la atmósfera está condicionado, en primer lugar, por el flujo atmosférico medio de aire: el viento. Por tratarse de una magnitud vectorial, la definición de esta variable en el entorno tridimensional considerado requiere algún procedimiento de cálculo de sus tres componentes en cada punto de la malla. Habitualmente, los modelos de predicción meteorológica proporcionan esta información directamente para diferentes instantes a lo largo del tiempo de predicción, aunque su resolución horizontal suele ser muy pobre para su aplicación en un modelo de difusión a distancia de mesoescala. Por ello, es preciso obtener una descripción más detallada del campo de vientos existente en un entorno reducido mediante la instalación de sistemas de medición en continuo distribuidos dentro del entorno de modo que sea posible apreciar los factores que afecten en mayor medida a la variabilidad del flujo de aire, a saber: topografía de la zona (valles y montañas), brisas costeras, etc.

Sin embargo, la recopilación de un conjunto de valores de velocidad y dirección del viento en superficie y en altura para un período considerado y en localizaciones fijas no es suficiente para obtener un campo de vientos utilizable por un modelo, puesto que las medidas pueden resultar incorrectas y no ser representativas en todo momento del valor medio de la magnitud en la localización considerada. Por ello, es preciso comprobar la validez de estas medidas, y corregirlas si es preciso, aplicando alguna condición física que se derive directamente de las ecuaciones de balance para el flujo atmosférico. Este procedimiento, denominado generación de campos de vientos, ha sido estudiado desde distintos puntos de vista, buscando soluciones rápidas y que obtengan resultados aceptables; sin embargo, la mayoría de los autores coinciden hoy en día en

imponer como condición física del campo de vientos la ecuación de continuidad para un fluido incompresible, lo que lleva a la formulación de esta condición como la exigencia de que el campo de vientos tenga divergencia nula:

$$\nabla \vec{v} = 0 \quad (\text{Ec 1.24})$$

Para alcanzar este objetivo existen diferentes métodos, pero todos ellos utilizan diferentes procedimientos de interpolación para obtener un campo de vientos inicial que, posteriormente, es ajustado mediante una serie de restricciones.

La definición de las restricciones que permitan ajustar el campo de vientos a fin de obtener un conjunto coherente de datos susceptible de ser utilizado por un modelo de difusión atmosférica en tiempo real es otro problema añadido, que ha sido resuelto con diversas aproximaciones. Si bien todos los autores coinciden en exigir la condición de divergencia nula derivada de la ecuación de continuidad con la condición de incompresibilidad, difieren en el método de cálculo numérico de la divergencia y en el modo de garantizar su valor nulo.

Existen multitud de modelos de diagnóstico meteorológico, casi tantos como autores han trabajado en este campo. La gran mayoría se limitan a aplicar diferentes métodos para alcanzar la condición de divergencia nula. Solo algunos aportan soluciones singulares, como el modelo WOCCS (Ludwig y Endlich, 1988) desarrollado en la Stanford University, que incorpora el uso de los gradientes de temperatura para el cálculo de las componentes verticales del viento, o el modelo CALMET, recomendado por la EPA para su uso en modelos de dispersión atmosférica, que incorpora soluciones específicas para la estimación de parámetros de turbulencia.

1.6.2 Modelos de predicción meteorológica

Así como en el caso de los modelos meteorológicos de diagnóstico existen multitud de soluciones desarrolladas por distintos autores, los modelos de predicción meteorológica exigen la resolución simultánea de un conjunto de ecuaciones que, junto con las exigencias derivadas del gran número de datos que precisan, ha llevado a la necesidad de desarrollar estos modelos en equipo, como paquetes de software elaborados por instituciones de investigación u otras. En consecuencia, el número y variedad de modelos de predicción meteorológica es más reducido.

De entre los modelos disponibles para la comunidad científica internacional, destacan actualmente el modelo ARPS (desarrollado por el Centro de Análisis y Predicción de Tormentas, CAPS, de la Universidad de Oklahoma, EEUU), y uno de los primeros modelos de uso público), el modelo MM5 (modelo comunitario soportado por el Centro Nacional de Investigación de la Atmósfera, NCAR, EEUU) y el modelo WRF (como desarrollo actualizado del modelo MM5 y continuación de éste). Estos modelos son códigos Fortran que pueden ser descargados a través de Internet e instalados en equipos con sistema operativo UNIX; sin embargo, estas tareas requieren un profundo

conocimiento tanto de los sistemas informáticos como de los modelos para alcanzar los mejores resultados.

1.6.3 Aplicaciones del modelo CALMET

Existe multitud de posibilidades de acoplamiento y configuración del modelo CALMET, lo que ha dado lugar a multitud de aplicaciones del mismo, no solo en el ámbito de la contaminación atmosférica sino de la modelización meteorológica en general.

En lo que respecta a su aplicación en la modelización de la calidad del aire como parte del sistema CALMET/CALPUFF, pueden encontrarse multitud de ejemplos de su aplicación usando medidas meteorológicas como datos de entrada (Villasenor et al., 2003; Protonotariou et al., 2004; Dresser y Huizer, 2011; Fishwick y Scorgie, 2011). Sin embargo, con la mejora de los modelos de pronóstico meteorológico también numerosos autores han aplicado el modelo CALMET alimentado con dichos modelos: acoplamientos MM5/CALMET (Chandrasekar et al., 2003; Lee et al., 2003; EnviroModeling, 2005; Truhetz et al., 2007; SENES, 2009) o MM5/CALMET/CALPUFF (NDDH, 2003; Lopez et al., 2005; Taseko, 2008; Yim et al., 2009; Cui et al., 2011; Curci et al., 2012; Ghannam y El-Fadel, 2013; Fonseca, 2013); en trabajos más recientes con WRF/CALMET (Whitford, 2009; Radonjic et al., 2010; BSU, 2010), WRF/CALMET/CALPUFF (Abdul-Wahab y Sappurd, 2011) y WRF/CALMET/CALGRID (Gualtieri et al., 2010). En algunos se experimentan diferentes variantes de acoplamiento o aplicación, como MM5/FDDA/CALMET (Wang et al., 2008), PSU/NCAR-MM5/FDDA/CALMET/CALPUFF (Song et al., 2008), WRF-NMM/CALMET/CALPUFF (Radonjic, 2005; Radonjic et al., 2011), MM5/CALMET/CAMx (Jackson et al., 2006; SDC, 2007), BOLAM21/CALMET/CALPUFF (Lonati et al., 2010), Eta/CALMET/CALPUFF (Poplawski et al., 2011) y RAMS-CALMET-CALPUFF (Valdenebro et al., 2013).

En particular, el tamaño de la región a estudiar determina el modelo a elegir. CALMET ha sido recomendado para estudios locales de corto y medio alcance. Ranzato et al. (2012) eligieron un dominio de $5 \times 5 \text{ km}^2$, pero otros autores trabajan en dominios de diferente extensión: BSU (2010), $6 \times 6 \text{ km}^2$; SENES (2009), $10 \times 10 \text{ km}^2$; Cui et al. (2011), $20 \times 20 \text{ km}^2$; Radonjic (2005), $27 \times 16 \text{ km}^2$; MacIntosh et al. (2010), $26 \times 26 \text{ km}^2$; RB (2005), $30 \times 30 \text{ km}^2$; Abdul-Wahab y Sappurd (2011), $32 \times 32 \text{ km}^2$; Radonjic et al. (2011), $30 \times 45 \text{ km}^2$; Dresser y Huizer (2011), $37,8 \times 40 \text{ km}^2$; Curci et al. (2012), $40 \times 40 \text{ km}^2$; EnviroModeling (2005), $55 \times 35 \text{ km}^2$; Ghannam y El-Fadel (2013), $50 \times 50 \text{ km}^2$; Taseko (2008) y Fonseca (2013), $60 \times 60 \text{ km}^2$ mientras que, Fishwick y Scorgie (2011) y Rincon de hoyos (2012), $70 \times 70 \text{ km}^2$.

Sin embargo, otros autores han aplicado el modelo CALMET en sus límites espaciales, como: Yim et al. (2009) y Wang et al. (2008), $100 \times 100 \text{ km}^2$; Lopez et al. (2005), $120 \times 120 \text{ km}^2$; Truhetz et al. (2007), $140 \times 70 \text{ km}^2$; Villasenor et al. (2003), $140 \times 160 \text{ km}^2$; Gualtieri et al. (2010), $184 \times 224 \text{ km}^2$; Poplawski et al. (2011), $200 \times 200 \text{ km}^2$; Chandrasekar et al. (2003), $300 \times 300 \text{ km}^2$; Nuñez (2004),

320x325 km²; Radonjic et al. (2011), 400x400 km²; Lee et al (2003), 560x570 km²; NDDH (2003) 640x460 km² y Jackson et al. (2006), 756x756 km². Deben considerarse de igual modo las experiencias en estudios regionales de Collazo (2011), 2780x2157 km² y Zhou et al. (2003), 3360x3360 km². Esto demuestra la capacidad del modelo para abordar problemas más allá de la escala espacial para la cual fue diseñado, gracias a su configuración flexible.

La resolución espacial de la malla aplicada en el modelo es un aspecto clave en la configuración del mismo, que depende de la resolución de las medidas o del modelo de pronóstico elegido, la topografía, las dimensiones del dominio de simulación y, por supuesto, las capacidades de cálculo disponibles. Existe por tanto una gran variedad de resoluciones aplicadas: En los ensayos de alta resolución de Poplawski et al. (2011), Radonjic et al. (2010), Yim et al. (2009), SENES (2009) y Ranzato et al. (2012) se escogieron celdas de 0,1 km; y en los de Dresser y Huizer (2011), Fishwick y Scorgie (2011), MacIntosh et al. (2010), Truhetz et al. (2007) y Cui et al. (2011), 0,2 km; Radonjic et al. (2011), 0,2 y 0.25 km; RB (2005), BSU (2010), Curci et al. (2012) y Valdenebro et al. (2013), 0,25 km; Ghannam y El-Fadel (2013) y EnviroModeling (2005), 0,5 km y, Song et al. (2008), Abdul-Wahab y Sappurd (2011) y Fonseca (2013), 1 km. Ya de resolución media, Lopez et al. (2005) y Protonotariou et al. (2004), 2 km; Lee et al. (2003), 3 km; NDDH (2003), 3, 5 y 10 km; Bellasio et al. (2005), Chandrasekar et al. (2003), Gualtieri et al. (2010), Jackson et al. (2006) y Wang et al. (2008), 4 km y, Villasenor et al. (2003) y Nuñez (2004), 5 km. Los valores más altos que se han publicado corresponden a Levy et al. (2002), 15 km y Zhou et al. (2003), 28 km.

Los periodos de simulación varían dependiendo del objetivo del estudio y también de la disponibilidad de medidas o pronósticos meteorológicos empleados como datos de entrada. Se distinguen los de corta duración, Bellasio et al. (2005), Song et al. (2008), Fishwick y Scorgie (2011) y Fonseca (2013), 24 h; Villasenor et al. (2003), 48 h; Wang et al. (2008), 60 h; Nuñez (2004), Radonjic (2005) y Jackson et al. (2006), 72 h; de media duración, Ghannam y El-Fadel (2013), de 7 a 46 d; Zhou et al. (2003) y Valdenebro et al. (2013), 10 d; Abdul-Wahab y Sappurd (2011), 21 d; Protonotariou et al. (2004), 25 d; Levy et al. (2002), 25 d; Radonjic et al. (2005), 1 mes; Gualtieri et al. (2010), 5 meses; Poplawski et al. (2011) y Ranzato et al. (2012), 6 meses; Dresser y Huizer (2011), 10 meses; y los de larga duración, que buscan una representatividad anual, como SENES (2009), RB (2005), Fishwick y Scorgie (2011), Lopez et al. (2005), Radonjic et al. (2010), Radonjic et al. (2011) y Curci et al. (2012), 1 año; Yim et al. (2009), 3 años y NDDH (2003), 1 y 4 años.

La mayoría de las experiencias mantienen el número de 10 niveles en altura recomendado en CALMET, (Zhou et al., 2003; Wang et al., 2008; Yim et al., 2009; SENES, 2009; Cui et al., 2011; Abdul-Wahab y Sappurd, 2011; Fonseca, 2013). Sin embargo, y dependiendo del objetivo del estudio, algunos lo disminuyen (Nuñez, 2004, 5; Lee et al., 2003, 6; NDDH, 2003, RB, 2005 y Curci et al., 2012, 8; Villasenor et al., 2003, 9) al no requerir un elevado detalle en la estructura

vertical, lo que permite alargar las simulaciones; otros lo aumentan (NDDH, 2003, Gualtieri et al., 2010 y Poplawski et al., 2011, 12; Jackson et al., 2006, 16) con el objetivo de asegurar una mejor descripción de la capa límite, especialmente en lo que afecta a la estabilidad atmosférica.

Debido a que CALMET tiene en cuenta los efectos del terreno ha sido ampliamente utilizado en zonas de terreno complejo (Ghannam y El-Fadel, 2013; Dresser y Huizer, 2011; Radonjic et al., 2010; Radonjic et al., 2011; Valdenebro et al., 2013), en este aspecto destaca el trabajo de Truhetz et al. (2007) sobre regiones alpinas. También diversos autores aprovechan la capacidad del modelo para estudiar los flujos atmosféricos en zonas costeras (Ghannam y El-Fadel, 2013). Así, Lonati et al. (2010) emplea CALMET para el estudio de la navegación de buques carboneros; mientras que Poplawski et al. (2011) estudia la navegación de cruceros, ambos en zonas portuarias. Por su parte, Indumati et al. (2009) estima las brisas marinas.

Por supuesto, por su gran extensión espacial, los estudios regionales (Zhou et al., 2003; Collazo, 2011) incluyen zonas de terreno complejo, industriales, costeras y urbanas, lo que añade complejidad a la configuración del modelo CALMET para alcanzar la mejor representación del flujo atmosférico sobre zonas tan diversas. El trabajo de Zhou sobre el sudeste de China es un ejemplo perfecto de ello.





2 Modelo meteorológico CALMET

CALMET (Scire et al., 2000a) es un modelo meteorológico que incluye un módulo de diagnóstico de campos de viento, que realiza un análisis objetivo y parametrizado de flujos en pendiente, efectos cinemáticos del terreno, efectos de bloqueo del terreno, mediante un procedimiento de minimización por divergencia; e incluye un módulo micrometeorológico de capa límite.

Acompañan a CALMET un conjunto de preprocesadores (Figura 2.1) que permiten dar el formato requerido a los ficheros y datos con que se ingesta el modelo.

El módulo de diagnóstico se ejecuta en dos etapas (Douglas y Kessler, 1988). En el primer paso, un campo de vientos inicial se ajusta por los efectos cinemáticos del terreno, los flujos en pendiente, y efectos de bloqueo del terreno. El segundo paso consiste en un procedimiento de análisis objetivo que introduce las medidas en el campo de vientos obtenido en el primer paso, para así obtener un campo de viento final.

El campo de vientos inicial se puede obtener por varias vías: interpolando los vientos de las estaciones de medida en superficie para los valores de la capa inferior, y los de radiosondeos para los valores en altura; o por la combinación de una extrapolación de ambos métodos de medida. En este último caso es posible darle diferente importancia relativa a las medidas en superficie según la altura de la capa. Otras alternativas son: utilizar campos de viento de modelos de pronóstico meteorológico o definirlos constantes en todo el dominio.

Originalmente, CALMET está diseñado para trabajar sólo con medidas de superficie y en altura. El modelo puede ser ingestado con medidas de velocidad del viento, dirección del viento, temperatura, cobertura nubosa, altura del cielo, presión superficial, humedad relativa y precipitación, para el caso de medidas en superficie; y perfiles de velocidad del viento, dirección del viento, temperatura, presión para el caso de medidas en altura.

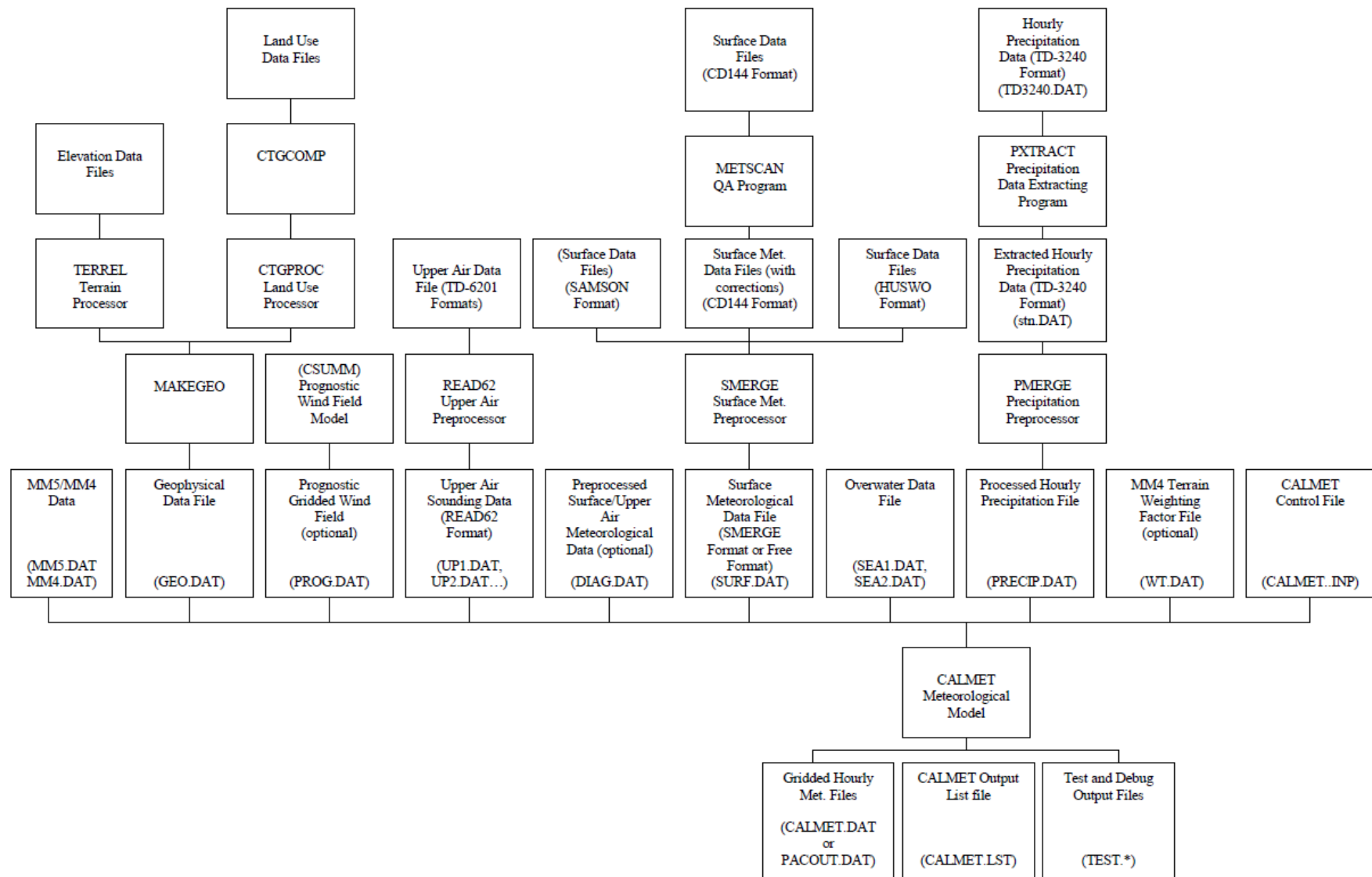


Figura 2.1 Diagrama de flujo de CALMET. Preprocesadores y ficheros (Scire et al., 2000a).

Los preprocesadores están diseñados para utilizar los datos en formatos estándar de diferentes servicios meteorológicos; sin embargo, también se pueden introducir en formato libre. Los datos inexistentes se generan mediante interpolación. Para algunos estudios específicos CALMET requiere la ingesta de medidas de precipitación o datos de estaciones marinas en boyas, con un tratamiento similar a los datos de estaciones en superficie.

Otro de los requisitos del modelo CALMET es contar con datos geofísicos de elevaciones del terreno y de las categorías de uso del suelo. Opcionalmente se pueden incluir la rugosidad de la superficie, el albedo, la relación de Bowen (Ec 2.37), el flujo de calor del suelo, el flujo de calor antropogénico, y el índice de vegetación de área foliar. Algunos de los preprocesadores del modelo están diseñados para convertir imágenes satelitales en ficheros con la información necesaria. El modelo CALMET también genera campos de precipitaciones, si son de interés.

2.1 Primer paso

2.1.1 Efectos cinemáticos del terreno

El ajuste de los efectos cinemáticos del terreno se realiza a través de la aproximación de Liu y Yocke (1980) que representa las modificaciones que sufre el campo de vientos inicial como consecuencia de las características propias de la topografía del terreno. Por una parte, calcula la componente vertical del viento producida por las elevaciones del terreno, mientras que las componentes horizontales de viento se evalúan mediante la aplicación de un esquema de minimización de la divergencia con el campo de vientos inicial. Este esquema se aplica iterativamente hasta que la divergencia tridimensional sea menor que un valor umbral.

$$w = (V \cdot \nabla h_t) e^{-kz} \quad (\text{Ec 2.1})$$

donde V es el viento promedio del dominio,
 h_t es la altura del terreno,
 k es un coeficiente dependiente de la estabilidad, y,
 z es la coordenada vertical.

El coeficiente k aumenta con el incremento de la estabilidad atmosférica.

$$k = \frac{N}{|V|} \quad (\text{Ec 2.2})$$

$$N = \left[\left(\frac{g}{\theta} \right) \frac{d\theta}{dz} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{Ec 2.3})$$

donde N es la frecuencia de Brunt-Vaisala (1/s) en una capa, desde el suelo hasta una altura determinada,
 θ es la temperatura potencial (K), y,
 g es la aceleración de la gravedad.

2.1.2 Flujos en pendiente

La evaluación de los flujos en pendiente se basa en la formulación de Mahrt (1982) que tiene en cuenta el rozamiento con la superficie y el arrastre en la parte superior de la capa de flujo. Esta ecuación depende de la pendiente del terreno, la distancia a la cima y el flujo local de calor sensible. El espesor de la capa de flujo en pendiente varía con la elevación de la base a la cima.

Para el cálculo se asume un esquema empírico para determinar la magnitud de los flujos en pendiente en terrenos complejos. Se considera además que la dirección del flujo está orientada en la dirección de drenaje. Luego, se suma el vector de flujo resultante para lograr el ajuste.

$$u_1' = u_1 + u_s \quad (\text{Ec 2.4})$$

$$v_1' = v_1 + v_s \quad (\text{Ec 2.5})$$

donde (u_1, v_1) son las componentes del viento antes del ajuste,
 (u_s, v_s) son las componentes del flujo en pendiente, y,
 (u_1', v_1') son las componentes del viento después del ajuste.

La parametrización de Mahr asume que el flujo es estacionario, de profundidad y pendiente del terreno constantes; no se tienen en cuenta además, los efectos de Coriolis ni las componentes transversales. La velocidad de flujo en pendientes puede expresarse entonces como:

$$S = S_e \left[1 - e^{-\frac{x}{L_e}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{Ec 2.6})$$

$$S_e = \left[\frac{hg \frac{\Delta\theta}{\theta} \text{sen}\alpha}{C_D + k} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{Ec 2.7})$$

$$L_e = \frac{h}{C_D + k} \quad (\text{Ec 2.8})$$

donde S_e es la velocidad de equilibrio del flujo en pendiente,
 L_e es la escala de longitud en equilibrio,
 x es la distancia a la cima,
 $\Delta\theta$ es el déficit de temperatura potencial con respecto al ambiente,
 θ es la temperatura potencial del ambiente,
 C_D es el coeficiente de arrastre del terreno,
 h es la profundidad del flujo,
 α es el ángulo de inclinación del terreno con respecto a la horizontal, y,
 k es el coeficiente de arrastre en la cara superior de la capa de flujo.

La velocidad S_e representa el límite superior de la velocidad del flujo que se alcanza asintóticamente a grandes distancias de la cima. La escala de longitud de equilibrio, L_e , es la distancia a la que la velocidad del flujo en pendiente alcanza el 80% de la solución de equilibrio. A pequeñas distancias x , el flujo está en régimen de gravedad-advectiva descrito por Mahrt (1982) donde el flujo se acelera por flotabilidad sin oposición significativa.

A medida que el flujo desciende por la pendiente se enfría por el flujo local de calor sensible. El déficit de temperatura potencial, $\Delta\theta$, es función de la magnitud del flujo local de calor sensible en la superficie, Q_h , y la distancia a la cima, x . Teniendo en cuenta que h y Q_h se consideran constantes (Briggs, 1979), el balance de calor requiere que:

$$\frac{d(h\Delta\theta)}{dt} = \frac{Q_h\theta}{\rho c_p T} \quad (\text{Ec 2.9})$$

Considerando entonces que $\frac{d}{dt} = \frac{Sd}{dx}$ e integrando a lo largo de la pendiente se obtiene:

$$Sh\Delta\theta = \frac{Q_h\theta x}{\rho c_p T} \quad (\text{Ec 2.10})$$

Sustituyendo Ec 2.10 en Ec 2.7, y luego en Ec 2.6, se obtiene la siguiente ecuación para la velocidad de flujo en pendiente:

$$S = \left[\frac{Q_h g x \cdot \text{sen} \alpha}{(\rho c_p T)(C_D + k)} \right]^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{-\frac{x}{L_e}} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (\text{Ec 2.11})$$

Para flujos descendientes, se encuentran valores de $C_D = k = 4 \cdot 10^{-2}$ en zonas cubiertas por vegetación (Briggs, 1981, Mahrt, 1982, Horst y Doran, 1986).

Por otra parte, el espesor de la capa de flujo en pendiente se observa que es aproximadamente el 5 % de la caída de la elevación de la cima (ΔZ) (Horst y Doran, 1986).

$$h = 0,05\Delta Z \quad (\text{Ec 2.12})$$

Este valor le permite a CALMET determinar cuales serán las capas afectadas por flujos en pendientes. Los vientos de ladera no se restringen a la primera capa, pueden afectar a las capas superiores dependiendo de la profundidad del flujo.

Finalmente, con el fin de evitar velocidades en pendiente demasiado grandes lejos de la cima, el ángulo de inclinación está limitado por el ángulo medio de inclinación de la cima.

Los flujos ascendentes han sido poco estudiados. Dependen más de la estratificación de la capa superficial y no se aceleran tan rápido como los descendientes. Para los flujos ascendentes, se seleccionan grandes valores de $(C_D + k) \sim 1$ para tener en cuenta la resistencia debido a la estratificación. Estos valores de C_D se observan en zonas cubiertas (Briggs, 1981). Quedaría entonces la velocidad:

$$S \cong \left[\frac{Q_h g x \cdot \text{sen} \alpha}{(\rho c_p T)(C_D + k)} \right]^{\frac{1}{3}} \cong \left[\frac{Q_h g \Delta Z}{\rho c_p T} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (\text{Ec 2.13})$$

donde ΔZ es el incremento de la elevación desde el fondo del valle, y, x es la distancia desde el fondo del valle.

2.1.3 Efectos de bloqueo

Los efectos termodinámicos de bloqueo del terreno se evalúan en términos del número de Froude local (Allwine y Whiteman, 1985).

$$Fr = \frac{V}{N\Delta h_t} \quad (\text{Ec 2.14})$$

$$\Delta h_t = (h_{\max})_{ij} - (z)_{ijk} \quad (\text{Ec 2.15})$$

donde Fr es el número de Froude local,
 V es la velocidad en el centro de la celda,
 N es la frecuencia de Brunt-Vaisala (Ec 2.3),
 Δh_t es la altura efectiva del obstáculo,
 $(h_{\max})_{ij}$ es la máxima altura del terreno en la celda, dentro del área de influencia desde el centro de la celda, y,
 $(z)_{ijk}$ es la altura sobre el terreno del centro de la celda del nivel k.

El número de Froude se calcula para cada celda. Si el número de Froude de una celda específica es menor que el valor crítico y el viento tiene una componente dirigida hacia arriba, la dirección del viento se ajusta para que sea tangente al terreno. Si es mayor, entonces no se realiza ningún ajuste; mientras que la velocidad del viento se mantiene invariable.

2.2 Segundo paso

El segundo paso del procedimiento consiste en la introducción de medidas en el campo de vientos del primer paso, a través de un procedimiento de análisis objetivo que interpola las medidas por el método de la inversa del cuadrado de la distancia en los alrededores de las estaciones. En regiones del dominio sin ninguna medida predominará el campo de viento del paso 1. El resultado de este paso puede, opcionalmente, suavizarse por el método de O'Brien (1970), y por minimización de la divergencia.

2.2.1 Interpolación

Las medidas introducidas en los campos de vientos resultantes del primer paso se interpolan por el inverso de la distancia:

$$(u, v)'_2 = \frac{(u, v)_1 + \sum_k \frac{(u_{obs}, v_{obs})_k}{R_k^2}}{\frac{1}{R^2} + \sum_k \frac{1}{R_k^2}} \quad (\text{Ec 2.16})$$

donde $(u_{obs}, v_{obs})_k$ son las componentes del viento observadas en la estación k,
 $(u, v)_1$ son las componentes del viento resultante del primer paso para una celda específica,
 $(u, v)'_2$ son las componentes iniciales del segundo paso,
 R_k es la distancia de la estación k al centro de la celda, y,
 R es el parámetro de peso para el viento del primer paso.

Este esquema permite dar mayor peso a las medidas en el entorno de la estación correspondiente, mientras que para el primer paso predomina el viento del campo sobre las regiones que carecen de medidas. Este procedimiento se aplica sobre cada capa vertical de manera independiente; pueden seleccionarse incluso, solo las capas más bajas.

El parámetro R determina la ponderación relativa al campo de vientos del primer paso. Sus diferentes valores se utilizan en la capa superficial ($R1$), y en las capas superiores ($R2$).

Si la distancia de la estación a la celda, excede el valor de alguno de los radios máximos de influencia previamente seleccionados, entonces se excluye la interpolación para esa celda. CALMET permite definir tres radios máximos de influencia:

- Radio de influencia sobre la capa superficial (RMAX1)
- Radio de influencia en altura sobre celdas terrestres (RMAX2)
- Radio de influencia sobre el agua (RMAX3)

Como solución más simple, el modelo permite seleccionar a RMAX1 para todas las celdas del dominio e ignorar los otros dos parámetros.

CALMET también permite trabajar con un radio variable de influencia, de manera que se utiliza la estación con medidas válidas más cercana a una celda que esté fuera del radio de influencia especificado para cualquiera de las estaciones. Debe prestarse especial atención a la hora de seleccionarse el radio de influencia, de manera que cada celda del dominio se encuentre, al menos, dentro del radio de influencia de una estación.

Se puede además limitar el número de estaciones que se incluirán en la interpolación, mediante la definición de una matriz de "NZ" elementos, uno para cada capa vertical, que especifican el número máximo de estaciones que pueden ser utilizadas en la interpolación en una celda dada. Si el número de estaciones dentro del radio de influencia es mayor que el límite fijado en la matriz, entonces solo se utilizarán las estaciones más cercanas, hasta dicho límite.

Finalmente, la región de influencia de una estación de medida se puede limitar también con el uso de "barreras". Estas consisten en segmentos que definen los límites de la región que puede ser influida por una estación de medida particular. Por ejemplo, se puede definir una barrera para evitar que los datos procedentes de una estación en un valle bien delimitado influyan fuera de la región de dicho valle.

2.2.1.1 Extrapolación vertical

Antes de realizar la interpolación horizontal de los vientos, las medidas en superficie en cada estación pueden ser extrapoladas a las capas superiores, de tres modos diferentes: utilizando una ecuación potencial, factores de escala definidos por el usuario o la teoría de similitud. El tipo de extrapolación se define en el modelo mediante un parámetro que es también un indicador de la influencia de los datos en altura sobre la superficie.

La extrapolación vertical de las medidas en superficie se omite si la estación de superficie está cerca de una localización con datos válidos en altura. CALMET incluye una variable que define la distancia mínima necesaria para que la extrapolación tenga lugar.

La siguiente ecuación potencial se utiliza para extrapolar los vientos de la capa superficial a las capas superiores, para cada componente horizontal, u , v :

$$u_z = u_m \cdot (z / z_m)^P \quad (\text{Ec 2.17})$$

donde z es la altura del punto medio de la celda,
 z_m es la altura de la estación de superficie,
 u_m es la componente u de la medida de velocidad de viento,
 u_z es la componente u de la velocidad de viento extrapolada a la altura z , y,
 P es el exponente.

Para la componente v se utiliza una ecuación análoga.

En esta ecuación potencial, CALMET utiliza los exponentes del modelo DWM de Douglas y Kessler (1988) donde P es igual a 0,143 sobre la tierra, y a 0,286 sobre el agua donde la elevación del terreno se considera cero.

Cuando se utilizan factores de escala definidos por el usuario, la extrapolación se realiza mediante la expresión:

$$u_i = u_1 \cdot FEXTRP_i \quad (\text{Ec 2.18})$$

donde i es el número de la capa,
 u_1 es la componente u de la velocidad de viento de la capa 1,
 u_i es la componente u de la velocidad de viento de la capa i y,
 $FEXTRP_i$ es el factor de escala especificado por el usuario para la capa i .

Para la componente v se utiliza una ecuación similar.

El tercer método de extrapolación se basa en los resultados de van Ulden y Holtslag (1985). Ellos utilizaron la teoría de la similitud con medidas para extender la influencia de la velocidad y la dirección del viento en la superficie sobre las capas de aire superiores. La velocidad y la dirección del viento son alteradas en cada capa hasta 200 metros sobre el nivel del suelo, o hasta la altura de la capa de mezcla si esta es mayor. El cambio del viento con la altura viene dado por:

$$D(z) / D(h) = d_1 \left(1 - e^{-\frac{d_2 z}{h}} \right) \quad (\text{Ec 2.19})$$

donde $D(z)$ es el ángulo de giro, a la altura z del centro de la celda,
 $D(h)$ es el ángulo de giro, a la altura de referencia h ,
 d_1 es una constante empírica de valor 1,58, y,
 d_2 es una constante empírica de valor 1,0.

2.2.2 Brisas costeras o de aguas interiores

Por las singularidades que presentan las interacciones agua-aire y su influencia sobre el flujo atmosférico, el modelo CALMET permite definir una región de brisas costeras o cercanas a lagos en el que los vientos en la superficie se calculan por separado y reemplazan a los originales. Para obtener buenos resultados con esta opción se requiere de una red de observación completa dentro de la región definida. Sólo se consideran las estaciones dentro de la región. Los vientos en cada celda dentro de la región se calculan mediante interpolación por el inverso del cuadrado de la distancia. Esta distancia se define como la diferencia entre la distancia de la celda a la línea de costa y la de la estación meteorológica a la línea de costa. De esta forma, la distancia real entre la celda y la estación no es importante, sólo sus distancias relativas a la masa de agua/línea de costa.

2.2.3 Suavizamiento

Después de la adición de medidas al resultado del primer paso, el nuevo resultado se debe suavizar con el objetivo de reducir las discontinuidades producidas. La fórmula de suavizamiento aplicada es, para la componente horizontal u :

$$(u_{i,j})'' = 0,5u_{i,j} + 0,125(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1}) \quad (\text{Ec 2.20})$$

donde $(u_{i,j})''$ es la componente u del viento después del suavizado, en la celda (i,j) , y,
 $(u_{i,j})$ es la componente u del viento antes del suavizado, en la celda (i,j) (Ec 2.16).

Para la componente v se utiliza una ecuación análoga.

El modelo CALMET permite definir el número máximo de etapas de suavizado que se utilizan en cada capa. Para los vientos de la capa superficial, se recomienda, un máximo predeterminado de dos etapas, pero se pueden especificar más. El suavizado puede ser obviado en todas las capas; así, si se selecciona la opción brisa de lago, los vientos dentro de las regiones especificadas no se suavizan.

2.2.3.1 Cálculo de las velocidades verticales

CALMET dispone de dos opciones para el cálculo de las velocidades verticales. El primer método las calcula directamente a partir del balance global de materia incompresible, utilizando las componentes horizontales del viento suavizadas. El segundo ajusta el perfil de velocidad vertical,

de manera que los valores en la parte superior del dominio del modelo sean cero. Las componentes horizontales del viento serán entonces reajustadas de modo que sean coherentes con el nuevo perfil.

La velocidad vertical inicial se determina a partir de la ecuación de conservación de la masa incompresible, o condición de divergencia nula:

$$\frac{du''}{dx} + \frac{dv''}{dy} + \frac{dw_1}{dz} = 0 \quad (\text{Ec 2.21})$$

donde w_1 es la velocidad vertical en la superficie, y, u'', v'' son las componentes horizontales de la velocidad después del suavizado.

Con este método no se modifican las componentes horizontales del viento.

Godden y Lurmann (1983) aclaran que este procedimiento puede conducir a velocidades verticales demasiado grandes en las capas superiores del dominio. A fin de evitar este problema, O'Brien (1970) sugiere:

$$w_2(z) = w_1(z) - \left(\frac{z}{z_{top}} \right) w_1(z = z_{top}) \quad (\text{Ec 2.22})$$

donde w_1 es la velocidad vertical en la superficie, y, u'', v'' son las componentes horizontales de la velocidad después del suavizado.

El procedimiento de O'Brien establece que la velocidad vertical en la capa superior del dominio debe ser cero. Debido a que los vientos horizontales no cumplen el balance de material global con estas velocidades verticales ajustadas, las componentes horizontales tienen que ser reajustadas mediante la minimización de la divergencia descrita en la sección 2.3. Este nuevo procedimiento de minimización reajusta los componentes u y v dentro de un umbral especificado por el usuario, mientras se mantiene el campo de velocidad vertical ($w = w_2$) constante.

Hay situaciones en las que el uso del procedimiento de O'Brien no se justifica. Por ejemplo, si la parte superior del dominio está dentro de una zona de convergencia de brisas marinas, las grandes velocidades verticales resultantes de la Ec 2.21 pueden ser realistas.

2.3 Minimización tridimensional de la divergencia

La divergencia tridimensional del campo de viento se reduce al mínimo por el procedimiento descrito por Goodin et al. (1980). Este procedimiento ajusta iterativamente las componentes horizontales del viento (u, v) para un campo de velocidad vertical fijo de manera que en cada punto del dominio, la divergencia sea menor que un valor máximo especificado.

$$\frac{du}{dx} + \frac{dv}{dy} + \frac{dw}{dz} = \varepsilon \quad (\text{Ec 2.23})$$

donde u, v son las componentes horizontales del viento,
 w es la velocidad vertical en la superficie, y,
 ε es la divergencia máxima permitida.

En CALMET, se definen las componentes horizontales del viento en el centro de la celda mientras que las velocidades verticales se definen en las caras. Por lo tanto, la divergencia D en punto de la malla (i, j, k) es:

$$D_{ijk} = \frac{w_{i,j,k+1/2} - w_{i,j,k-1/2}}{z_{k+1/2} - z_{k-1/2}} + \frac{u_{i+1,j,k} - u_{i-1,j,k}}{2\Delta x} + \frac{v_{i,j+1,k} - v_{i,j-1,k}}{2\Delta y} \quad (\text{Ec 2.24})$$

donde $\Delta x, \Delta y$ son las dimensiones de la celda en la dirección x y y respectivamente.

La divergencia se calcula para cada punto del dominio. Las componentes del viento u y v en las celdas cercanas se ajustan de modo que la divergencia en la celda sea cero. Los ajustes se aplican como sigue:

$$(u_{nueva})_{i+1,j,k} = u_{i+1,j,k} + u_{adj} \quad (\text{Ec 2.25})$$

$$(u_{nueva})_{i-1,j,k} = u_{i-1,j,k} - u_{adj} \quad (\text{Ec 2.26})$$

$$(v_{nueva})_{i,j+1,k} = v_{i,j+1,k} + v_{adj} \quad (\text{Ec 2.27})$$

$$(v_{nueva})_{i,j-1,k} = v_{i,j-1,k} - v_{adj} \quad (\text{Ec 2.28})$$

donde las velocidades de ajuste u_{adj}, v_{adj} son:

$$u_{adj} = \frac{-D_{ijk} \Delta x}{2} \quad (\text{Ec 2.29})$$

$$v_{adj} = \frac{-D_{ijk} \Delta y}{2} \quad (\text{Ec 2.30})$$

Cada vez que se elimina la divergencia en una celda particular se genera divergencia en los puntos circundantes. Sin embargo, aplicando el procedimiento de manera iterativa la divergencia se reduce gradualmente por debajo del valor umbral, ϵ , en todo el dominio.

2.4 Acoplamiento de modelos de pronóstico

CALMET tiene una opción para permitir la ingesta de campos de viento generados por los modelos de pronóstico MM4 (Anthes, et al., 1987), MM5, CSUMM (Pielke, R., 1974) o WRF. Esta opción permite que CALMET se ejecute con una mayor resolución que la usada en el modelo de pronóstico, además de contemplar la influencia de fenómenos locales sobre el viento, tales como la circulación de brisas marinas o la topografía compleja que no siempre pueden ser medidas en las estaciones de superficie.

Si se utilizan los datos de MM4/MM5/WRF como campo de vientos inicial, estos se interpolan a la resolución de CALMET, que debe ser igual o menor. El módulo de diagnóstico de CALMET hará entonces los ajustes antes mencionados. También pudieran utilizarse los datos de MM4/MM5/WRF directamente como campos de viento resultantes de la etapa 1. De esta manera, solo se ajustarían a partir de medidas, no se tendrían en cuenta los ajustes debidos a la influencia

del terreno. Una tercera opción sería considerar los resultados de MM4/MM5/WRF en las celdas de la malla como medidas en el procedimiento de análisis objetivo de CALMET.

Siguiendo la primera alternativa, el primer paso es interpolar los vientos del modelo de pronóstico a las celdas de la malla de CALMET. Para la componente vertical se realiza una interpolación lineal en tanto que para las componentes horizontales se sigue el inverso de la distancia al cuadrado ($1/R^2$).

En el segundo paso se incorporan las observaciones, lo que permite recalculer las componentes u, v sobre la malla CALMET mediante la siguiente expresión:

$$(u, v)_2 = \frac{\frac{(u, v)_{prog}}{R_{prog}^2} + \sum_k \frac{(u_{obs}, v_{obs})_k}{R_k^2}}{\frac{1}{R_{prog}^2} + \sum_k \frac{1}{R_k^2}} \quad (Ec 2.31)$$

donde $(u, v)_{prog}$ son las componentes del viento generadas por el modelo de pronóstico, y, R_{prog} es el parámetro de peso para el viento del modelo de pronóstico.

El campo de vientos resultante se somete al procedimiento de análisis objetivo considerando las medidas disponibles. De este modo, los vientos del modelo de pronóstico quedan reajustados por los efectos de la mayor resolución del terreno ahora considerado y por las medidas disponibles.

En la segunda opción, los vientos de pronóstico se interpolan al dominio CALMET y luego se utilizan directamente en el segundo paso, sin reajustes por el terreno, por lo que se supone que los valores procedentes del modelo de pronóstico ya incorporan los efectos del terreno más significativos. Estos vientos interpolados se combinan con las medidas usando el procedimiento de análisis objetivo.

En la tercera opción, los vientos del modelo de pronóstico son tratados exactamente de la misma manera que las observaciones reales, a modo de pseudomedidas. Si se selecciona la opción de diagnostico, se realiza entonces el reajuste por los efectos del terreno. Los resultados se someten al análisis objetivo, empleando tanto las medidas reales como las pseudomedidas. También se puede obviar el reajuste por el terreno y realizar solamente el análisis objetivo, en cuyo caso tanto las medidas como las pseudomedidas tendrán un peso elevado en el resultado final. Esta opción de cálculo tiene el inconveniente de que no se distingue la incertidumbre relativa de los resultados del modelo de pronóstico respecto de las medidas.

Así, la representatividad de las medidas para una celda de una malla de alta resolución, en comparación con los campos de vientos de un modelo de pronóstico de baja resolución, dependen de factores tales como la altura sobre la superficie del terreno, las variaciones internas dentro de la malla y la relación entre las diferentes resoluciones de los modelos. Por otro lado, una medida

puntual, instantánea, en una celda de gran tamaño, no representa necesariamente el flujo de viento para esa resolución tan baja así como tampoco el del modelo de pronóstico. Por lo tanto, es necesario un factor de ponderación que tenga en cuenta las variaciones del terreno dentro de cada celda del dominio, como se expone en el siguiente apartado.

2.4.1 Factor de ponderación del terreno

Aunque se espera que el uso de modelos de pronóstico pueda mejorar los resultados del modelo de diagnóstico, en realidad esto tiene sus limitaciones. Los primeros no pueden producir vientos representativos cerca de la superficie debido a la baja resolución de los datos del terreno y a las grandes escalas que habitualmente se utilizan en sus simulaciones. Para estos casos, las medidas tienen más peso que los modelos de pronóstico en la interpolación de los vientos realizada por los modelos de diagnóstico. El método empleado para la ponderación implica:

1. calcular la desviación estándar del promedio de las elevaciones del terreno, σ_t ,
2. definir un factor W_o en función de σ_t ,
3. ponderar las medidas mediante W_o , y los campos de vientos del modelo de pronóstico mediante $(1-W_o)$, en el proceso de interpolación.

Para obtener los factores de ponderación, primero se deben cuantificar las diferencias del terreno que existen entre las dos resoluciones utilizadas. Después, se calcula la raíz cuadrática media (*RMS*) de la diferencia entre el terreno original y el representado por el modelo de pronóstico de baja resolución. La diferencia, $(h_{ori}-h_{crs})$, debe ser calculada con una resolución igual a la de los datos de terreno originales, donde h_{ori} es la elevación de un punto contenida en el archivo original de terreno y h_{crs} el resultado obtenido por interpolación bilineal en la misma ubicación. Se debe utilizar un procedimiento similar para calcular el $RMS(h_{fin}-h_{crs})$, donde h_{fin} son las elevaciones del terreno empleadas en los modelos de diagnóstico de alta resolución. La diferencia $(h_{fin}-h_{crs})$ se puede obtener en los mismos lugares utilizados para $(h_{ori}-h_{crs})$, usando igualmente interpolación bilineal para ambas resoluciones. Si se utiliza la misma celda para ambos modelos, $RMS(h_{fin}-h_{crs})$ sería cero.

La Ec 2.32 permite ajustar los vientos del modelo de pronóstico cerca de la superficie:

$$W_o = W_z W_s \quad (\text{Ec 2.32})$$

donde W_s es el factor de peso cerca de la superficie, y,
 W_z es un modificador dependiente de la altura.

W_z tiende a cero a grandes alturas, o si no hay variaciones del terreno dentro de la celda (si el terreno es plano). Para una capa específica debe usarse la elevación media de la capa sobre la superficie, z_i , y el $RMS(h_{fin}-h_{crs})$, denotada como RMS_{fin} ,

$$W_{z_i} = \left[\text{MIN} \left(RMS_{fin} / 2z_i, 1, 0 \right) \right]^2 \quad (\text{Ec 2.33})$$

donde *MIN* es la función que devuelve el mínimo de los valores indicados.

Cuando el terreno generado por el modelo de diagnóstico de alta resolución, en una celda determinada, tiene un RMS_{fin} menor que la altura de la capa, W_{zi} será menor que 1, lo que reducirá la magnitud de W_o ; esto significa que para esa celda, el terreno es menos importante que para cualquier otra más cercana a la superficie. En las capas superiores, W_{zi} se aproxima a cero, lo que da mas peso a los campos de vientos del modelo de pronóstico sobre el modelo de diagnóstico. Si la resolución es la misma para ambos modelos, $RMS_{fin}=0$ y $W_z=0$, por lo que los vientos del modelo de pronóstico se utilizan con preferencia a las medidas en todos los niveles.

Cerca de la superficie, W_s , hace uso de RMS_{fin} y RMS_{ori} , donde:

$$RMS_{ori} = RMS(h_{ori} - h_{crs}) \quad (\text{Ec 2.34})$$

La resolución del dominio de baja resolución, RMS_{ori} , se utiliza para generar el terreno de alta resolución. La relación RMS_{fin}/RMS_{ori} tiene un rango entre 0 y 1, siempre que RMS_{ori} no sea cero. En el caso que RMS_{fin} sea cero, o cuando RMS_{fin}/RMS_{ori} es casi cero, entonces W_s debe ser casi cero, lo que indica que los valores del modelo de pronóstico se utilizan con preferencia a las medidas (es decir, las medidas ya han sido tenidas en cuenta dentro del modelo de pronóstico). Por el contrario, cuando RMS_{fin}/RMS_{ori} se aproxima a 1, las variaciones locales del terreno dentro de la celda podrían ser importantes, y las medidas tendrían en ese caso más significación. Por lo tanto, W_s será:

$$W_s = \left(\frac{RMS_{fin}}{RMS_{ori} + RMS_o} \right)^n \quad (\text{Ec 2.35})$$

Para valores de n mayores que 1, se obtienen W_s más pequeños, lo que favorece a los vientos del modelo de pronóstico frente a las medidas. Para n menor que 1, ocurre lo contrario.

El RMS_o se añade a RMS_{ori} en el denominador para evitar un problema que surge con variaciones pequeñas del terreno. W_s puede ser casi 1 (énfasis en las medidas) en algunos casos en los que las variaciones del terreno son lo suficientemente pequeñas, lo que favorece a los vientos del modelo de pronóstico en la capa superficial, a pesar de W_s . En este caso se considera que las variaciones del terreno son significativas. Es decir, el denominador nunca será menor que el valor especificado, RMS_o . Debido a que el centro de la capa superficial tiene una altura de 10 m, se considera esta como significativa. En este caso, siempre que el modelo de diagnóstico tenga mayor resolución que el de pronóstico se favorecerá a los vientos de este último frente a las medidas.

Los tres métodos de asimilación del campo de vientos de pronóstico en CALMET fueron examinados en el análisis de sensibilidad publicado por Scire et al. (1996) empleando el método MM4-FDDA (Mesoscale Meteorological Model, Version 4 with Four Dimensional Data Assimilation) de la siguiente manera:

Opción 1: MM4-FDDA como viento inicial

- Sin ponderación por W_o

Opción 2: MM4-FDDA como resultado del primer paso

- W_o se utiliza para ponderar medidas
- Los vientos del primer paso son ponderados con el factor $(1-W_o)$

Opción 3: MM4-FDDA como medidas

- W_o se utiliza para ponderar las medidas
- Los vientos del MM4-FDDA son ponderados con el factor $(1-W_o)$

En el primer caso no se utiliza el factor de ponderación del terreno debido a que los vientos del MM4-FDDA son reajustados a la resolución del terreno del modelo de diagnóstico; mientras que en los otros dos casos, los vientos del MM4-FDDA no se ajustan por los efectos del terreno.

2.5 Modelo micrometeorológico. Flujos superficiales de calor y de cantidad de movimiento

El uso de valores adecuados para los parámetros que definen la capa límite atmosférica (Planetary Boundary Layer, *PBL*) suele mejorar la calidad de las simulaciones de dispersión (Briggs, 1985; van Ulden y Holtslag, 1985; Weil, 1985). Los principales parámetros que describen la estructura de la capa límite son el flujo de calor superficial (Q_h), flujo superficial de cantidad de movimiento (ρu_*^2), y la altura de la capa límite (h). De estos se derivan otros parámetros importantes como la velocidad de fricción (u_*), la escala de velocidad convectiva (w_*) y la longitud de Monin-Obukhov (L).

Los estudios de Hanna et al. (1986) probaron que los métodos del balance de energía son superiores a los métodos basados en perfiles, debido a la sensibilidad de estos a pequeños errores en la medición de la temperatura. Sin embargo, esto no se aplica a la capa límite sobre superficies marinas, donde se recomienda un método de perfil en función de la diferencia de temperatura aire-mar.

Por ello, el modelo CALMET tiene dos esquemas para calcular la altura de la capa límite, que diferencian las celdas según estén sobre tierra o sobre agua. Sobre superficies terrestres se utiliza el método de balance de energía de Holtslag y van Ulden (1983) donde la altura de la capa de mezcla se determina a partir de los flujos calculados y la temperatura medida por radiosondeos,

utilizando una modificación de Maul (1980) al método de Carson (1973). Por el contrario, sobre superficies marinas se utiliza la técnica de los perfiles (sección 2.5.2).

2.5.1 Capa límite atmosférica sobre tierra

El modelo micrometeorológico de CALMET utiliza sobre superficies terrestres un método de balance de energía (Holtslag y van Ulden, 1983) que puede ser formulado como:

$$Q_* + Q_f = Q_h + Q_e + Q_g \quad (\text{Ec 2.36})$$

donde Q_* es la radiación neta (W/m^2),
 Q_f es el flujo de calor antropogénico (W/m^2),
 Q_h es el flujo de calor sensible (W/m^2),
 Q_e es el flujo de calor latente (W/m^2), y,
 Q_g es el término asociado al flujo de calor acumulado en el suelo (W/m^2).

La relación entre el flujo de calor sensible y flujo de calor latente se define como la relación de Bowen.

$$B = \frac{Q_h}{Q_e} \quad (\text{Ec 2.37})$$

El modelo calcula la relación de Bowen en cada celda. Esta relación es importante para determinar el grado de turbulencia convectiva, debido a que representa la distribución de la energía disponible en flujo de calor sensible y latente. Los valores de B van desde 0,1 en los cuerpos de agua, a 10 para desiertos.

El flujo de calor en el suelo natural o sobre materiales de construcción, Q_g , se determina durante el día y es función de la radiación neta, Q_* (Oke, 1978; Holtslag y van Ulden, 1983):

$$Q_g = c_g Q_* \quad (\text{Ec 2.38})$$

donde c_g es una constante que depende de las propiedades del terreno.

Oke (1982) sugiere valores de c_g de 0,05-0,25, para las zonas rurales y 0,25-0,30 para las urbanas. Los valores más grandes para las zonas urbanas reflejan las mayores conductividad térmica y capacidad calorífica de los materiales de construcción. Holtslag y van Ulden (1983) utilizan un valor de 0,1 para una superficie cubierta de pastos.

El flujo de calor antropogénico, Q_f , es una función de la densidad de población y el consumo de energía por habitante. Oke (1978) también resume los valores promedio anuales y estacionales de varias zonas urbanas. Por lo general Q_f es pequeño en comparación con los otros términos. Independientemente de ello debe ser considerado.

La radiación neta, Q_* , es el resultado de la radiación entrante (de onda corta y larga) y la radiación saliente (onda larga). Según Holtslag y van Ulden (1983) y Lansberg (1981) puede expresarse como:

$$Q_* = Q_{sw}(1-A) + Q_{1w-d} - Q_{1w-u} \quad (\text{Ec 2.39})$$

donde Q_{sw} es la radiación de onda corta incidente, formada por la suma de la radiación solar directa, Q_{sw-s} , y la radiación difusa, Q_{sw-d} (W/m^2),
 A es el albedo de la superficie,
 Q_{1w-d} es la radiación de onda larga incidente de la atmósfera (W/m^2), y,
 Q_{1w-u} es la radiación de onda larga emitida por la superficie (W/m^2).

Se pueden definir así los diferentes términos de la Ec 2.39, dando lugar a:

$$Q_* = \frac{Q_{sw}(1-A) + c_1 T^6 - \sigma T^4 + c_2 N}{1 + c_3} \quad (\text{Ec 2.40})$$

$$Q_{sw} = (a_1 \sin \varphi + a_2) (1 + b_1 N^{b_2}) \quad (\text{Ec 2.41})$$

donde T es la temperatura del aire (K),
 σ es la constante de Stefan-Boltzmann,
 N es la fracción de cielo cubierto, y,
 φ es ángulo de elevación solar.

En estas expresiones también se incluye la reducción de la radiación solar incidente debido a la presencia de nubes, mediante la fracción de cielo cubierto, N . Por su parte, los valores para las constantes empíricas c_1 , c_2 , c_3 , a_1 , a_2 , b_1 , b_2 se muestran en la Tabla 2.1. El ángulo de elevación solar, φ , se calcula usando las ecuaciones descritas por Scire et al., 1984a.

Tabla 2.1 Constantes empíricas para el cálculo de la radiación neta (Holtslag y van Ulden, 1983)

Constante	Valor
c_1	$5,31 \cdot 10^{-13} \text{ W/m}^2/\text{K}^6$
c_2	60 W/m^2
c_3	0,12
a_1	990 W/m^2
a_2	30 W/m^2
b_1	0,75
b_2	3,4

Combinando de la Ec 2.36 a la Ec 2.41, se obtiene que el flujo de calor sensible durante el día, que puede ser expresado como:

$$Q_h = \frac{B}{1+B} [Q_* (1 - c_g) + Q_f] \quad (\text{Ec 2.42})$$

Una vez conocido el flujo de calor sensible, se calcula iterativamente la longitud de Monin-Obukhov y la velocidad de fricción con el terreno según:

$$u_* = \frac{ku}{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \Psi_m\left(\frac{z}{L}\right) + \Psi_m\left(\frac{z_0}{L}\right)} \quad (\text{Ec 2.43})$$

donde z_0 es la longitud de la superficie rugosa,
 Ψ es la una función de corrección de estabilidad (Dyer y Hicks, 1970),
 k es la constante de von Karman, 0,4, y,
 u es la velocidad del viento a la altura z .

La longitud de Monin-Obukhov se define entonces como:

$$Q_{sw} = (a_1 \text{sen} \varphi + a_2) (1 + b_1 N^{b_2}) \quad (\text{Ec 2.44})$$

donde T es la temperatura del aire ($^{\circ}\text{K}$),
 c_p es el calor específico del aire a presión constante, $996 \text{ m}^2/(\text{s}^2\text{K})$,
 ρ es la densidad del aire (kg/m^3), y,
 g es la aceleración de la gravedad.

Para la iteración, con la Ec 2.43 se obtiene un valor inicial de u_* suponiendo condiciones neutras ($L=\infty$). Este valor se usa en la Ec 2.44 para estimar L . Con este entonces, se calcula un nuevo valor para u_* , nuevamente con la Ec 2.43 y luego otra L . El procedimiento se repite hasta que converja. Según Holtslag y van Ulden (1983) tres iteraciones son suficientes.

En condiciones estables, Weil y Brower (1983) calculan u_* con el método de Venkatram (1980):

$$u_* = \frac{C_{DN} u}{2} \left(1 + C^{\frac{1}{2}} \right) \quad (\text{Ec 2.45})$$

$$C = 1 - \frac{4u_0^2}{C_{DN} u^2} \quad (\text{Ec 2.46})$$

$$u_0^2 = \frac{\gamma^{z_m} g \theta_*}{T} \quad (\text{Ec 2.47})$$

donde C_{DN} es el coeficiente de arrastre neutral, $\frac{k}{\ln\left(\frac{z_m}{z_0}\right)}$,

γ es una constante, $\approx 4,7$, y,
 z_m es la altura en la que se ha tomado la medida de la velocidad del viento u .

La temperatura de escala, θ_* , se calcula como el mínimo de dos estimaciones de la misma:

$$\theta_* = \text{MIN}(\theta_{*1}, \theta_{*2}) \quad (\text{Ec 2.48})$$

Estas estimaciones de θ_* se basan en los resultados de Holtslag y van Ulden (1982):

$$\theta_{*1} = 0.09(1 - 0.5N^2) \quad (\text{Ec 2.49})$$

$$\theta_{*2} = \frac{TC_{DN} u^2}{4\gamma^{z_m} g} \quad (\text{Ec 2.50})$$

El flujo de calor sensible queda entonces determinada por u_* y θ_* mediante:

$$Q_h = -\rho c_p u_* \theta_* \quad (\text{Ec 2.51})$$

La altura de la capa mezcla diurna o convectiva se calcula utilizando la modificación Carson (1973) al método de Maul (1980). Conociendo la variación por hora del flujo de calor sensible (Ec 2.51) y el perfil vertical de temperaturas a partir de radiosondeos, la altura de la capa de mezcla convectiva, en un tiempo $t+dt$, puede ser estimada a partir de su valor en el tiempo t mediante:

$$h_{t+dt} = \left(h_t^2 + \frac{2Q_h(1+E)dt}{\Psi_1 \rho c_p} - \frac{2d\theta_t h_t}{\Psi_1} \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{d\theta_{t+dt}}{\Psi_1} \quad (\text{Ec 2.52})$$

$$d\theta_{t+dt} = \left(\frac{2\Psi_1 E Q_h dt}{\rho c_p} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{Ec 2.53})$$

donde Ψ_1 es el gradiente de temperatura potencial en la capa superior a h_t ,
 $d\theta$ es la diferencia de temperatura en la cima de la capa de mezcla (K), y,
 E es una constante, $\approx 0,15$.

En condiciones de turbulencia mecánica la altura de la capa límite se calcula según Venkatram (1981) como:

$$h = \frac{B u_*}{(f N_B)^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{Ec 2.54})$$

donde f es el parámetro de Coriolis $\approx 10^{-4} \text{s}^{-1}$,
 B es una constante, $\approx 2^{1/2}$, y,
 N_B es la frecuencia de Brunt-Vaisala en la capa superior estable.

La altura de la capa de mezcla diurna podría ser tomada como el máximo de los valores calculados anteriormente; sin embargo, tal procedimiento podría causar grandes diferencias entre celdas cercanas si estos son calculados de forma diferente para cada celda. Tal independencia puede obviar importantes efectos advectivos, tales como la reducción significativa de la altura de mezcla en condiciones de brisas marinas o sobre lagos.

Varios investigadores (Wheeler, 1990; Tesche et al., 1988; Steyn y Oke, 1982) han sugerido diversos esquemas que incluyen el cálculo de retrotrayectorias o de flujos advectivos-laterales de calor. CALMET lo incorpora mediante un sistema simplificado. Para una celda dada (i, j) , la celda que más podría influir directamente sobre ella durante el tiempo, dt , se calcula como $(i_u=i-udt, j_u=j-vdt)$, donde (u, v) son las componentes del viento en la celda (i, j) . Considerando un cono imaginario que se origina en (i, j) , tiene un ángulo de apertura determinado, y se genera de tal manera que las celdas (i_u, j_u) se ubican en el medio de la base del cono. Para cada celda de la cuadrícula (i_k, j_k) , situada dentro de la región triangular, el modelo calcula las distancias d_u en la dirección del viento y d_c en dirección perpendicular al mismo, en unidades de número de celdas y obtiene el factor de ponderación siguiente:

$$w_k = \frac{1}{d_u^2 + (1 + d_c)^2} \quad (\text{Ec 2.55})$$

Y normalizados por las n celdas incluidas en la región:

$$w'_k = \frac{w_k}{\sum_n w_n} \quad (\text{Ec 2.56})$$

Además, los factores se calculan también para una caja cuadrada, de ancho definido y centrada en (i,j) con el propósito de favorecer el promedio entre las celdas cuando el viento medio advectivo disminuya hasta valores próximos al cero. Un valor adecuado de las dimensiones de la caja podría ser $\sigma_v dt/dx$, que suele ser del orden de la unidad para la mayoría de las aplicaciones mesoescalares. Para aquellas celdas en la dirección del viento, $d_u < 0$, du se sustituye por $d'_u = \varepsilon - du$, donde ε es el número de Courant o la altura del triángulo desde su base hasta el vértice. Esto asegura que las celdas en la dirección del viento, sufran una ponderación bastante pequeña, y que la simetría azimutal, la velocidad del viento (y ε) tiendan a cero.

Los factores debidamente normalizados se aplican entonces a los campos de altura de capa de mezcla (h_t y h) para suavizarlos. Además, este h_t permite obtener el valor de la altura de capa de mezcla de la siguiente hora, con un efecto acumulativo comparable con el que se produce en el cálculo de retrotrayectorias.

En la capa límite estable, la producción de turbulencia mecánica determina la extensión vertical de la dispersión. Venkatram (1980) ofrece la siguiente relación empírica para estimar la altura de capa de mezcla estable:

$$h_1 = B_2 u_*^{\frac{3}{2}} \quad (\text{Ec 2.57})$$

donde B_2 es una constante, ≈ 2400 .

Por su parte, la altura de la capa límite estable estimada por Zilitinkevich (1972) como:

$$h_2 = 0,4 \sqrt{\frac{u_* L}{f}} \quad (\text{Ec 2.58})$$

CALMET define la altura de la capa límite estable sobre tierra como el mínimo entre h_1 y h_2 .

El factor de ponderación para la velocidad vertical de fricción, w_* , se puede calcular a partir de:

$$w_* = \left(\frac{g Q_h h_t}{T \rho c_p} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{Ec 2.59})$$

donde h_t es la altura de la capa de mezcla convectiva.

2.5.2 Capa límite atmosférica sobre el agua

Sobre el agua las propiedades aerodinámicas y térmicas se calculan de modo diferente debido a la ausencia de un flujo de calor sensible apreciable sobre su superficie. CALMET utiliza la técnica de los perfiles, que utiliza la diferencia de temperatura aire-agua y la velocidad del viento sobre el agua. Sin embargo, este método es sensible a la precisión de los sensores de medida de diferencias de temperatura. Por lo tanto, debe usarse con precaución en áreas donde no se dispone de datos fiables de temperatura.

Los valores del coeficiente de arrastre sobre el agua, C_{uN} , se expresan en función de la velocidad del viento superficial, medida a 10 m sobre el suelo (Garratt, 1977):

$$C_{uN} = (0,75 + 0,067u)10^{-3} \quad (\text{Ec 2.60})$$

La velocidad de fricción se determina entonces a partir de dicho coeficiente de arrastre:

$$u_* = uC_{uN}^{\frac{1}{2}} \quad (\text{Ec 2.61})$$

Debido a la importancia del flujo de calor latente sobre el agua, la temperatura potencial virtual es la utilizada en la definición de la longitud de Monin-Obukhov (Hanna et al., 1985):

$$L = \frac{\theta_v C_{un}^{\frac{3}{2}} u^2}{E_2 (\theta_v - \theta_{vs})} \quad (\text{Ec 2.62})$$

donde θ_v, θ_{vs} son las temperaturas potenciales virtuales en el aire y en el agua (K),
 u es la velocidad del viento, y,
 E_2 es una constante $\approx 5,096 \cdot 10^{-3}$.

Sobre el agua, debido al efecto del viento sobre la altura de las olas, la escala de rugosidad de la superficie varía. CALMET emplea una relación obtenida por Hosker (1975) para expresarla en términos de la velocidad del viento:

$$L = 2,0 \cdot 10^{-6} u^{2,5} \quad (\text{Ec 2.63})$$

El modelo CALMET permite especificar la altura de la capa límite sobre el agua o calcularla internamente utilizando la relación de escala barotrópica neutra (Blackadar y Tennekes, 1968):

$$h_{agua} = \frac{c_w u_*}{f} \quad (\text{Ec 2.64})$$

donde c_w es una constante $\approx 0,16$, y,
 f es el parámetro de Coriolis.

2.6 Campo tridimensional de temperaturas

CALMET incluye un módulo que simula un campo de temperatura de tres dimensiones a partir de medidas en altura, temperatura superficial y los datos de altura de capa de mezcla determinados

anteriormente. Las temperaturas sobre el agua, se calculan por separado. Las principales etapas involucradas en la generación del campo de temperatura son:

- 1) interpolación lineal espacial de las medidas de temperatura en alturas de cada radiosondeo;
- 2) interpolación lineal temporal entre radiosondeos consecutivos;
- 3) cálculo del peso relativo ($1/r^2$) de cada medida en altura para la celda (i, j) de la malla de temperaturas. La distancia r se formula en unidades adimensionales de celdas, con un peso máximo de 1,0 equivalente a la celda adyacente a la de la estación;
- 4) uso de estos pesos relativos para calcular el campo espacial de temperaturas promedio en cada columna sobre cada celda (i, j) y en todos los niveles verticales, k . Esta temperatura 3-D, T_{ijk} , se basa únicamente en los datos en altura;
- 5) sustitución de las temperaturas, T_{ijk} , de la capa superficial, por el promedio ponderado espacialmente de las medidas de la temperatura superficial, para cada hora. Nuevamente, los factores de ponderación adimensionales se basan en la distancia, r , de la celda (i, j) a las estaciones meteorológicas de superficie, y puede ser definido como $1/r$ o $1/r^2$; su valor máximo es de 1,0; y
- 6) recálculo de todas las temperaturas asumiendo un gradiente adiabático, de $-0,0098$ °C/m entre la superficie y la altura de la capa convectiva. Debe tenerse en cuenta que las temperaturas en el nivel que contiene la capa de mezcla convectiva se calculan como una capa de espesor ponderado.

2.6.1 Temperaturas sobre el agua

Debido al importante efecto de la temperatura sobre las masas de agua y los fuertes gradientes de temperatura que pueden existir en los límites costeros, CALMET puede calcularlas mediante el uso de medidas sobre el agua (datos de boyas). Estas estaciones sobre el agua no se incluyen en la interpolación terrestre.

Para las capas verticales sobre el agua el usuario puede elegir entre dos alternativas de gradientes térmicos, variables en el tiempo o constantes. También se pueden especificar gradientes por separado para las capas por encima o por debajo de la altura de la capa de mezcla. Finalmente, estas medidas se promedian espacialmente, ya sea mediante $1/r$ o $1/r^2$.

3 Modelo de dispersión atmosférica

Los modelos de calidad del aire basados en balances de materia constituyen los denominados modelos de dispersión atmosférica. Estos modelos se basan en la ecuación de difusión atmosférica, como balance de contaminante, previamente descrita. La solución numérica de dicha ecuación ha dado lugar a distintos tipos de modelos de dispersión atmosférica.

La solución numérica natural a la ecuación de difusión atmosférica es la aproximación euleriana, ya descrita. Sin embargo, en el caso de que interese una simulación detallada y precisa de la dispersión de uno o muy pocos focos emisores puntuales se ha demostrado que la mejor solución numérica es la aproximación lagrangiana, que se expone a continuación.

3.1 La solución lagrangiana

En la aproximación lagrangiana (Seinfeld, 2012), el estudio se centra en el comportamiento de partículas o elementos discretos de contaminante representativos de este. Consideremos un elemento de contaminante, sometido a un régimen turbulento en una posición \bar{x}' y en un tiempo t' ; su movimiento vendrá descrito por su trayectoria, $\bar{X}(\bar{x}', t', t)$, que está definida por su posición de origen \bar{x}' y su posición final $\bar{X}(\bar{x}', t', t)$ en el instante t .

Como hemos visto previamente en la definición de la solución euleriana, la concentración de las diferentes especies en la atmósfera es una variable aleatoria que no puede ser determinada, por lo que hemos de limitarnos a tratar de conocer algunas propiedades estadísticas de ella. Definimos así $\psi(x_1, x_2, x_3, t) dx_1 dx_2 dx_3 = \psi(\bar{x}, t) d\bar{x}$ como la probabilidad de que un elemento de contaminante se encuentre en un tiempo t dentro de un elemento de volumen $(x_1 \cdots x_1 + dx_1, x_2 \cdots x_2 + dx_2, x_3 \cdots x_3 + dx_3)$. Por tanto, $\psi(\bar{x}, t)$ es la función de densidad de probabilidad, que por definición debe verificar,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\bar{x}, t) d\bar{x} = 1 \quad (\text{Ec 3.1})$$

Por otro lado, la probabilidad de que un elemento de contaminante se encuentre en una posición \bar{x} en un tiempo t puede expresarse como el producto de dos densidades de probabilidad:

- La densidad de probabilidad de que, si el elemento de contaminante está en \bar{x}' en un tiempo t' , se desplace hasta \bar{x} en el instante t es la densidad de probabilidad de transición, y se expresa como $Q(\bar{x}, t | \bar{x}', t')$.
- La densidad de probabilidad de que un elemento de contaminante se encuentre en \bar{x} en el instante t , para todas las posiciones iniciales \bar{x}' ,

$$\psi(\bar{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\bar{x}, t | \bar{x}', t') \psi(\bar{x}', t') d\bar{x}' \quad (\text{Ec 3.2})$$

Para un número n de elementos de contaminante, la suma de todas las densidades de probabilidad de todos los elementos de una misma especie representará el número (probable) de elementos encerrados en el volumen considerado, es decir, la concentración media:

$$\langle c(\bar{x}, t) \rangle = \sum_{i=1}^n \psi_i(\bar{x}, t) \quad (\text{Ec 3.3})$$

Además, habrá que tener en cuenta tanto la distribución inicial de contaminante como el aporte de los focos emisores, $S(\bar{x}, t)$, de modo que la expresión lagrangiana general para la concentración media es,

$$\langle c(\bar{x}, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\bar{x}, t | \bar{x}_0, t_0) \langle c(\bar{x}_0, t_0) \rangle d\bar{x}_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^t Q(\bar{x}, t | \bar{x}', t') S(\bar{x}', t') dt' d\bar{x}' \quad (\text{Ec 3.4})$$

Según esta expresión, el conocimiento de la forma de la función Q permitiría la determinación de $\langle c(\bar{x}, t) \rangle$; sin embargo, esta función depende de propiedades de la turbulencia que no son conocidas, por lo que de nuevo será preciso asumir algunas aproximaciones para obtener un resultado.

3.2 La aproximación gaussiana

Como se ha mostrado previamente, ni la solución euleriana ni la lagrangiana aportan un resultado aplicable al problema de la distribución de contaminantes en la atmósfera, debido al problema de cierre o resolución conjunta de las ecuaciones que se derivan de ellas. Por lo que habitualmente es preciso asumir algunas aproximaciones para obtener una solución aplicable, bien sea una solución analítica o bien una solución numérica abordable por los medios computacionales de que se disponga. La solución analítica más ampliamente utilizada, y que ha tenido mayor difusión, es la ecuación gaussiana, y ha sido también el origen de diversas formulaciones numéricas. Esta ecuación se obtiene a partir de la solución euleriana o de la solución lagrangiana, asumiendo las mismas aproximaciones.

En primer lugar, se considera que las especies contaminantes son inertes ($R_i = 0$). Por tanto, a partir de la solución euleriana el problema se reduce a definir una expresión para $\langle u'_j c' \rangle$, es decir, un modelo de turbulencia. El habitualmente utilizado para determinar una expresión es el de "Longitud de Mezcla" (extensión de la ley de Fick para la difusión molecular) según el cual,

$$\langle u'_j c' \rangle = - \sum_{j=1}^3 K_{jk} \frac{d\langle c \rangle}{dx_k}, \quad k=1, 2, 3 \quad (\text{Ec 3.5})$$

donde K_{jk} es la difusividad turbulenta o de remolino para la dirección j provocada, según la hipótesis del modelo, por un gradiente de concentración en la dirección k . Podrían plantearse así 9 expresiones, 3 para cada dirección de transporte; pero, considerando que los gradientes de concentración en otras direcciones distintas a la del transporte no afectan a este, el problema se reduce a 3 expresiones, con 3 incógnitas K_{jj} :

$$\langle u'_j c' \rangle = -K_{jj} \frac{d\langle c \rangle}{dx_j}, \quad j=1, 2, 3 \quad (\text{Ec 3.6})$$

La segunda hipótesis, de aplicación prácticamente general en la atmósfera, estima que la difusión molecular es mucho menor que la difusión turbulenta en la misma dirección, de modo que resulta despreciable,

$$D_i \frac{d^2\langle c \rangle}{dx_j dx_j} \ll \frac{d\langle u'_j c' \rangle}{dx_j} \quad (\text{Ec 3.7})$$

Por otra parte, la hipótesis de atmósfera incompresible conlleva que la ecuación de continuidad se reduce a la condición de un campo de vientos con divergencia nula, debido a que la densidad del aire se considera prácticamente constante; como consecuencia,

$$\frac{d\bar{u}_j}{dx_j} = 0 \quad (\text{Ec 3.8})$$

Esta condición es de especial importancia en la aplicación de los modelos de difusión atmosférica. De la aplicación de estas hipótesis a la ecuación de difusión atmosférica, Ec 1.4, se obtiene:

$$\frac{d\langle c \rangle}{dt} + \bar{u}_j \frac{d\langle c \rangle}{dx_j} = \frac{d}{dx_j} \left(K_{jj} \frac{dc}{dx_j} \right) + S(\bar{x}, t) \quad (\text{Ec 3.9})$$

Si se considera que las difusividades turbulentas K_{jj} son constantes en cada dirección, esta ecuación se transforma en:

$$\frac{dc}{dt} + \bar{u} \frac{d\langle c \rangle}{dx} = K_{xx} \frac{d^2\langle c \rangle}{dx^2} + K_{yy} \frac{d^2\langle c \rangle}{dy^2} + K_{zz} \frac{d^2\langle c \rangle}{dz^2} \quad (\text{Ec 3.10})$$

para las condiciones iniciales y de contorno:

$$\begin{aligned} \langle c(x, y, z, 0) \rangle &= S \delta(x) \delta(y) \delta(z) \\ \langle c(x, y, z, t) \rangle &= 0 \text{ cuando } x, y, z \rightarrow \pm\infty \end{aligned} \quad (\text{Ec 3.11})$$

La solución analítica a esta ecuación diferencial, o solución gaussiana, es:

$$\langle c(x, y, z, t) \rangle = \frac{S}{8\sqrt{(\pi t)^3} \sqrt{K_{xx} K_{yy} K_{zz}}} e^{-\frac{(x-\bar{u}t)^2}{4K_{xx}t} - \frac{y^2}{4K_{yy}t} - \frac{z^2}{4K_{zz}t}} \quad (\text{Ec 3.12})$$

Como se puede observar, el nombre de la solución (gaussiana) se debe a la forma de la función resultante de la integración (Figura 3.1).

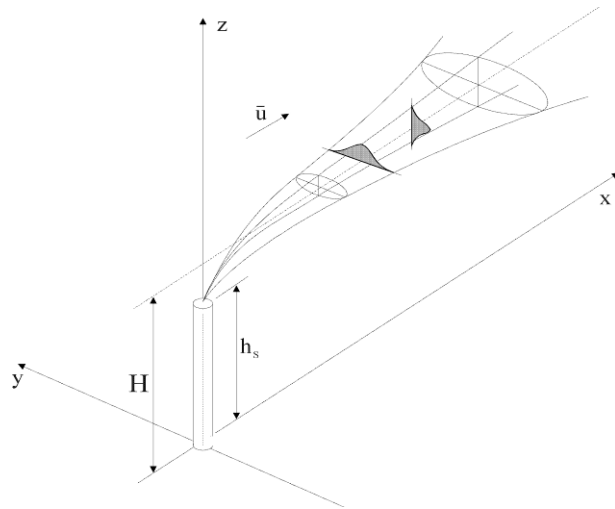


Figura 3.1 Esquema de un penacho gaussiano. H , Altura media de transporte del penacho, h_s , altura de emisión, \vec{u} velocidad del viento (Zannetti, 1990).

Llevadas a la realidad, las aproximaciones que se han considerado suponen que esta ecuación solo será válida cuando,

- Las reacciones químicas son lentas comparadas con el transporte turbulento.
- Las escalas de longitud y tiempo características de los cambios de concentración son grandes comparadas con las correspondientes escalas de transporte turbulento.

Estas condiciones no se cumplen para focos muy localizados en zonas muy próximas a ellos. El modelo solo es válido, por tanto, en situaciones con reacciones químicas relativamente lentas (contaminantes inertes) y focos dispersos (zonas urbanas). Sin embargo, esta solución ha sido ampliamente utilizada para la estimación de la influencia que un futuro foco emisor puede tener sobre una zona determinada, mediante la utilización de datos meteorológicos históricos medios sobre largos períodos de tiempo: mensuales, estacionales y anuales. La consideración de estos largos períodos elimina la influencia de las distintas escalas de turbulencia sobre la variabilidad del fenómeno, en tanto que la transformación de los contaminantes se considera, por simplicidad, mediante un factor de decaimiento que asume una cinética de pseudoprimer orden aplicable al resultado final de la ecuación gaussiana. Un ejemplo típico de esta aplicación es la versión CALPUFF-LITE del modelo CALPUFF, en la que se alimenta este con condiciones atmosféricas homogéneas, sobre largos períodos de tiempo divididos en intervalos en los que la meteorología se adopta como estacionaria.

La solución lagrangiana permite obtener la misma expresión de distribución gaussiana que la solución euleriana, bajo las hipótesis en que dicha distribución es aplicable. A mayores, los modelos lagrangianos tienen una mayor flexibilidad en la utilización de esta aproximación gaussiana, puesto que pueden limitar la aplicación de dicha solución al sistema de coordenadas móvil que sigue el penacho. De este modo, puede dividirse el entorno de simulación en regiones móviles cuasiestacionarias mucho más pequeñas que sí pueden cumplir las hipótesis para las que

se obtiene condiciones de la ecuación gaussiana. Esta es una de las razones por las que la solución gaussiana se emplea actualmente en la modelización y simulación no estacionaria del flujo y dispersión de contaminantes en la atmósfera, mediante los modelos lagrangianos basados en distribuciones gaussianas.

Sin embargo, considerando que:

$$K_{xx} \rightarrow 0, K_{yy} = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_y^2}{dt} \text{ y } K_{zz} = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_z^2}{dt}$$

la solución analítica a la Ec 3.10, o solución gaussiana, entonces es:

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z\bar{u}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2} \left(e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z-h}{\sigma_z}\right)^2} + e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z+h}{\sigma_z}\right)^2} \right) \quad (\text{Ec 3.13})$$

donde c es la concentración de contaminante en x, y, z (g/m^3), o inmisión
 Q es el caudal másico de contaminante (g/s) en el puff,
 u es la velocidad del viento a la altura de emisión (m/s),
 x es la coordenada horizontal (m),
 y es la coordenada horizontal transversal (m),
 z es la coordenada vertical (m),
 σ_y es la desviación estándar de la distribución de concentración horizontal transversal, consecuencia de la turbulencia horizontal (m),
 σ_z es la desviación estándar de la distribución de concentración vertical, consecuencia de la turbulencia vertical (m), y ,
 h es la altura efectiva de emisión (m).

3.3 Modelo de dispersión atmosférica CALPUFF

CALPUFF (Scire et al., 2000b) es un modelo no estacionario, multicapas y multiespecies, de dispersión de puffs, que puede simular los efectos, temporales y espaciales, de las condiciones meteorológicas en el transporte, la transformación y la deposición de contaminantes en la atmósfera. El modelo CALPUFF puede utilizar los campos meteorológicos generados por el modelo CALMET o, en su defecto, medidas de estaciones meteorológicas en formatos convencionales.

El modelo CALPUFF contiene algoritmos que consideran diversos fenómenos: efectos en la cercanía de los focos emisores, como el flujo descendente tras obstáculos, la elevación del penacho en zonas de transición meteorológica, la penetración parcial del penacho sobre la capa de mezcla, las interacciones del terreno a escala submalla, así como efectos a largo plazo, como la deposición de contaminantes (lavado húmedo y deposición seca), transformación química; también, la cizalladura vertical del viento, las interacciones costeras y las singularidades del transporte sobre masas de agua. CALPUFF también puede simular variaciones arbitrarias de las emisiones, y contiene diferentes opciones para el tratamiento de los procesos físicos de los contaminantes en la atmósfera, en diferente nivel de detalle en función de la aplicación del modelo.

CALPUFF puede continuar una simulación anterior, utilizando un archivo opcional de reinicio. Este archivo contiene todas las variables finales de una ejecución previa, lo que permite al modelo continuar la simulación. El archivo de reinicio debe ser generado previamente como fichero de salida o a intervalos regulares de la simulación, para prevenir alguna interrupción.

3.4 Dispersión en modelos de puffs

Los modelos de puffs representan, un penacho continuo, como un conjunto de paquetes discretos de contaminantes. La mayoría de los modelos de puffs (Ludwig et al., 1977; van Egmond y Kesseboom, 1983; Peterson, 1986) evalúan la contribución de un puff a la concentración en un receptor con un enfoque instantáneo. Cada puff está congelado en el tiempo, se determina la distribución de concentración de contaminante en su interior, y luego se deja mover, modificando su tamaño, masa de contaminante, etc; hasta el intervalo de tiempo siguiente. La concentración total en un receptor se calcula como la suma total de las contribuciones de todos los puff cercanos, en un intervalo de tiempo elegido.

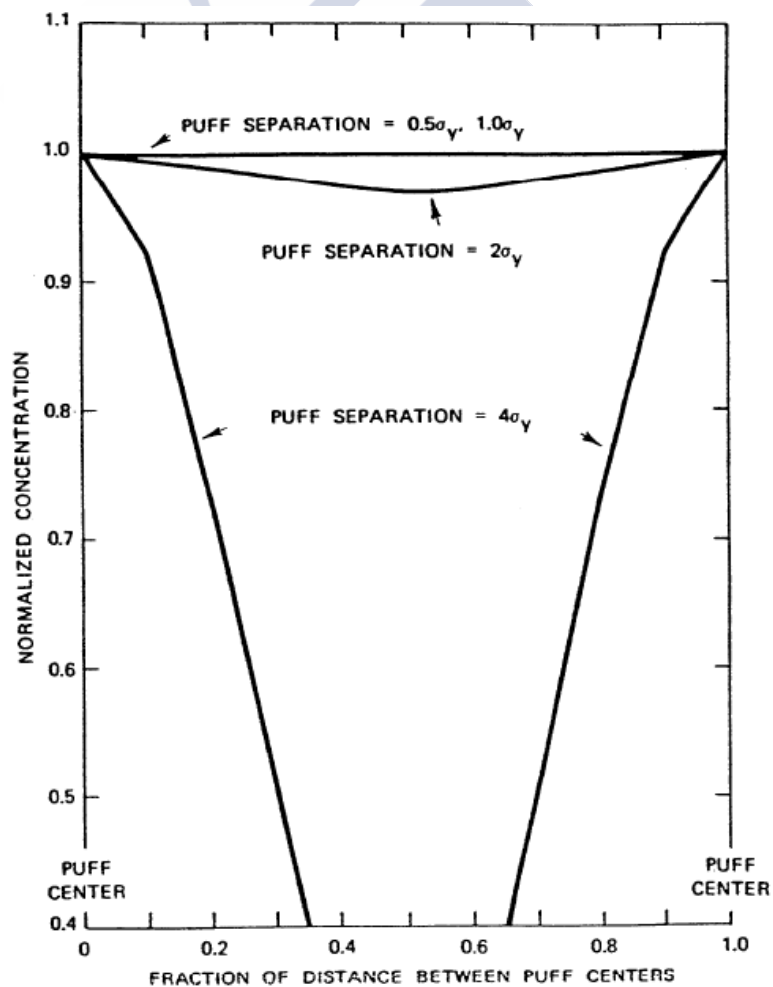


Figura 3.2 Concentración normalizada entre dos puffs gaussianos de igual tamaño, con distintos espaciados entre ellos. (Ludwig et al., 1977).

El enfoque de puff tiene como inconveniente la necesidad de la liberación de un número elevado de puffs para representar adecuadamente un penacho continuo en las cercanías de un foco emisor. Ludwig et al. (1977) demostraron que si la distancia entre puffs excede de un máximo de aproximadamente $2\sigma_y$, pueden obtenerse resultados inexactos en el cálculo de las concentraciones en el interior del penacho que se desea representar (Figura 3.2). Así, se obtendrían mejores resultados si la separación entre puff se reduce a no más de σ_y , ya que si los puffs no se superponen suficientemente, se subestiman las concentraciones en los receptores situados en el espacio entre puffs en el momento en que se calculan dichas concentraciones, mientras que en aquellos receptores próximos a los centros de los puffs las concentraciones serán sobreestimadas.

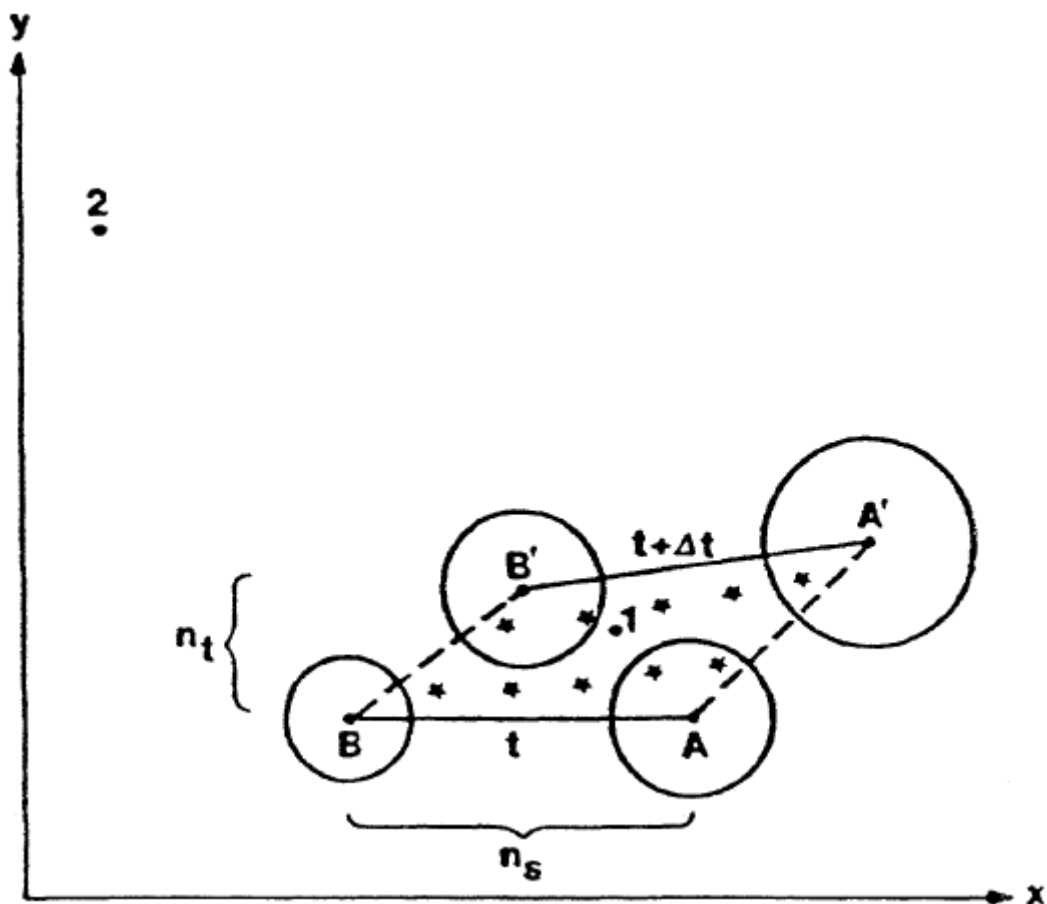


Figura 3.3 Esquema de generación de puffs. Los puffs arrastrados (A A', B B') en la vecindad del receptor 1 no son suficientes para representar el penacho. La masa de los puffs originales se redistribuye en los $n_s \times n_t$ nuevos puff artificiales (asteriscos) para mejorar el cálculo de la concentración de contaminante entre puffs. (Zannetti, 1981b).

Ludwig et al., 1977, recomiendan utilizar puffs separados uniformemente en el espacio en lugar de en el tiempo, con un esquema de fusión/purga de puffs para reducir su número total. Zannetti (1981b) sugiere el uso inicial de un menor número de puffs que el necesario para poder lograr una estimación adecuada de la concentración, para luego saturar las cercanías de un receptor con puffs artificiales, y así lograr la superposición de puffs requerida (Figura 3.3). Aunque ambos

esquemas reducen el número de puffs, cualquier enfoque basado en el cálculo instantáneo de la concentración requiere de un número excesivamente grande de puffs en las cercanías del foco emisor. Por ejemplo, para un receptor ubicado a 100 metros de un foco emisor, considerando las categorías de dispersión de Pasquill se requiere una tasa de liberación de más de 1300 puffs/hora para cumplir con el criterio de $2\sigma_y$ (estabilidad F, velocidad de viento de 3 m/s). Para altas velocidades de viento, condiciones neutras (10 m/s, estabilidad D), se necesitan cerca de 2200 puffs/hora. Si se considera entonces, σ_y , se duplicaría el número de puffs necesarios.

Con todo, CALPUFF incorpora dos alternativas para mejorar el cálculo instantáneo de concentraciones en los receptores. Ambas se basan en el esquema básico incluido en el modelo MESOPUFF II (Scire et al., 1984a,b), con modificaciones en las cercanías del foco emisor. La primera alternativa utiliza puffs gaussianos radialmente simétricos o circulares, mientras que la segunda emplea puffs no simétricos (puffs deformados), alargados en la dirección del viento durante la emisión, para eliminar la necesidad de liberaciones de puffs con mayor frecuencia. CALPUFF permite seleccionar cualquiera de los dos esquemas, e incluye la opción de simulaciones híbridas, que considera los mejores resultados de cada algoritmo (puffs deformados en las cercanías y puffs circulares simétricos en zonas distantes).

Este problema resulta sensiblemente menor en el caso de emisiones a gran altura, en las que las concentraciones de interés se calculan a varios kilómetros lejos del foco emisor, es decir, cuando la inmisión puede ser apreciable. En estos casos, la solución de puffs simétricos resulta igualmente válida.

3.4.1 Cálculo de la contribución de un puff circular simétrico a la concentración en un receptor

En el modelo CALPUFF, la ecuación básica para la contribución de un puff en un receptor es:

$$C = \frac{Q}{2\pi\sigma_x\sigma_y} g \cdot e^{-\frac{d_a^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{d_c^2}{2\sigma_y^2}} \quad (\text{Ec 3.14})$$

$$g = \frac{2}{\sqrt{2\pi}\sigma_z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(H_c+2nh)^2}{2\sigma_z^2}} \quad (\text{Ec 3.15})$$

donde C es la concentración a nivel del suelo (g/m^3), o inmisión
 Q es la masa de contaminante (g) en el puff,
 σ_x es la desviación estándar (m) de la distribución gaussiana, a lo largo de la dirección de desplazamiento del viento,
 σ_y es la desviación estándar (m) de la distribución gaussiana en la dirección transversal horizontal al viento,
 σ_z es la desviación estándar (m) de la distribución gaussiana en la dirección vertical,
 d_a es la distancia (m) desde el centro del puff al receptor, a lo largo de la dirección de desplazamiento del viento,

- d_c es la distancia (m) desde el centro del puff al receptor, en la dirección transversal del viento,
- g es el término vertical (m) de la ecuación gaussiana,
- H_e es la altura efectiva (m) sobre el suelo del centro del puff, y,
- h es la altura de capa de mezcla (m).

El sumatorio g representa la contribución de las múltiples reflexiones del penacho entre la altura de la capa de mezcla y el suelo; y reduce el límite de la mezcla uniforme de $1/h$ a $\sigma_z > 1,6 h$. En general, los puffs dentro de la capa límite convectiva cumplen ya con este criterio poco tiempo después de su liberación.

Para un puff horizontalmente simétrico, con $\sigma_x = \sigma_y$, la Ec 3.14 se reduce a:

$$C = \frac{Q(s)}{2\pi\sigma_y^2(s)} g(s) \cdot e^{-\frac{R^2(s)}{2\sigma_y^2(s)}} \quad (\text{Ec 3.16})$$

- donde R es la distancia (m) desde el centro del puff al receptor, y,
- s es la distancia (m) recorrida por el puff desde su liberación.

La integración de la Ec 3.16 a través de la distancia recorrida por el puff, ds , durante la etapa de muestreo, dt , permite obtener la concentración media en el tiempo, \bar{C} .

$$C = \frac{1}{ds} \int_{s_0}^{s_0+ds} \frac{Q(s)}{2\pi\sigma_y^2(s)} g(s) \cdot e^{-\frac{R^2(s)}{2\sigma_y^2(s)}} ds \quad (\text{Ec 3.17})$$

- donde s_0 es el valor inicial de s .

Se puede obtener una solución analítica a esta integral, considerando que $R(s)$ y $Q(s)$ son los términos más significativos. La Figura 3.4 muestra el movimiento de un puff desde las coordenadas (x_1, y_1) a (x_2, y_2) . Suponiendo que la trayectoria es un segmento recto, y transformando s a la variable adimensional, p , la distancia radial al receptor en (x_r, y_r) es:

$$R(s) = \left[(x_1 - x_r + p dx)^2 + (y_1 - y_r + p dy)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{Ec 3.18})$$

- donde p es 0 en el comienzo del segmento, en (x_1, y_1) ,
- p es 1 en el extremo del segmento, en (x_2, y_2) , y,
- d_x, d_y son las distancias X y Y , recorridas por el puff ($d_x = x_2 - x_1$, y $d_y = y_2 - y_1$).

La variación exponencial de Q debida a procesos de eliminación y transformación química se expresa como una función lineal en el intervalo:

$$Q(s) = Q(s_0) + p[Q(s_0 + ds) - Q(s_0)] \quad (\text{Ec 3.19})$$

Usando la Ec 3.19, y transformando a coordenadas p , la Ec 3.17 se convierte en:

$$C = \frac{g}{2\pi\sigma_y^2} \left\{ Q(s_0) \int_0^1 e^{-\frac{R^2(p)}{2\sigma_y^2}} dp + [Q(s_0 + ds) - Q(s_0)] \int_0^1 e^{-\frac{R^2(p)}{2\sigma_y^2}} dp \right\} \quad (\text{Ec 3.20})$$

La solución de las integrales de la Ec 3.20 se puede expresar en términos de funciones de error y exponenciales, como sigue:

$$\bar{C} = \frac{g}{2\pi\sigma_y^2} \{Q(s_0)I_1 + [Q(s_0 + ds) - Q(s_0)]I_2\} \quad (\text{Ec 3.21})$$

$$I_1 = \sqrt{\frac{\pi}{2a}} e^{\frac{b^2 - c}{2a}} \left\{ \text{erf} \left[\frac{a+b}{\sqrt{2a}} \right] - \text{erf} \left[\frac{b}{\sqrt{2a}} \right] \right\} \quad (\text{Ec 3.22})$$

$$I_2 = \frac{-bI_1}{a} + \frac{1}{a} e^{\frac{b^2 - c}{2a}} \left[e^{\frac{b^2}{2a}} - e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{a+2b+\frac{b^2}{a}}{a} \right)} \right] \quad (\text{Ec 3.23})$$

$$a = \frac{d_x^2 + d_y^2}{\sigma_y^2} \quad (\text{Ec 3.24})$$

$$b = \frac{d_x(x_1 - x_r) + d_y(y_1 - y_r)}{\sigma_y^2} \quad (\text{Ec 3.25})$$

$$c = \frac{(x_1 - x_r)^2 + (y_1 - y_r)^2}{\sigma_y^2} \quad (\text{Ec 3.26})$$

donde erf es la función de error $\text{erf } z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt$ (Olver et al., 2010). CALPUFF usa la aproximación de Hastings, que considera el error absoluto como $3 \cdot 10^{-7}$ (Hastings et al., 1955).

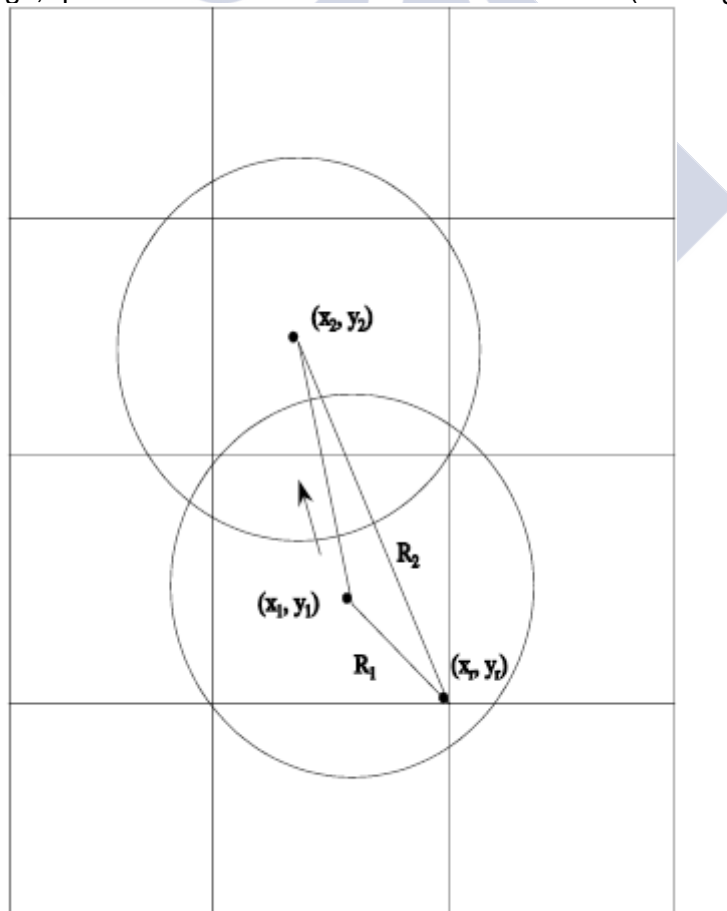


Figura 3.4 Ilustración del movimiento de un puff durante la etapa de muestreo/cálculo en el receptor, y los cambios asociados a la distancia del receptor (Scire et al., 2000b).

El coeficiente de dispersión horizontal, σ_y , y el término vertical, g , se evalúan y se mantienen constantes durante todo el intervalo. En MESOPUFF II, σ_y y g se calculan en el punto medio del intervalo ($p=0,5$) debido a que en distancias mesoescalares el cambio relativo del tamaño del puff en el tiempo es generalmente pequeño. Esta suposición reduce el número de veces necesarias para calcular los coeficientes de dispersión y los términos verticales de reflexión, limitándose a una vez por cada etapa de muestreo/cálculo en receptores (independientemente del número de receptores). Sin embargo, esta optimización puede resultar no ser apropiada en las cercanías del foco emisor, donde la tasa relativa de crecimiento del puff puede ser elevada y la altura del penacho puede variar. Por esta razón, en CALPUFF la función integrada se ha implementado con valores específicos de σ_y y g para cada receptor evaluadas en el punto de máxima aproximación del puff a cada receptor.

3.4.2 Cálculo de la contribución de un puff deformado a la concentración en un receptor

En la alternativa de puffs deformados, estos consisten en paquetes gaussianos de materia contaminante alargados en la dirección del viento. Un puff deformado también puede ser visualizado como un grupo de puff circulares superpuestos y con muy poca separación entre ellos. De hecho, el puff deformado reproduce una emisión continua de puffs de masa infinitesimal qdt . La longitud del cuerpo principal del puff deformado es $u\Delta t_e$, donde u es la velocidad del viento y Δt_e es el intervalo de tiempo de emisión de la masa de contaminante. La concentración en un receptor debida a la presencia de un puff deformado se puede escribir como:

$$C(t) = \frac{Fq}{\sqrt{2\pi u' \sigma_y}} g \cdot e^{-\frac{d_c^2 u^2}{2\sigma_y^2 u'^2}} \quad (\text{Ec 3.27})$$

$$F = \frac{1}{2} \left\{ \text{erf} \left[\frac{d_{a2}}{\sqrt{2}\sigma_{y2}} \right] - \text{erf} \left[\frac{-d_{a1}}{\sqrt{2}\sigma_{y1}} \right] \right\} \quad (\text{Ec 3.28})$$

donde u es el vector velocidad media del viento (m/s),
 u' es la velocidad del viento escalar, definida como $u'=(u^2+\sigma_v^2)^{1/2}$; siendo σ_v la varianza de velocidad del viento,
 q es la tasa de emisión (g/s),
 F es una función de causalidad, y,
 g es el factor de acoplamiento vertical descrito en la Ec 3.15.

Las cantidades d_c y d_a son las distancias desde el puff al receptor, transversal y a lo largo de la dirección del viento, respectivamente. En particular, d_{a2} es la distancia desde el extremo final del puff deformado 2 (con $d_{a2}>0$ en la dirección del extremo 1), mientras que la distancia desde el extremo del puff deformado 1 se define como $-d_{a1}=d_{a2}-l_{xy}$, donde l_{xy} es la longitud de la proyección del puff deformado en el plano x - y . Los subíndices 1 y 2 de los coeficientes de dispersión se refieren a sus valores en los extremos anterior y posterior del puff deformado, respectivamente. La ausencia de un subíndice numérico indica que el valor ha sido definido en el receptor.

En la Ec 3.27 se considera que la masa se conserva. Pero, de la misma manera que los puffs circulares, cada puff deformado evoluciona independientemente bajo los efectos locales de la dispersión, la transformación química, la eliminación del contaminante, etc. Por lo demás, esta formulación del puff deformado conserva muchas de las propiedades importantes del esquema circular simétrico, mientras reduce significativamente los problemas asociados a la superposición de puffs durante el muestreo instantáneo de puffs circulares. La distribución de la concentración dentro del cuerpo principal del puff deformado, lejos de los extremos, se asemeja a un penacho gaussiano bajo las condiciones de estado estacionario. Por su parte, las concentraciones cerca de los extremos (tanto dentro como fuera del cuerpo principal del puff deformado) tienen que considerar también la contribución de los puffs deformados adyacentes, si bien se puede considerar su contribución en condiciones estacionarias. Esta contribución se corrige mediante una función de causalidad.

La función de causalidad, F , tiene en cuenta los fenómenos en las cercanías de los extremos del puff deformado. Para intervalos largos de emisión entre puffs, tal que $u\Delta t_e \gg \sigma_x$, y receptores en el interior del puff deformado, la evaluación de las funciones de error por la Ec 3.28 produce $F=0,5(1-(-1))=1$, es decir, sin efectos adicionales de borde del puff. Para receptores fuera del puff deformado, F es igual a cero, indicando que la sustancia contaminante no ha alcanzado todavía el receptor o ya lo ha pasado de largo. Pero, en los extremos del puff deformado, dentro de este, la función de causalidad produce una “cola” anterior/posterior en la distribución gaussiana, como alteración de esta. Este fenómeno es especialmente relevante con bajas velocidades de viento, ya que en estos casos los puffs tienen más tiempo para deformarse mientras se desplazan.

Para el cálculo de esta alteración en función de la velocidad del viento, el factor (u/u') permite su cálculo adecuado en función de la velocidad de viento. Cuando u se aproxima a cero (velocidades bajas y calmas), el término exponencial de viento cruzado es igual a 1, y F se aproxima a

$$F = -\operatorname{erf}\left[\frac{d_a}{\sqrt{2}\sigma_y}\right].$$

En estas condiciones, la dependencia de la concentración radial de la

distribución está determinada por la función de causalidad. Para u mayores que unos pocos metros por segundo, (u/u') tiende a 1, por lo que esta relación deja de tener importancia. El factor (u/u') y la función F hacen que el modelo del puff deformado sea más similar al de puff circular simétrico, que a los modelos de penachos segmentados (Hales et al., 1977; Benkley y Bass, 1979). Y es que, a diferencia del modelo de puff deformado, los modelos de penacho segmentados no pueden representar adecuadamente la dispersión en condiciones de baja velocidad de viento, y otros efectos en los bordes del dominio de simulación.

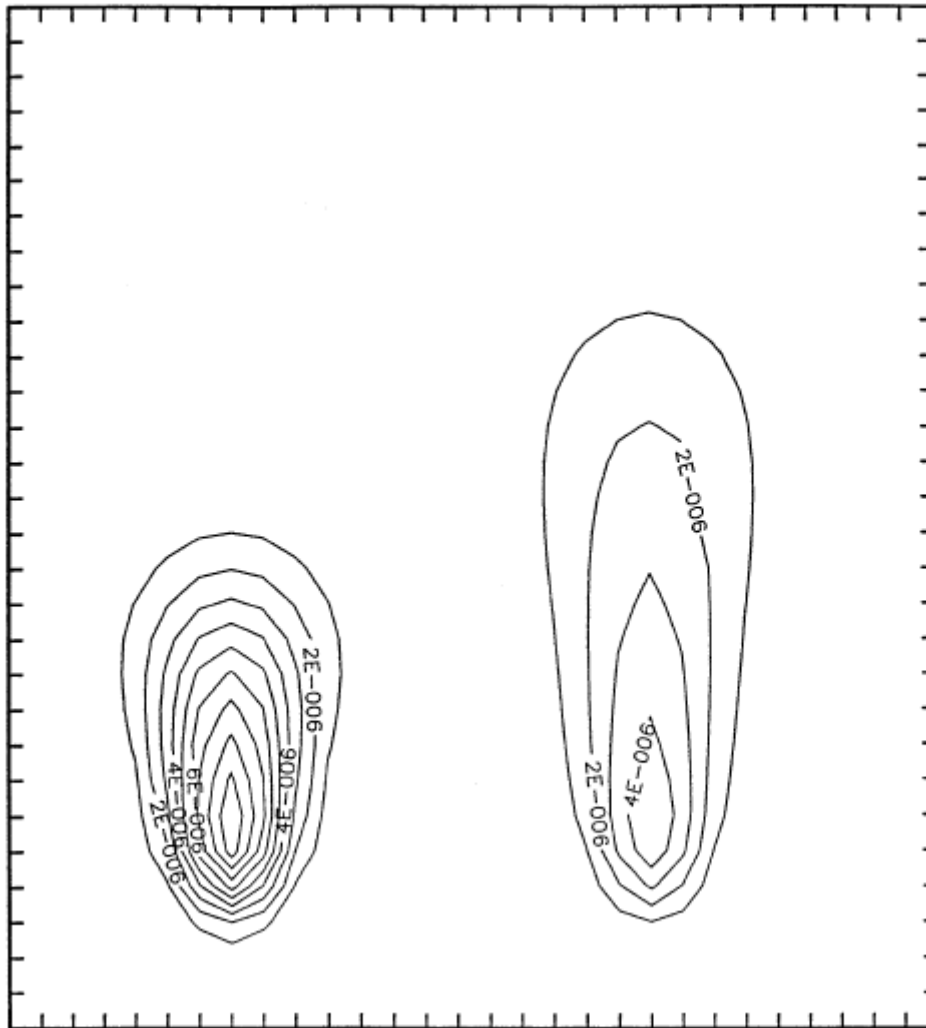


Figura 3.5 Isolíneas de dos instantes del puff deformado. El puff deformado instantáneo de la izquierda representa el puff deformado en el comienzo del intervalo de muestreo, mientras que el de la derecha muestra el del final del intervalo. Durante el intervalo de muestreo, el puff deformado experimenta advección hacia la derecha; y, difusión y estiramiento a lo largo, debido a la cizalladura del viento (hacia arriba) (Scire et al., 2000b).

La Ec 3.27 permite calcular la distribución instantánea en un tiempo t de concentración de contaminante dentro de un puff deformado. Para considerar la concentración en un receptor es necesario tener en cuenta la contribución de uno o varios puffs a lo largo de un intervalo de tiempo o intervalo de muestreo. En la Figura 3.5 se representan las isolíneas de concentración de un puff deformado en dos instantes distintos, que pueden corresponder al intervalo de muestreo. Para obtener la contribución del puff deformado a un receptor la Ec 3.27 debe integrarse durante la etapa de muestreo, como intervalo de tiempo para el cálculo de la concentración media en el tiempo, a fin de considerar las dos formas diferentes del puff deformado. En el caso en que la tasa de emisión y las condiciones meteorológicas puedan considerarse constantes durante la etapa de muestreo se puede obtener una solución analítica a la integral para el puff deformado situado en la propia emisión, es decir, cuando al menos un extremo del puff deformado está situado en el foco emisor:

$$\bar{C} = \frac{Fq}{\sqrt{2\pi u' \sigma_y}} g \cdot e^{-\frac{d^2 u^2}{2\sigma_y^2 u^2}} \quad (\text{Ec 3.29})$$

$$F = \frac{1}{2} \text{erf}(\varphi) + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2\sigma_y}}{u\Delta t_s} \left\{ [\xi_e \text{erf}(\xi_e) - \xi_b \text{erf}(\xi_b)] + \frac{1}{2} [e^{\xi_e^2} - e^{\xi_b^2}] \right\} \quad (\text{Ec 3.30})$$

donde

$$\xi_e = \frac{d_{a2} - u\Delta t_s}{\sqrt{2\sigma_y}} \quad (\text{Ec 3.31})$$

representa el momento final del intervalo de tiempo Δt_s .

$$\xi_b = \frac{d_{a2}}{\sqrt{2\sigma_y}} \quad (\text{Ec 3.32})$$

representa el momento inicial de dicho intervalo de tiempo, y,

$$\varphi_2 = \frac{d_{a2}}{\sqrt{2\sigma_{y2}}} \quad (\text{Ec 3.33})$$

representa las condiciones del foco emisor en estado estacionario y Δt_s es la duración de la etapa de muestreo.

Para la Ec 3.29, el intervalo de muestreo debe corresponder con el intervalo de emisión, como ocurre normalmente en el caso de una emisión nueva de contaminante. El valor de σ_{y2} utilizado es la propagación lateral inicial (si la hay) de las emisiones en el foco.

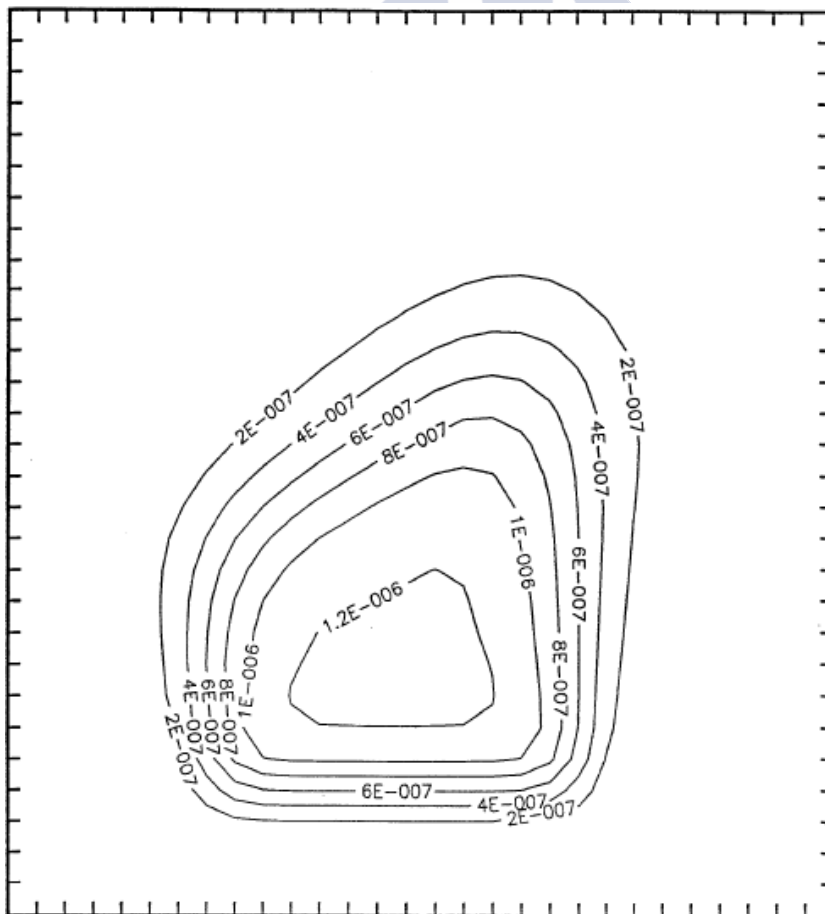


Figura 3.6 Concentraciones en el receptor, promediadas en el tiempo, resultantes del transporte y crecimiento del puff deformado de la Figura 3.5 desde el estado inicial (izquierda) al final (derecha) (Scire et al., 2000b).

Para puffs deformados antiguos, es decir, que ya se han desplazado más de una vez desde su emisión, el extremo final no estará ubicado en el foco emisor, y es poco probable que el eje longitudinal del puff deformado este orientado a lo largo de la dirección advectiva del viento. Por tanto, no es posible la integración analítica de la Ec 3.27 para estos puffs deformados, a menos que se impongan condiciones seriamente restrictivas a las ecuaciones de crecimiento del puff, que limitan la capacidad de aplicación del modelo. Es por eso que las concentraciones medidas debidas a puffs deformados antiguos se determinan mediante métodos numéricos. En la Figura 3.6 se muestra el resultado de la solución numérica para la concentración promediada resultante de los estados inicial y final del puff mostrados en la Figura 3.5.

El planteamiento expuesto hasta este momento no tiene en cuenta los efectos de eliminación o generación de contaminante, por reacción química. CALPUFF permite considerar estos efectos de manera análoga a como los considera el modelo MESOPUFF II, mediante una tasa de emisión efectiva, q , que varía linealmente en el tiempo:

$$q(t) = q_b + (q_e - q_b) \left(\frac{t}{\Delta t_s} \right) \quad (\text{Ec 3.34})$$

donde q_b es la tasa de emisión efectiva para el puff deformado al comienzo del intervalo de muestreo ($q_b=q$ para emisiones nuevas),
 q_e es la tasa de emisión efectiva, que incluye la eliminación o generación de contaminante que se produce durante el intervalo de muestreo, y,
 Δt_s es el intervalo de tiempo de muestreo.

La variable ξ se define como:

$$\xi_e = \frac{d_{a2} - u\Delta t_s \left(\frac{t}{\Delta t_s} \right)}{\sqrt{2}\sigma_y} \quad (\text{Ec 3.35})$$

Esta variable es también función de la variable adimensional de tiempo $t/\Delta t_s$, donde $0 \leq t/\Delta t_s \leq 1$, tal que

$$\xi = \xi_b + (\xi_e - \xi_b) \left(\frac{t}{\Delta t_s} \right) \quad (\text{Ec 3.36})$$

Empleando esta nueva variable, la función de la causalidad se convierte entonces en:

$$F(\xi) = \frac{1}{2} [erf(\varphi_2) - erf(\xi)] \quad (\text{Ec 3.37})$$

Como resultado, la concentración promedio temporal resulta ser:

$$\bar{C} = \frac{g}{\sqrt{2\pi u' \sigma_y}} e^{-\frac{d^2}{2\sigma_y^2} \frac{u^2}{u'^2}} [q_b F_0 + (q_e - q_b) F_1] \quad (\text{Ec 3.38})$$

donde F_0 es F , derivado de la Ec 3.30, y,

$$F_1 = \int_0^{\Delta t_s} \frac{dt}{\Delta t_s} \left(\frac{t}{\Delta t_s} \right) F(t) = \frac{1}{\Delta \xi} \int_{\xi_b}^{\xi_e} d\xi \frac{\xi - \xi_b}{\Delta \xi} F(\xi) \quad (\text{Ec 3.39})$$

siendo $\Delta \xi \equiv \xi_e - \xi_b = \frac{u\Delta t_s}{\sqrt{2}\sigma_y}$.

Sustituyendo en la Ec 3.37 la se obtiene:

$$F_1 = \frac{1}{4} \operatorname{erf}(\varphi_2) - \frac{1}{2 \cdot \Delta \xi^2} \left[\int_{\xi}^{\xi_e} d\xi \cdot \xi \cdot \operatorname{erf}(\xi) - \xi_b \int_{\xi}^{\xi_e} d\xi \cdot \operatorname{erf}(\xi) \right] \quad (\text{Ec 3.40})$$

donde $\int dx \cdot x \cdot \operatorname{erf}(x) = x \cdot \operatorname{erf}(x) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}$ (Ec 3.41)

expresión que ya ha sido utilizada para obtener la Ec 3.30 y donde

$$\int dx \cdot x \cdot \operatorname{erf}(x) = \frac{1}{2} x^2 \cdot \operatorname{erf}(x) + \frac{1}{2} \frac{x}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} - \frac{1}{4} \operatorname{erf}(x) \quad (\text{Ec 3.42})$$

es un caso especial de la expresión más general desarrollado por Geller y Ng (1971) en términos de la función hipergeométrica generalizada, ${}_2F_2$.

El tratamiento de puffs deformados mayores resulta sencillo aplicando una integración numérica de la Ec 3.27. Se sustituye q , en la expresión $q(t)$ dada por la Ec 3.34 y se resuelve la integral numéricamente.

Este proceso de integración numérica se ha optimizado, puesto que requiere un tiempo de cálculo elevado, para un modelo lagrangiano. En primer lugar, todos los receptores que se encuentran fuera de la envoltura del puff deformado, es decir, más allá de $\pm 3\sigma_y$, durante el intervalo de tiempo de muestreo en el que se realiza la integración, son eliminados. En segundo lugar, para los receptores restantes los límites de tiempo de integración se calculan de tal manera que el muestreo no se realice cuando el receptor se vaya a situar al final fuera de la envolvente del puff, definida de nuevo mediante la distancia $\pm 3\sigma_y$.

El uso de la metodología denominada "σ congelada", es decir, σ_y y σ_z se mantienen constantes para cada receptor durante todo el período de muestreo, facilita la integración analítica en otras situaciones. Sin embargo, el caso más general implica el cálculo de una integral indefinida de la forma:

$$\int dt e^{-\beta^2 t^2} \cdot \operatorname{erf}(a + bt), \quad (\text{Ec 3.43})$$

que no tiene solución analítica salvo en algunos casos sencillos ($a=0$ y $b=\beta$).

En cualquier caso, las limitaciones de la integración para el cálculo de la concentración en los receptores no es la única fuente de error: por ejemplo, el hecho de que los procesos de eliminación y generación por transformación química se consideren lineales supone en ocasión una excesiva simplificación; y, aunque sería posible incorporar funciones exponenciales para dichos procesos, la aplicación de estas suele requerir la resta de cantidades elevadas para obtener pequeñas diferencias, lo que implica resultados numéricamente inestables y, habitualmente, con errores significativos.

Un caso sencillo está constituido por un puff deformado que pasa rápidamente a través de un receptor, y con sus extremos lo suficientemente alejados como para que la función de causalidad a lo largo del puff deformado, $F(t)$, sea independiente del tiempo. En este caso la función de causalidad toma un valor constante y puede extraerse de la integral, con un valor aproximado de:

$$F = \frac{1}{2}(F_b - F_e) \quad (\text{Ec 3.44})$$

Es decir, el promedio de los valores al inicio y al final de la función en el intervalo de muestreo. Sin embargo, esta aproximación solo es válida si F_b y F_e presentan una diferencia dentro de un valor de tolerancia previamente especificado, que determina el error asociado al cálculo.

Un procedimiento similar permite extraer fuera de la integral el factor de acoplamiento vertical, g , y reemplazarlo por su valor medio, \bar{g} . También en este caso la tolerancia debe ser especificada.

En ambos casos, el valor de tolerancia recomendado para obtener soluciones cuantitativamente significativas es de 0,02, es decir, un 2%.

Finalmente, es necesario calcular la variabilidad del término de acoplamiento lateral,

$$Y(t) = e^{-\eta^2} \quad (\text{Ec 3.45})$$

donde $\eta(t) = \frac{d_c(t) u}{\sqrt{2\sigma_y u'}}$ es la distancia transversal. La integral evaluada para $m=0$ y a 1 tiene la forma,

$$I_m = \int_0^{\Delta t_s} \frac{dt}{\Delta t_s} \left(\frac{t}{\Delta t_s} \right)^m Y(t) \quad (\text{Ec 3.46})$$

Este tipo de integral se puede resolver analíticamente, para dar

$$I_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\text{erf}(\eta_e) - \text{erf}(\eta_b)}{\eta_e - \eta_b} \quad (\text{Ec 3.47})$$

y

$$I_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{e^{-\eta_b^2} - e^{-\eta_e^2}}{(\eta_e - \eta_b)^2} - \frac{\eta_b I_0}{\eta_e - \eta_b} \quad (\text{Ec 3.48})$$

Aplicando estas soluciones, la concentración promedio final en el receptor se puede escribir como:

$$\bar{C} = \frac{g}{\sqrt{2\pi u' \sigma_y}} e^{-\frac{d^2 u^2}{2\sigma_y^2 u'^2}} [q_b F_0 + (q_e - q_b) F_1] \quad (\text{Ec 3.49})$$

Esta es una alternativa a la integración numérica de los puff deformados, cuya precisión depende de la tolerancia adoptada.

Análogamente a la contribución horizontal, también es necesario calcular la contribución vertical a la concentración media en el receptor en las Ec 3.38 y Ec 3.49; más aún teniendo en cuenta que a

nivel del suelo se producirán fenómenos de deposición seca y húmeda que eliminan el contaminante. Sin embargo, la solución gaussiana facilita el cálculo de esta contribución sin más que sustituir g por el valor 1 en dichas ecuaciones.

3.4.3 Comparación de los modelos de puff deformado y puff circular simétrico: Modelo híbrido

Además de los dos modelos descritos para el cálculo de la concentración promedio en los receptores es posible aplicar el modelo de puff circular simétrico partiendo de propiedades diferentes:

- Propiedades del puff: altura y sigmas.
- Propiedades de las condiciones atmosféricas en los receptores.

Esta segunda opción es la empleada en CALPUFF, puesto que la basada en las propiedades del puff requiere un mayor número de puffs/muestras para representar adecuadamente el penacho, especialmente en receptores próximos al foco emisor (Scire et al., 2000b).

Así, el modelo CALPUFF reproduce la solución del penacho con un coste computacional inferior al 1% del requerido por el otro modelo basado en las propiedades del puff, siendo incluso comparable (aunque, obviamente, mayor) al requerido para resolver la ecuación del penacho gaussiano en estado estacionario.

Scire et al. (2000b) también ensayaron ambos modelos (de puff deformado, y de puff simétrico basado en el receptor) con emisiones no estacionarias, obteniéndose resultados similares. De hecho, los resultados son muy parecidos cuando el receptor está situado en la zona central del penacho, en tanto que en los límites del penacho y del dominio de simulación las diferencias resultan ser mayores. Además, para simulaciones no estacionarias el modelo de puff deformado resulta ser más eficiente que el de puff simétrico circular. Probablemente, porque el puff deformado permite adaptarse mejor a condiciones cambiantes en la dispersión del penacho (especialmente, meteorológicas), que pueden provocar elongamientos o acortamientos del penacho al variar la velocidad del viento.

Ambos modelos de cálculo, puff simétrico y puff deformado, resultan más ventajosos dependiendo la distancia al foco emisor y las condiciones meteorológicas existentes en cada receptor. Por eso CALPUFF ha adoptado un enfoque híbrido puff circular/puff deformado, dependiendo de una relación que cuantifica la propagación del penacho de contaminantes en cada extremo del puff deformado, en toda su longitud:

- Cuando esta relación $\sigma_y/(u d t_e)$ es pequeña, inicialmente CALPUFF almacena información del extremo anterior del puff (que requiere el modelo de puff deformado) además de los datos que describen el borde de ataque (utilizado por ambos modelos de cálculo). Este caso se puede

dar en receptores próximos al foco emisor, cuando la emisión cambia significativamente o cuando se produce un cambio brusco de la dirección del viento, lo que provoca la advección de un segmento grande de puff deformado en una dirección distinta a la de su eje longitudinal. Es por eso que estos casos el puff deformado ofrece mejores resultados.

- Por otra parte, cuando dicha relación es grande, habitualmente en puffs más alejados del foco, el alargamiento inicial del puff deformado puede ser relativamente poco importante para el crecimiento σ_y del penacho, debido a la mayor difusión del contaminante que se ha producido desde la emisión. En tal caso, el uso de un puff circular simétrico es válido y no es necesario conservar la información de la zona anterior del puff.

3.5 Coeficientes de dispersión gaussiana, σ_y y σ_z

Como en todo modelo de dispersión basado en la solución gaussiana, un aspecto clave en la modelización con CALPUFF es el cálculo e los coeficientes de dispersión gaussiana horizontales y verticales, σ_y y σ_z . En el caso de CALPUFF este cálculo se realiza para cada puff al inicio y al final del intervalo de muestreo; y, en el caso de un puff deformado, requiere el cálculo en ambos extremos del mismo. Estos coeficientes también se calculan para cada receptor sobre el cual el penacho contribuye a su concentración en el intervalo de muestreo (sección 3.3).

Los coeficientes de un puff al inicio de un intervalo de muestreo son iguales a los obtenidos al final de la etapa de muestreo anterior, debido a que la forma del penacho es continua entre dos intervalos de muestreo sucesivos. Los coeficientes al final del intervalo de muestreo, o en los receptores cercanos al penacho durante el intervalo de muestreo, se calculan de acuerdo a una relación de crecimiento del puff debido a la turbulencia atmosférica (en las condiciones de dispersión de ese momento), considerando una varianza constante sobre el foco emisor.

El crecimiento del puff debido a la turbulencia atmosférica puede ser formulado ya sea como una función del tiempo (Zannetti, 1990), o como una función de la distancia (Ludwig, 1982), por lo que en la siguiente formulación se empleará un parámetro genérico ξ para cualquiera de los dos.

Los coeficientes de dispersión σ_y y σ_z para una posición/tiempo incrementado $\Delta\xi$ en relación con el comienzo del intervalo de muestreo n , son:

$$\sigma_{y,n}^2(\Delta\xi_y) = \sigma_{yt}^2(\Delta\xi_{yn} + \Delta\xi_y) + \sigma_{ys}^2 + \sigma_{yb}^2 \quad (\text{Ec 3.50})$$

y

$$\sigma_{z,n}^2(\Delta\xi_z) = \sigma_{zt}^2(\Delta\xi_{zn} + \Delta\xi_z) + \sigma_{zb}^2 \quad (\text{Ec 3.51})$$

donde ξ_{yn} y ξ_{zn} son los parámetros del foco virtual (el tiempo y la distancia), que se definen implícitamente por el requisito de que los coeficientes iniciales ($\Delta\xi = 0$) coincidan con los del final del intervalo anterior; además:

- $\sigma_{z,n}, \sigma_{z,n}$ son los coeficientes totales de dispersión horizontal y vertical (m) en determinada posición durante el paso de muestreo n ,
- σ_{yt}, σ_{zt} son las formas funcionales de los coeficientes de dispersión (m) de σ_y y σ_z debidas a la turbulencia atmosférica,
- σ_{yb}, σ_{zb} son las componentes (m) de σ_y y σ_z debidas a la flotabilidad del penacho en el momento de su emisión, y
- σ_{ys} es la componente del coeficiente de dispersión horizontal (m), debida a la dimensión lateral (transversal al viento) de una emisión de área.

El incremento $\Delta\xi$ es siempre positivo cuando se describe el crecimiento del puff durante el intervalo de muestreo, pero para los coeficientes en receptores puede ser tanto positivo como negativo. Por ejemplo, $\Delta\xi$ sería negativo para un receptor situado justo a barlovento del puff en el inicio de un intervalo de muestreo. Esto permite a CALPUFF reproducir el penacho durante condiciones meteorológicas estables con muy pocos puffs. Sin embargo, un valor de $\Delta\xi$ negativo podría aproximar a cero los valores de σ_{yt} y σ_{zt} si no se aplica un límite inferior para dichos coeficientes en el foco emisor. En consecuencia, se impone una ξ_0 inicial, definida implícitamente por las relaciones:

$$\sigma_{yt}^2(\xi_{0,y}) = \sigma_{y0}^2 \quad (\text{Ec 3.52})$$

y,

$$\sigma_{zt}^2(\xi_{0,y}) = \sigma_{z0}^2 \quad (\text{Ec 3.53})$$

donde σ_{y0}, σ_{z0} son los valores iniciales (m) de σ_y y σ_z debidos a la naturaleza del foco emisor o a la dilución inicial rápida de una emisión asociada a un flujo descendente tras un obstáculo, en el caso de focos puntuales, y,
 ξ_0 es la dimensión del foco emisor inicial virtual y se define, implícitamente y por separado, para y y para z .

A mayores, se asume la adición cuadrática de las componentes iniciales de dispersión debidas a los efectos de sobre elevación por flotación de la emisión y, en el caso de un foco de área, a la dimensión lateral del mismo.

Finalmente, las otras dimensiones iniciales del penacho, así que el posterior crecimiento de los puffs emitidos, se obtienen aplicando la aproximación de tiempo virtual (Zannetti, 1990) o distancia virtual (Ludwig, 1982).

En este enfoque de foco virtual el crecimiento del puff actual sólo depende de su tamaño actual y no de la forma en que llegó a ese tamaño. Además, este concepto de foco virtual es particularmente importante cuando un puff puede verse afectado por regímenes de dispersión sustancialmente diferentes en el mismo intervalo de muestreo, al inicio y al final de este. Por ejemplo, si los usos del suelo varían entre los dos puntos, de manera que un puff puede pasar del agua (con la dispersión débil), a la tierra, con convección esencialmente vertical. Otro ejemplo significativo lo constituye un nuevo puff situado en la capa de mezcla al final de la tarde, que puede experimentar una disminución significativa de la turbulencia atmosférica. En ambos casos, CALPUFF calcula el crecimiento subsiguiente durante el intervalo utilizando la turbulencia

apropiada (real o parametrizada), y la tasa de crecimiento apropiada para el tamaño inicial del puff en el intervalo de muestreo.

3.5.1 Componentes derivadas de la turbulencia atmosférica

La estrategia básica en el diseño del módulo de dispersión es permitir el uso de los datos disponibles, más refinados, en el cálculo de σ_{yt} y σ_{zt} mientras que para los algoritmos de respaldo no se requieren de datos especializados para situaciones en las que estos datos no están disponibles. En el cálculo de la contribución de la turbulencia atmosférica al cálculo de los coeficientes de dispersión, CALPUFF dispone de cinco opciones distintas, que requieren tres niveles de datos de entrada diferentes. Estas cinco opciones son:

1. los coeficientes de dispersión se calculan a partir de medidas directas de la turbulencia atmosférica, σ_v y σ_w
2. los coeficientes de dispersión se calculan a partir de estimaciones de σ_v y σ_w derivadas de diversos parámetros de escala micrometeorológicos (u^* , w^* , L , etc)
3. se aplican los coeficientes de dispersión Pasquill-Gifford (PG, EPA, 1995) sobre zonas rurales (calculados siguiendo la aproximación multi-segmento del modelo ISCST (EPA, 1987) y los coeficientes de dispersión de McElroy-Pooler (McElroy y Pooler, 1968) sobre zonas urbanas
4. como en la opción 3, excepto que los coeficientes PG se calculan usando las ecuaciones del modelo MESOPUFF II.
5. Para condiciones estables y neutras se utilizan los coeficientes de dispersión del modelo CTDM (Strimaitis, 1988) (disponiendo de valores de σ_v y σ_w). Para condiciones inestables, los coeficientes se calculan según la opción 3.

Los tres conjuntos de datos de entrada empleados en estas cinco opciones de cálculo son:

- Medidas directas de σ_v y σ_w : Opciones 1 y 5-neutro/estable)
- Parámetros de escala micrometeorológicos, u^* , w^* , L , y h , calculados por el modelo CALMET u otro modelo meteorológico, que generan estimaciones de las componentes verticales y transversales del viento y, a partir de ellas, derivan los parámetros micrometeorológicos a partir de la Teoría de la Similitud (Monin-Obukhov): Opción2.
- Categoría Pasquill-Gifford-Turner (PGT); a este dato se añade la elección que se realice de las ecuaciones para el cálculo de los coeficientes de dispersión, siguiendo las incluidas en los modelos ISCST (opciones 3 y 5-inestable) o MESOPUFF II (opción 4).

Para las opciones de cálculo 1, 2 y 5, las formas generales de σ_{yt} y σ_{zt} (Hanna et al., 1977) son las siguientes:

$$\sigma_{yt} = \sigma_v f_y \left(\frac{t}{t_{ly}} \right) \quad (\text{Ec 3.54})$$

$$\sigma_{zi} = \sigma_w f_z \left(\frac{t}{t_{iz}} \right) \quad (\text{Ec 3.55})$$

donde σ_v es la desviación estándar (m/s) de la componente horizontal transversal al viento,
 σ_w es la desviación estándar (m/s) de la componente vertical del viento,
 t es el tiempo de viaje (s) del penacho hasta el receptor, o hasta la localización en que se calculan los coeficientes de dispersión, y
 t_y, t_z son las escalas de tiempo lagrangianas, horizontal y vertical (s).

Las Ec 3.54 y Ec 3.55 se pueden expresar en términos de las componentes horizontal y vertical (i_y e i_z) de la intensidad de la turbulencia atmosférica utilizando las relaciones siguientes:

$$i_y = \frac{\sigma_v}{u} \cong \sigma_\theta \quad (\text{Ec 3.56})$$

$$i_z = \frac{\sigma_w}{u} \cong \sigma_\varphi \quad (\text{Ec 3.57})$$

donde u es la velocidad del viento (m/s),
 σ_θ es la desviación estándar de la dirección del viento horizontal (en radianes), y
 σ_φ es la desviación estándar de la elevación/descenso vertical del viento (en radianes).

Este método de cálculo es el más realista, puesto que se basa en la medida directa de las propiedades de la turbulencia atmosférica indicadas: variaciones de velocidad medida (σ_v y σ_w) o de las componentes de intensidad de la turbulencia (i_y e i_z). Sin embargo, la validez de este método está altamente condicionada por la calidad de las medidas que, además, no suelen estar disponibles en estaciones meteorológicas estándar. Por ejemplo, medidas inexactas de i_z (una intensidad de difícil medición) puede dar lugar a resultados menos precisos que los obtenidos empleando medidas meteorológicas estándar (más fiables) para su estimación mediante la Teoría de la Similitud. Es por ello que para la aplicación de las (Ec 3.53 y Ec 3.54) se recomienda preferentemente la opción de cálculo 2, que considera también las características del terreno, además de medidas meteorológicas estándar disponibles.

La Teoría de la Similitud ha sido ampliamente estudiada y verificada experimentalmente. Así, muchos experimentos de laboratorio, estudios de campo y simulaciones numéricas (Deardorff y Willis, 1975; Caughey, 1982; Lamb, 1982) han demostrado la importancia y la utilidad de la escala convectiva en la capa límite convectiva. Dicha escala convectiva ha sido aplicada con éxito a los datos recogidos en una amplia variedad de sitios, incluyendo los océanos, las zonas rurales (Hicks, 1985) y las áreas urbanas (Ching et al., 1985). Del mismo modo, la escala convectiva ha sido aplicada en la capa límite estable (Hunt, 1982; Nieuwstadt, 1984). El modelo micrometeorológico (Sección 2.5) relaciona de forma explícita las características aerodinámicas y térmicas de la superficie con el flujo de calor sensible y las tasas de transferencia de momento que se utilizan en el cálculo de los coeficientes de dispersión.

Weil (1985) y Briggs (1985) proporcionan diversas revisiones en el uso de la Teoría de la Similitud en los modelos de difusión atmosférica. En la capa límite convectiva, Weil distingue las características de la turbulencia atmosférica en tres capas:

1. Capa superficial, $z \leq 0,1 h$ $\sigma_v \sim$ constante con la altura,
 σ_w aumenta con la altura
2. Capa de mezcla, $0,1 h < z < 0,8 h$ $\sigma_v \sim$ constante con la altura,
 $\sigma_w \sim$ constante con la altura
3. Capa de arrastre, $z > 0,8 h$ σ_v disminuye con la altura,
 σ_w disminuye con la altura.

En la capa superficial, Panofsky et al. (1977) proponen las siguientes relaciones:

$$\sigma_v = u_* \sqrt{4 + 0,63 \sqrt{\left(\frac{-h}{L}\right)^2}} \quad (\text{Ec 3.58})$$

$$\sigma_w = u_* \sqrt{1,6 + 2,93 \sqrt{\left(\frac{-z}{L}\right)^2}} \quad (\text{Ec 3.59})$$

donde u_* es la velocidad de fricción superficial (m/s),
 L es la longitud de Monin-Obukhov (m).

Hicks (1985) sugiere lo siguiente para la capa de mezcla (0,1 a 0,8 h):

$$\sigma_v = \sqrt{3,6u_*^2 + 0,35w_*^2} \quad (\text{Ec 3.60})$$

$$\sigma_w = \sqrt{1,2u_*^2 + 0,35w_*^2} \quad (\text{Ec 3.61})$$

En la capa límite neutra, Arya (1984) señala un decrecimiento monótono de los valores de σ_v y σ_w a lo largo de la capa de mezcla. Usando la relación de Blackadar y Tennekes (1968) para la altura de la capa límite neutra, los resultados de Arya se pueden expresar como:

$$\sigma_v = 1,8e^{-\frac{0,9z}{h}} \quad (\text{Ec 3.62})$$

$$\sigma_w = 1,3e^{-\frac{0,9z}{h}} \quad (\text{Ec 3.63})$$

Mientras que para la capa límite estable, Nieuwstadt (1984) encuentra que σ_v y σ_w tienen relaciones constantes con la velocidad de fricción local.

$$\frac{\sigma_v}{u_{*l}} = C_v \quad (\text{Ec 3.64})$$

$$\frac{\sigma_w}{u_{*l}} = C_w \quad (\text{Ec 3.65})$$

donde, u_{*l} es la velocidad de fricción local (m/s), y C_v y C_w son constantes.

Hanna et al., 1986, sugieren que $C_v \approx 1,6$. Mientras que Nieuwstadt (1984) sugiere que $C_w \approx 1,3$ y la velocidad de fricción local u_{*l} se puede expresar como:

$$u_{*z} = u_* \sqrt[4]{\left(\frac{1-z}{h}\right)^3} \quad (\text{Ec 3.66})$$

La modelización requiere una formulación que produzca los valores adecuados y las variaciones verticales para σ_v y σ_w en los límites convectivo, neutro, y estable; y que proporcione además un mecanismo para la interpolación de los resultados para las condiciones intermedias, sin discontinuidades poco realistas desde el punto de vista físico. Las siguientes ecuaciones para la capa límite neutra-convectiva se basan en los datos discutidos anteriormente y satisfacen estas condiciones para $L \leq 0$. La formulación para la capa de arrastre se basa en los datos publicados por Caughey (1982).

Capa superficial, $z \leq 0,1 h$
$$\sigma_v = \sqrt{4u_*^2 a_n^2 + 0,35w_*^2} \quad (\text{Ec 3.67})$$

$$\sigma_w = \sqrt{1,6u_*^2 a_n^2 + 2,9u_*^2 \sqrt{\left(\frac{-z}{L}\right)^2}} \quad (\text{Ec 3.68})$$

$$a_n^2 = 0,9e^{\frac{-0,9z}{h}} \quad (\text{Ec 3.69})$$

Capa de mezcla, $0,1 h < z < 0,8 h$
$$\sigma_v = \sqrt{4u_*^2 a_n^2 + 0,35w_*^2} \quad (\text{Ec 3.70})$$

$$\sigma_w = \sqrt{1,15u_*^2 a_n^2 + 0,35w_*^2} \quad (\text{Ec 3.71})$$

Capa de arrastre, $z > 0,8 h$
$$\sigma_v = \sqrt{4u_*^2 a_n^2 + 0,35w_*^2} \quad (\text{Ec 3.72})$$

$0,8 h < z < 1,0 h$
$$\sigma_w = \sqrt{1,15u_*^2 a_n^2 + a_{c1} 0,35w_*^2} \quad (\text{Ec 3.73})$$

$$a_{c1} = \frac{1}{2} + \frac{h-z}{0,4h} \quad (\text{Ec 3.74})$$

$1,0 h < z < 1,2 h$
$$\sigma_w = \sqrt{1,15u_*^2 a_n^2 + a_{c2} 0,35w_*^2} \quad (\text{Ec 3.75})$$

$$a_{c2} = \frac{1}{3} + \frac{1,2h-z}{1,2h} \quad (\text{Ec 3.76})$$

En la capa límite neutro-estable, pueden usarse las siguientes ecuaciones para interpolar los perfiles verticales de σ_v y σ_w como función de la estabilidad. Al igual que las ecuaciones neutro-convectivas, estas proporcionan los valores adecuados para los límites de estabilidad con $L > 0$.

$$\sigma_v = u_* \frac{1,6C_s \frac{z}{L} + 1,8a_n}{1 + \frac{z}{L}} \quad (\text{Ec 3.77})$$

$$\sigma_w = 1,3u_* \frac{C_s \frac{z}{L} + a_n}{1 + \frac{z}{L}} \quad (\text{Ec 3.78})$$

$$C_s = \sqrt[4]{\left(1 - \frac{z}{h}\right)^3} \quad (\text{Ec 3.79})$$

Se supone que los valores basados en la Teoría de la Similitud de σ_v y σ_w , de la que se derivan σ_y y σ_z , representan valores promedios horarios. Deben aplicarse valores mínimos de σ_v y σ_w con el objetivo de proporcionar tasas de crecimiento del penacho distintas de cero por encima de la altura de mezcla; y para evitar problemas numéricos asociados a dimensiones de penacho cercanas a cero. Hanna et al. (1986) sugieren un valor mínimo para el promedio horario, de $\sigma_v \cong 0,5$ m/s; lo que es significativamente más alto que los σ_v que se derivan de las curvas de estabilidad PGT para las categorías E y F. En CALPUFF el usuario también puede introducir sus valores mínimos apropiados y predeterminados para σ_v y σ_w .

Las ecuaciones de Ec 3.67 a Ec 3.76 han sido probadas con los datos experimentales originales que proporcionaron la base para las formulaciones originales de Panofsky et al. (1977) y Hicks (1985). Los resultados indicaron que estas ecuaciones modificadas son comparables con las ecuaciones originales y con las medidas experimentales. Por otra parte, estas ecuaciones modificadas tienen la ventaja de permitir una transición suave y continua hacia los resultados de estabilidad neutra de Arya (1984).

Irwin (1983) evaluó varios esquemas para la determinación de las funciones f_y y f_z y concluyó que la mejor solución general es la parametrización sugerida por Draxler (1976).

$$f_y = \frac{1}{1 + 0,9 \sqrt{\frac{t}{1000}}} \quad (\text{Ec 3.80})$$

$$f_z = \frac{1}{1 + 0,9 \sqrt{\frac{t}{500}}}, \quad \text{para } L < 0 \quad (\text{Ec 3.81})$$

$$f_z = \frac{1}{1 + 0,945 \left(\frac{t}{100}\right)^{0,806}}, \quad \text{para } L > 0 \quad (\text{Ec 3.82})$$

Estas ecuaciones se utilizan en CALPUFF con las opciones de dispersión 1 y 2. Por otra parte, cuando se selecciona la opción de dispersión 5 y la longitud de Monin-Obukhov es positiva (condición neutra a estable), las funciones f_y y f_z se toman siguiendo el modelo CTDMPLUS (Perry et al., 1989):

$$f_y = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{ut}{20000}}} \quad \text{para } L < 0 \quad (\text{Ec 3.83})$$

$$f_z = \frac{1}{\sqrt{1 + \sigma_w t \left(\frac{1}{0,72z} + \frac{N}{0,54\sigma_w} \right)}}, \text{ para } L > 0 \quad (\text{Ec 3.84})$$

donde z es la altura sobre el suelo, y N es la frecuencia de Brunt-Vaisala.

A distancias de transporte más largas CALPUFF ofrece la opción de usar las ecuaciones de Heffter (1965) ($\sigma_{yt} \approx t$, $\sigma_{zt} \approx t^{1/2}$). La transición dependiente de la distancia a los coeficientes de dispersión dependientes del tiempo de Heffter se produce en CALPUFF cuando la dimensión lateral del penacho alcanza un tamaño crítico predeterminado de 550 m. Asumiendo relaciones de dispersión de PG en condiciones neutras, un penacho alcanzará un valor de 550 m para σ_y después de una distancia de 10 km. El uso de la ecuación de Heffter para σ_z junto con σ_y es opcional.

El usuario también puede desear tener un crecimiento determinado del puff sobre la base de una malla de datos de entrada de la categoría de estabilidad PGT. El enfoque es particularmente útil cuando se comparan los resultados del modelo con las predicciones de un modelo regulatorio para estado estacionario (como ISC3 o AERMOD) o cuando se pretende compatibilizar el uso de CALPUFF con los requisitos regulatorios. En este caso, el usuario puede seleccionar alguno de los modelos para σ_y y σ_z incluidos en el modelo ISC3 (EPA, 1995); (opción de dispersión 3) o de los incluidos en el modelo MESOPUFF II (Scire et al., 1984b) (opción de dispersión 4) para la aplicación de las curvas de dispersión PGT.

Tabla 3.1 Parámetros para calcular σ_y según la categoría de estabilidad de Pasquill sobre suelo rural, σ_y (m) y x (km), (EPA, 1995).

	$\sigma_y = 465,11628x \tan \theta$ $\theta = 0,017453293(c - d \ln x)$	
Categoría de estabilidad de Pasquill	c	d
A	24,1670	2,5334
B	18,3330	1,8096
C	12,5000	1,0857
D	8,3330	0,72382
E	6,2500	0,54287
F	4,1667	0,36191

La opción de dispersión 3 también requiere la especificación del tipo de uso de suelo, que a su vez determina si se utilizan las curvas de dispersión ISC para condiciones "rurales" o "urbanas". Las ecuaciones de dispersión "rural" y los valores de sus parámetros empíricos para cada categoría de estabilidad de Pasquill se presentan en la Tabla 3.1 y la Tabla 3.2 para σ_y y σ_z ,

respectivamente; estas ecuaciones son el resultado de la parametrización de las curvas de dispersión PGT.

Tabla 3.2 Parámetros para calcular σ_z , según la categoría de estabilidad de Pasquill sobre suelo rural, σ_z (m), (EPA, 1995).

Categoría de estabilidad de Pasquill	$\sigma_z = ax^b$		
	x(km)	a	b
A**	<0,10	122,800	0,94470
	0,10 - 0,15	158,080	1,05420
	0,16 - 0,20	170,220	1,09320
	0,21 - 0,25	179,520	1,12620
	0,26 - 0,30	217,410	1,26440
	0,31 - 0,40	258,890	1,40940
	0,41 - 0,50	346,750	1,72830
	0,51 - 3,11	453,850	2,11660
	>3,11	**	**
B**	<0,20	90,673	0,93198
	0,21 - 0,40	98,483	0,98332
	>0,40	109,300	1,09710
C**	Todo	61,141	0,91465
D	<0,30	34,459	0,86974
	0,31 - 1,00	32,093	0,81066
	1,01 - 3,00	32,093	0,64403
	3,01 - 10,00	33,504	0,60486
	10,01 - 30,00	36,650	0,56589
	>30,00	44,053	0,51179
	E	<0,10	24,260
0,10 - a 0,30		23,331	0,81956
0,31-1,00		21,628	0,75660
1,01-2,00		21,628	0,63077
2,01-4,00		22,534	0,57154
4,01-10,00		24,703	0,50527
10,01-20,00		26,970	0,46713
20,01-40,00		35,420	0,37615
>40,00		47,618	0,29592
F		<0,20	15,209
	0,21-0,70	14,457	0,78407
	0,70-1,00	13,953	0,68465
	1,01-2,00	13,953	0,63227
	2,01-3,00	14,823	0,54503
	3,01-7,00	16,187	0,46490
	7,01-15,00	17,836	0,41507
	15,01-30,00	22,651	0,32681
	30,01-60,00	27,074	0,27436
	>60,00	34,219	0,21716

** Si el valor calculado de σ_z excede 5000 m, se fija igual a este valor.

Por su parte, las ecuaciones de dispersión "urbanas" y sus parámetros empíricos se basan en la caracterización de Briggs (Gifford, 1976) de los datos de dispersión de Saint. Louis analizados por McElroy y Pooler (1968) y se presentan en la **¡Error! La autoreferencia al marcador no es válida.** y la Tabla 3.4 para σ_y y σ_z , respectivamente.

Tabla 3.3 Ecuaciones de Briggs para el cálculo de σ_y sobre suelo urbano, según McElroy-Pooler, x (m), (EPA, 1995).

Categoría de estabilidad de Pasquill	$\sigma_y(m)$
A-B	$\frac{1}{\sqrt{0,32x(1,0+0,0004x)}}$
C	$\frac{1}{\sqrt{0,22x(1,0+0,0004x)}}$
D	$\frac{1}{\sqrt{0,16x(1,0+0,0004x)}}$
E-F	$\frac{1}{\sqrt{0,11x(1,0+0,0004x)}}$

Tabla 3.4 Ecuaciones de Briggs para el cálculo de σ_z sobre suelo urbano, según McElroy-Pooler, x (m), (EPA, 1995).

Categoría de estabilidad de Pasquill	$\sigma_z(m)$
A-B	$\sqrt{0,24x(1,0+0,001x)}$
C	0,2x
D	$\frac{1}{\sqrt{0,14x(1,0+0,0003x)}}$
E-F	$\frac{1}{\sqrt{0,08x(1,0+0,0015x)}}$

Si se selecciona la forma MESOPUFF II de las curvas de dispersión dependientes de la estabilidad PGT (opción de dispersión 4), las funciones de crecimiento del puff toman la forma:

$$\sigma_y = a_y x^{b_y} \quad (\text{Ec 3.85})$$

$$\sigma_z = a_z x^{b_z} \quad (\text{Ec 3.86})$$

donde a_y , b_y , a_z , b_z son los coeficientes y exponentes que dependen de la estabilidad presentados en la Tabla 3.5.

Tabla 3.5 Coeficientes de la tasa de crecimiento según MESOPUFF II (Scire et al., 1984b).

Categoría de estabilidad de Pasquill	a_y	b_y	a_z	b_z
A	0,36	0,9	0,00023	2,10
B	0,25	0,9	0,058	1,09
C	0,19	0,9	0,11	0,91
D	0,13	0,9	0,57	0,58
E	0,096	0,9	0,85	0,47
F	0,063	0,9	0,77	0,42

Las orientaciones regulatorias de la EPA de EE.UU. indican que las curvas de dispersión definidas anteriormente, son adecuadas para predecir las concentraciones horarias promedio. Por su parte, la EPA de Victoria (Australia) basa las curvas de dispersión en promedios 3 minutos y una

longitud de rugosidad de la superficie (z_0) de 0,03 m. Por eso, CALPUFF tiene además la opción de escalar los coeficientes de dispersión para diferentes tiempos de promedio o longitudes de rugosidad de la superficie. El ajuste del tiempo promedio sólo se aplica a σ_y y tiene la forma:

$$\sigma_y(\tau_{ave}) = \sigma_y(\tau_{base}) \left(\frac{\tau_{ave}}{\tau_{base}} \right)^{0,2} \quad (\text{Ec 3.87})$$

donde τ_{base} es el tiempo promedio (minutos) considerando curvas de dispersión estándar (60 minutos en EE.UU., 3 minutos en Australia),
 τ_{ave} es el tiempo promedio (minutos) de las concentraciones previstas por CALPUFF ($\tau_{ave} \leq 60$ minutos), y
 $\sigma_y(\tau_{base}), \sigma_y(\tau_{ave})$ son los valores de σ_y considerando tiempos promedio de τ_{base} y τ_{ave} minutos, respectivamente.

El valor de τ_{base} se define en CALPUFF, como 60 minutos. La variable τ_{ave} es el tiempo de promedio especificado por el usuario. Este valor de τ_{ave} no debe superar los 60 minutos ya que las concentraciones promedios multihorarios se calculan de forma explícita a partir de los promedios horarios.

CALPUFF tiene además la opción de ajustar las curvas de dispersión para σ_z mediante la longitud de rugosidad basada en Smith (1972) tal como se aplica en el modelo AUSPLUME (Lorimer, 1986). Este ajuste es el más apropiado para emisiones cercanas a la superficie y no se recomienda para emisiones a alturas de chimenea convencionales (por ejemplo, con fuentes de más de 100 m de altura). El valor de σ_z con este ajuste viene dado por:

$$\sigma'_z = a' x^{b'} \quad (\text{Ec 3.88})$$

$$a' = a \cdot 1,585(1000)^\beta z_0^{0,1301} \quad (\text{Ec 3.89})$$

$$b' = b - \beta \quad (\text{Ec 3.90})$$

$$\beta = 0,0777 + 0,0215 \ln(z_0) \quad (\text{Ec 3.91})$$

donde z_0 es la longitud de rugosidad de la superficie (m),
 x es la distancia en la dirección del viento (m), y
 a, b son los parámetros de la ecuación de ajuste de la curva de dispersión (véase la Tabla 3.2).

Para σ_y , el ajuste es:

$$\sigma'_y = \sigma_y \left(\frac{z_0}{z_0(ref)} \right)^{0,2} \quad (\text{Ec 3.92})$$

donde la longitud de rugosidad de referencia ($z_0(ref)$) es de 0,03 metros, y el primer término corresponde al valor de σ_y ajustado con la longitud de rugosidad real z_0 .

Se recomienda que la corrección en superficie se limite a longitudes de rugosidad de superficie no mayores de un metro. El promedio de tiempo y los ajustes de rugosidad de la superficie se pueden aplicar de manera análoga a cualquiera de las curvas de dispersión rurales, ISC3 o MESOPUFF II PG. Los ajustes no se aplican a las curvas urbanas de McElroy-Pooler o a las curvas de

dispersión basadas en la Teoría de la Similitud, que ya tienen el efecto de la rugosidad implícitamente incluido.

3.5.2 Flotabilidad - Dispersión inducida

El efecto de la flotabilidad del penacho en los coeficientes de dispersión se parametriza en términos de la elevación del penacho (Pasquill, 1976; Irwin, 1979):

$$\sigma_{yb} = \frac{\Delta H}{3,5} \quad (\text{Ec 3.93})$$

$$\sigma_{zb} = \frac{\Delta H}{3,5} \quad (\text{Ec 3.94})$$

donde ΔH es la elevación del penacho (m). La dispersión por flotabilidad inducida (BID) se incluye de forma automática para todas las opciones de cálculo de los coeficientes de dispersión (sección 0). CALPUFF utiliza la metodología empleada por el modelo ISC3. Esto incluye el uso de la elevación del penacho de transición en la ecuación, incluso si sólo se selecciona la opción de sobreelevación máxima o final para la altura del penacho en la ecuación de la concentración (Ec 3.14). Sin embargo, no se tiene en cuenta cuando se utiliza el algoritmo de la corriente descendente tras obstáculos de Schulman-Scire (sección 3.6).

3.5.3 Tamaño inicial del penacho

Las emisiones de focos puntuales sujetos a efectos del flujo descendente tras obstáculos experimentan un rápido crecimiento inicial, debido a la intensidad de la turbulencia inducida por la altura del obstáculo en la zona de sombra. En estos casos, el modelo de la corriente descendente tras obstáculos (sección 3.6) se utiliza para calcular las dimensiones iniciales del penacho proveniente de emisiones de focos puntuales, en función de las dimensiones del obstáculo, la altura de la chimenea, el flujo del impulso y las condiciones meteorológicas.

3.5.4 División del puff (cizalladura vertical del viento)

La cizalladura vertical del viento puede ser, a veces, un factor importante que afecte el transporte y la dispersión del penacho. El cambio de la velocidad y dirección del viento con la altura provoca una advección diferencial del contaminante emitido a diferentes alturas. Incluso para el material emitido a una altura dada, cuando los penachos se vuelven lo suficientemente grandes el corte transversal del penacho puede provocar que la porción superior se transporte en una dirección diferente que la de la parte inferior. Cuando la mezcla vertical lleva todo el penacho al suelo la dispersión horizontal efectiva del mismo puede ser significativamente mejorada como resultado del transporte diferencial. CALPUFF puede modelizar explícitamente efectos de la cizalla del viento sobre diferentes puffs al permitir que cada uno sea arrastrado de forma independiente por su velocidad local y dirección del viento promedios, y se mezcle verticalmente hasta el suelo. El

viento promedio para cada puff se obtiene a partir de perfiles de velocidad y dirección del viento desde la parte superior a la parte inferior del puff. Por ejemplo, emisiones provenientes de dos focos coincidentes en la horizontal, pero con diferentes alturas de liberación serán transportados por CALPUFF en direcciones y velocidades diferentes si los campos de viento indican que existe tal cizalla.

Para la cizalladura de una solo puff CALPUFF permite, en primer lugar, una mezcla correcta del mismo, para luego dividirlo en dos o más pedazos cuando la cizalladura por cada puff sea importante. A continuación, cada porción del puff se transporta y se dispersa de forma independiente (Figura 3.7). Un solo puff se puede dividir varias veces si se mantiene en el dominio de simulación el tiempo suficiente. El puff que aún mantenga la distribución gaussiana en la vertical no se dividirá, debido a que los efectos de cizalla del viento no son importantes en todas las aplicaciones del modelo, dado que la división de puffs aumenta los requisitos computacionales. De hecho, la característica de división del puff es una opción que puede ser modificada u obviada.

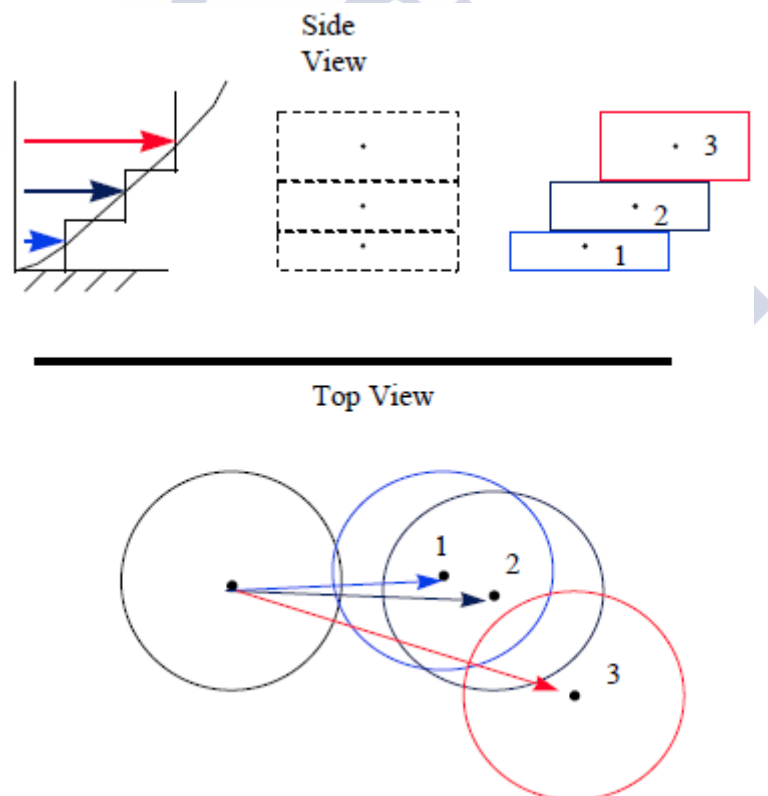


Figura 3.7 Ilustración del mecanismo de división del puff debido a la cizalla del viento y los efectos resultantes sobre su transporte (Scire et al., 2000b).

La cizalladura del puff sí es importante en puffs bien mezclados tras la aparición de flujos superficiales estables desarrollados durante la noche. En estos casos la altura de capa de mezcla cambia de convectiva a mecánica, de modo que la altura resultante sea pequeña en comparación con la altura de mezcla máxima experimentada por el puff. Además, dicha altura de mezcla

debería ser significativa, ya que de serlo bastaría con considerar el flujo a través del puff para proporcionar una caracterización adecuada de su transporte.

Así, un puff se puede dividir en varias ocasiones, siempre que se cumplan las siguientes condiciones:

- 1) El puff debe estar en contacto con el suelo.
- 2) La altura de la capa de mezcla anterior debe superar un valor mínimo permitido.
- 3) La relación de la altura de la capa de mezcla resultante con la máxima anterior, para cada puff, debe ser menor que un valor máximo permitido.

3.5.5 Enfoque P.D.F. para la capa límite convectiva

Las ecuaciones de puff y puff deformado descritas en la sección 3.3 utilizan una distribución gaussiana para caracterizar la distribución vertical del material del puff dentro de la capa límite convectiva. Se emplean focos emisores imagen o especulares virtuales, colocadas por encima de la capa de mezcla y por debajo de la superficie, para representar el atrapamiento de la masa dentro de la capa y, a medida que el puff crece, la capa se llena rápidamente y la distribución vertical resultante se vuelve uniforme. En este marco, el principal efecto de los movimientos convectivos en la capa de mezcla es causar un rápido crecimiento en el tamaño vertical del penacho. Dependiendo de la opción de dispersión seleccionada en CALPUFF, esta tasa de crecimiento será parametrizada en función de la categoría de estabilidad, la escala de la intensidad de turbulencia medida o la calculada a partir de los parámetros de la capa superficial.

Ya en los años 90 del siglo pasado han madurado las técnicas de modelización que reconocen la asimetría del proceso de dispersión vertical en la capa límite convectiva. Estas técnicas tienen en cuenta las diferencias entre la distribución y la fuerza de las corrientes ascendentes y descendentes en la capa, que se relacionan con la distribución de la concentración de contaminante. Una de las técnicas más simples y eficaces es el enfoque PDF, o función de densidad de probabilidad, que aproxima la función de densidad de probabilidad de la posición vertical de la masa del puff en la capa a la función de densidad de probabilidad sesgada de la velocidad vertical. Superponiendo las dos distribuciones gaussianas, el modelo PDF produce un "penacho dual" que describe la evolución de un penacho que partió inicialmente hacia el suelo en una corriente (media) descendente, y una segunda columna que se eleva inicialmente hacia la parte superior de la capa de mezcla en una corriente (media) de aire ascendente. Los "reflejos" posteriores tanto desde el suelo como desde el límite superior de la capa son simulados como focos virtuales especulares.

Debido a que cada uno de estos penachos tiene su propia velocidad vertical media y su propia velocidad de propagación, la distribución vertical resultante de la masa estará tan sesgada como

las distribuciones observadas. Al penacho inicial de la corriente descendente se le llama fuente directa, ya que se desplaza directamente desde una fuente elevada (considerando la velocidad de elevación del penacho) hasta el suelo, mientras que al penacho inicial de corriente ascendente se le llama fuente indirecta, ya que llega al suelo sólo después de atravesar toda la altura de la capa de mezcla tras reflejarse en el límite superior de esta.

Weil et al., 1997, han ampliado la formulación PDF para tener en cuenta la tendencia de penachos con mucha sobreelevación de alcanzar la parte superior de la capa de mezcla, permaneciendo allí durante algún tiempo antes de que los remolinos convectivos sean capaces de superar su flotabilidad y mezclen su masa de contaminante hasta la superficie. Esta formulación es la base de la empleada en el modelo AERMOD y también ha sido adaptada para su uso en CALPUFF.

3.5.5.1 Parámetros del enfoque PDF para la velocidad vertical

Weil et al. (1997) aproximan la PDF de la velocidad vertical en la capa límite convectiva, p_w , como la superposición de dos distribuciones gaussianas:

$$p_w = \frac{\lambda_1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{w1}} e^{-\frac{(w-\bar{w}_1)^2}{2\sigma_{w1}^2}} + \frac{\lambda_2}{\sqrt{2\pi}\sigma_{w2}} e^{-\frac{(w-\bar{w}_2)^2}{2\sigma_{w2}^2}} \quad (\text{Ec 3.95})$$

donde los pesos dados a las dos distribuciones, λ_1 y λ_2 , suman la unidad. La \bar{w}_j y σ_{wj} ($j=1, 2$) son, respectivamente, la velocidad vertical media y su desviación estándar para cada distribución, y se asume que son proporcionales a σ_w . Los subíndices 1 y 2 denotan las corrientes ascendente y descendente, respectivamente.

Definiendo el parámetro $R=\sigma_{w1}/\bar{w}_1=-\sigma_{w2}/\bar{w}_2$, Weil, 1990, encontró la solución para \bar{w}_1 y \bar{w}_2 , siendo esta:

$$\frac{\bar{w}_1}{\sigma_w} = \frac{\gamma_1 S}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(\gamma_1^2 S^2 + \frac{4}{\gamma_2})} \quad (\text{Ec 3.96})$$

donde S es la asimetría, y

$$\gamma_1 = \frac{1+R^2}{1+3R^2} \quad \gamma_2 = 1+R^2 \quad (\text{Ec 3.97})$$

$$\lambda_1 = \frac{\bar{w}_2}{\bar{w}_2 - \bar{w}_1} \quad \lambda_2 = \frac{\bar{w}_1}{\bar{w}_2 - \bar{w}_1} \quad (\text{Ec 3.98})$$

Aunque Weil et al. (1997) encontraron que $R=1$ produce una buena concordancia entre los campos de concentración modelados y medidos en el laboratorio, finalmente eligieron $R=2$ y consideran $S=0$ a fin de garantizar la continuidad de esta solución con la gaussiana en la frontera con la capa límite neutra ($w=0$).

Por encima del 90% de la capa límite convectiva la varianza de la velocidad vertical σ_w^2 se puede suponer uniforme (Weil, 1988) al igual que la asimetría (Wyngaard, 1988). En ese caso, Weil et al. (1997) utilizan la forma:

$$\sigma_w^2 = 1,2u_*^2 + 0,31w_*^2 \quad (\text{Ec 3.99})$$

donde el valor de 1,2 corresponde al límite neutro de Hicks (1985) ($w=0$) y el valor de 0,31 es consistente con el límite convectivo de Weil y Brower's (1984) ($u=0$) o $\sigma_w/w=0,56$. En el límite convectivo se toma $S=0,6$, que es el valor promediado verticalmente a partir de los experimentos de Minnesota (Wyngaard, 1988), y la correspondiente $\bar{w}^3 = 0,6\sigma_w^3 = 0,105w_*^3$. Para valores arbitrarios de u_* y w_* , la asimetría se expresa como:

$$S = 0,105 \frac{w_*^3}{\sigma_w^3} \quad (\text{Ec 3.100})$$

de esta manera, cuando $w_* \rightarrow 0$, $S \rightarrow 0$ y cuando $w_*/u_* \gg 1$, $S=0,6$.

3.5.5.2 Tratamiento de la fuente directa

La PDF, p_z , a la altura de una partícula matemática, z_p , que representa una masa de contaminante, se puede determinar a partir de p_w siempre que z_p sea una función monótona de w :

$$p_z = p_w \left[w(z_p; x) \right] \left| \frac{dw}{dz_p} \right| \quad (\text{Ec 3.101})$$

Weil et al. (1997) encontraron la relación entre z_p y w mediante la superposición de la elevación del penacho ΔH por encima de la parte superior de la chimenea, h_s , y el desplazamiento vertical debido a w :

$$z_p = h_s + \Delta h + \frac{wx}{U} \quad (\text{Ec 3.102})$$

o

$$w = (z_p - h_s - \Delta h) \frac{U}{x} \quad (\text{Ec 3.103})$$

Con esto y p_w , encontraron el campo de concentración integrado en el viento transversal para dar

$$C_d^y(x, z) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}U} \left(\frac{\lambda_1}{\sigma_{z1}} e^{-\frac{(z-\psi_1)^2}{\sigma_{z1}^2}} + \frac{\lambda_2}{\sigma_{z2}} e^{-\frac{(z-\psi_2)^2}{\sigma_{z2}^2}} \right) \quad (\text{Ec 3.104})$$

donde

$$\psi_j = h_s + \Delta h + \frac{\bar{w}_f x}{U} \quad \text{con } j = 1 \text{ ó } 2, \quad (\text{Ec 3.105})$$

y la correspondiente escala σ_{zj} con σ_{wj} .

Al introducir una fuente virtual en $z=-h_s$, y otras fuentes adicionales en $z=2z_i+h_s$, $-2z_i-h_s$, ..., el resultado es:

$$C_d^y(x, z) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}U} \left(\frac{\lambda_1}{\sigma_{z1}} \sum_{n=0}^N \left(e^{-\frac{(z-2nz_i-\psi_1)^2}{\sigma_{z1}^2}} + e^{-\frac{(z+2nz_i+\psi_1)^2}{\sigma_{z1}^2}} \right) + \frac{\lambda_2}{\sigma_{z2}} \sum_{n=0}^N \left(e^{-\frac{(z-2nz_i-\psi_2)^2}{\sigma_{z2}^2}} + e^{-\frac{(z+2nz_i+\psi_2)^2}{\sigma_{z2}^2}} \right) \right) \quad (\text{Ec 3.106})$$

donde N es el número de fuentes virtuales. Debido a que los términos de fuentes se añaden a intervalos de $2z_i$, con el mismo signo que la ψ_j , (Ec 3.105) el penacho de corriente ascendente ($j=1$) tendrá poco impacto una vez que pasa por encima de la altura de la capa ($\psi_1 > 0$), mientras que la contribución de corriente descendente ($j=2$) produce repetidamente un impacto a la altura z ($\psi_2 < 0$). Esta es la representación matemática de la trayectoria que refleja el penacho de la fuente directa.

3.5.5.3 Tratamiento fuente indirecta

La fuente indirecta representa el material del penacho que escapa a través de la parte superior de la capa delimitada en la representación anterior, pero no penetra físicamente en la de inversión térmica. Se desarrolla entonces por separado para cada penacho emitido. Weil et al. (1997) han desarrollado un tratamiento que proporciona una variación continua de C^y con el flujo flotante adimensional, f^* , y otras variables. Esta aproximación simplifica la solución computacional dada en un modelo anterior (Hanna et al., 1986), que utiliza una fuente distribuida con x en la parte superior de la CBL para satisfacer la condición de flujo cero.

Además introducen un aumento adicional de la altura del penacho Δh_i para simular la tendencia de la flotabilidad a mantener el penacho en altura. Con este cambio, que incorpora tanto la elevación del penacho como la velocidad vertical a la altura de la capa, se obtiene:

$$z_p = 2z_i - h_s - \Delta h - \frac{wx}{U} + \Delta h_i \quad (\text{Ec 3.107})$$

de modo que

$$w = -(z_p - 2z_i + h_s + \Delta h_r) \frac{U}{x} \quad (\text{Ec 3.108})$$

donde

$$\Delta h_r = \Delta h - \Delta h_i \quad (\text{Ec 3.109})$$

Incluyendo entonces las fuentes virtuales en $z=-2z_i+h_s$, $4z_i-h_s$, $-4z_i+h_s$, etc. Además, para tener en cuenta el flujo cero en $z=0$, z_i , $i-h_s$, $4z_i-h_s$, $-4z_i-h_s$, el campo de concentración integrado en el viento cruzado para la fuente indirecta será:

$$C_r^y(x, z) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}U} \left(\frac{\lambda_1}{\sigma_{z1}} \sum_{n=1}^N \left(e^{-\frac{(z-2nz_i+\psi_1)^2}{2\sigma_{z1}^2}} + e^{-\frac{(z+2nz_i-\psi_1)^2}{2\sigma_{z1}^2}} \right) + \frac{\lambda_2}{\sigma_{z2}} \sum_{n=1}^N \left(e^{-\frac{(z-2nz_i+\psi_2)^2}{2\sigma_{z2}^2}} + e^{-\frac{(z+2nz_i-\psi_2)^2}{2\sigma_{z2}^2}} \right) \right) \quad (\text{Ec 3.110})$$

donde

$$\psi_j = h_s + \Delta h_r + \frac{\bar{w}_f x}{U} \quad \text{con } j = 1 \text{ ó } 2 \quad (\text{Ec 3.111})$$

Esta vez $2nz_i$ y Ψ_j tendrán signos opuestos, de modo que la porción de corriente descendente de esta expresión tendrá poco impacto a una altura z en la capa, una vez que Ψ_2 sea suficientemente negativa, mientras que la porción de corriente ascendente cruzará varias veces el nivel z .

Weil et al. (1997) desarrollaron un incremento eficaz Δh_i del penacho, teniendo en cuenta la energía que rige el descenso de los elementos flotantes del penacho de la parte superior de la capa límite convectiva que llegan hasta la superficie impulsados por corrientes descendentes. Para un elemento con una altura inicial $z_p=z_i$, arrastrado por el aire con una velocidad vertical inicial $-w$, su velocidad vertical y trayectoria estarán dadas por:

$$\begin{aligned} w_p &= -w + g't \\ z_p &= z_i - wt + \frac{g't^2}{2} \end{aligned} \quad (\text{Ec 3.112})$$

donde $g'=g\Delta\rho/\rho_a$, $\Delta\rho=\rho_a-\rho$ y ρ es la densidad del penacho cuando un elemento del mismo comienza su desplazamiento hacia abajo. Cuando se llega al suelo, $w_p=0$ y $z_p=0$, de modo que el tiempo necesario para que se produzca este desplazamiento será $t=w/g$.

Se usa la w correspondiente para el desplazamiento como el criterio básico que rige el inicio del desplazamiento del elemento de penacho, desde la parte superior de la capa límite convectiva, pero modificado mediante la constante α :

$$w = \sqrt{\frac{2g'z_i}{\alpha}} \quad (\text{Ec 3.113})$$

donde α es aproximadamente 1,4.

Para un penacho originado en la parte superior de la capa límite convectiva, la trayectoria de sus elementos arrastrados por las corrientes descendentes será:

$$z_p = z_i + \Delta h_i - \frac{wx}{U} \quad (\text{Ec 3.114})$$

Esta trayectoria se cruza con la altura $z=z_i$ cuando $\Delta h_i=wx/U$, de modo que

$$\Delta h_i = \sqrt{\frac{g'z_i}{\alpha}} \frac{x}{U} \quad (\text{Ec 3.115})$$

Para un penacho atrapado en la capa límite convectiva, el flujo de flotabilidad local F se conserva y viene dado por,

$$F = F_b = Ur_y r_z \frac{g\Delta\rho}{\rho a} \quad (\text{Ec 3.116})$$

Por lo que

$$\Delta h_i = \sqrt{\frac{2F_b z_i}{\alpha U r_y r_z}} \frac{x}{U} \quad (\text{Ec 3.117})$$

Las dimensiones medias, r_y y r_z , de la sección transversal del penacho se obtienen a partir de una versión modificada de un modelo de arrastre (Weil, 1991) para penachos que permanecen demasiado tiempo en la parte superior de la capa límite convectiva:

$$r_y r_z = r_i^2 + \frac{a_e a_y^{\frac{3}{2}} w_*^2 x^2}{4 U^2} \quad (\text{Ec 3.118})$$

donde $r_i = \beta_2(z_i - h_s)$ es el radio del penacho cuando alcanza la cima de la capa límite convectiva, $\beta_2 = 0,4$, $\alpha_y = 2,3$, y a_e es un parámetro adimensional de arrastre, cuyo valor empírico se estima en 0,1.

3.5.5.4 Implementación del enfoque PDF en CALPUFF

Weil et al. (1997) describen muchos otros elementos de su modelo para penachos elevados en la capa límite convectiva, pero los expuestos anteriormente constituyen la parte que se ha implementado en CALPUFF, adoptando las parametrizaciones de la capa límite convectiva para la obtención de las propiedades medias de las corrientes ascendente y descendente, así como la simulación del penachos emitidos mediante el incremento efectivo de fuentes indirectas. Sin embargo, los algoritmos de CALPUFF para el tratamiento de la penetración parcial y el posterior arrastre en la capa de mezcla, así como el crecimiento de dicha capa, permanecen sin cambios.

En CALPUFF el modelo de dos trayectorias resultante se implementa mediante el cálculo explícito de la altura de cada ruta, en cada receptor (o donde se evalúe la distribución), teniendo en cuenta las reflexiones en el suelo y en la altura de la capa de la capa de mezcla. Las fuentes virtuales, para la altura del puff resultante, se introducen como antes para limitar la distribución dentro de la capa. Luego se escalan los parámetros σ_{zj} ($j=1, 2$) en relación con cada σ_{wj} correspondiente, ya que el crecimiento vertical del puff es proporcional a la velocidad de la turbulencia vertical. Es decir, se escala σ_z para la posición del receptor calculada utilizando las rutinas de CALPUFF existentes, empleando la relación entre las varianzas σ_{wj}^2 local y de referencia, y después se agrega el componente de flotabilidad inducida:

$$\sigma_z^2 = \sigma_{za}^2 \left(\frac{\sigma_{wj}^2}{\sigma_w^2} \right) + \sigma_{bid}^2 \quad (\text{Ec 3.119})$$

La mejora de la flotabilidad se calcula como el aumento de altura que habría experimentado el puff en ausencia de cualquier corriente ascendente o descendente.

3.5.6 Deformación vertical del Puff (convergencia horizontal)

Cuando se alimenta CALPUFF con un campo de vientos tridimensional los puffs pueden entrar en regiones de convergencia horizontal (divergencia vertical). Si los algoritmos de transporte sólo reconocen los vientos horizontales, tales regiones tenderán a acumular puffs y esto puede

conducir a concentraciones de contaminante desproporcionadas debido a que las distribuciones de concentración de estos puffs se solaparán y sumarán simultáneamente. Si los algoritmos de transporte reconocen la componente vertical del viento, así como la horizontal, los puffs se elevarán en tales regiones, bien por la velocidad vertical en su centro, o bien por la velocidad vertical media a través del puff. Esto reducirá el grado de solapamiento artificial de puffs, así como compensará, en cierta medida, la convergencia de puffs en el plano horizontal. Sin embargo, este tratamiento podría confundir el significado de las distribuciones horizontal y vertical de masa en cada puff, y conducir a revertir el proceso de reflexión matemática utilizado para obtener la distribución vertical de la masa de contaminante cerca del suelo. De este modo, las concentraciones a nivel del suelo (inmisión) resultantes podrían ser excesivamente sensibles a las consideraciones adoptadas sobre el transporte vertical.

Por ello, en lugar de utilizar el campo de velocidad vertical para transportar cada puff, CALPUFF utiliza el gradiente vertical medio de la velocidad vertical a través de cada puff (es decir, la divergencia vertical media a través del puff) para deformar la distribución vertical de masa en el interior del puff.

A modo de ejemplo, consideremos un puff que está en contacto con el suelo: la velocidad vertical en el suelo (perpendicular al suelo por debajo del puff) es cero, pero que en la parte superior puede ser mayor que cero. Por lo tanto, la parte inferior del puff está limitada, mientras que la parte superior se eleva hacia arriba, estirando así la distribución vertical de su masa. Obviamente, los detalles de este proceso son más complejos en los flujos reales, y se han simplificado en su modelización. Este efecto se implementa mediante el aumento de σ_z proporcionalmente a la divergencia vertical durante cada cálculo de una nueva distribución.

Para el suministro de campos de viento tridimensionales a CALPUFF se emplea el modelo meteorológico CALMET. Cada cara que delimita una celda de la malla meteorológica tiene su velocidad vertical, w , necesaria para compensar cualquier convergencia de los vientos horizontales. Por lo tanto, la diferencia en la velocidad vertical entre la parte superior e inferior de cada celda, dividida por el espesor de la celda, será la divergencia media. Para una celda n :

$$\left. \frac{dw}{dz} \right|_n = \frac{w(z_{n-1}) - w(z_n)}{z_{n-1} - z_n} \quad (\text{Ec 3.120})$$

La divergencia media a través del puff se obtiene suponiendo que la divergencia vertical es constante dentro de cada celda, e igual a su media y a la integración de este perfil de divergencia desde la parte inferior del puff, z_b , hasta la parte superior, z_t . Estas dos alturas del puff, z_t y z_b se definen como la altura central del puff $\pm\sigma_z$, sujeto a las restricciones de la superficie y de cualquier altura de la capa de mezcla.

$$\left. \frac{dw}{dz} \right|_p = \frac{1}{z_t - z_b} \int_{z_b}^{z_t} \frac{dw}{dz}(z) dz \quad (\text{Ec 3.121})$$

Esta divergencia media es la tasa fraccional de deformación vertical del puff. En consecuencia, en un intervalo de muestreo de duración Δt , σ_z aumenta según:

$$\sigma'_z = \sigma_z \left(1 + \Delta t \left. \frac{dw}{dz} \right|_p \right) \quad (\text{Ec 3.122})$$

A medida que el tamaño vertical del puff crece, se extiende a lo largo del resto de las capas verticales. Mediante el uso de la divergencia media a través del puff, cualquier cambio en la divergencia de una capa a la siguiente se incorpora al cálculo de manera que el efecto de la divergencia vertical en una capa pueda ser compensado por la convergencia o la divergencia en otras capas a distintas alturas.

3.6 Flujo descendente tras obstáculos

La dispersión y el efecto de sobre elevación por densidad de penachos emitidos por chimeneas pequeñas se pueden modificar significativamente por la presencia de edificios u otros obstáculos a la circulación del aire. Hosker (1984) proporciona una descripción de los patrones de flujo en tres regiones cercanas a edificios. La Figura 3.8 muestra (1) una zona a barlovento del edificio, donde el flujo se ve influido por la alta presión a lo largo de la cara del obstáculo opuesta al flujo, (2) una cavidad caracterizada por el flujo de recirculación, alta intensidad de turbulencia, y baja velocidad media del viento, y (3) una región turbulenta posterior donde las características del flujo y la intensidad de la turbulencia se aproximan poco a poco a los valores ambientales.

La parametrización del flujo descendente tras obstáculos en CALPUFF es apropiada para su uso en la región de baja turbulencia y se basa en los procedimientos del modelo ISC3 que contiene dos algoritmos, Siendo H_b , la altura del edificio, L_b , el factor de disminución lineal al cambio inducido por obstáculos a los coeficientes de dispersión y H_w , la anchura proyectada, respectivamente:

- Modelo de Huber-Snyder (Huber y Snyder, 1976; Huber, 1977). Este modelo se aplica cuando la altura de la fuente es mayor que la del edificio (H_b) más la mitad de L_b , mayor que la altura menor del edificio o mayor que la anchura proyectada (H_w). Se aplica ya sea para considerar un efecto completo de sombra del edificio o ninguno en absoluto, dependiendo de la altura efectiva del penacho emitido.
- Modelo de Schulman-Scire (Scire y Schulman, 1980; Schulman y Hanna, 1986). Este modelo aplica un factor de disminución lineal al cambio inducido por obstáculos a los coeficientes de

dispersión y tiene en cuenta el efecto del descenso en la elevación del penacho. Se utiliza para chimeneas menores que $H_b+0,5L_b$.

La principal diferencia en el tratamiento de los flujos descendentes, entre ISC3 y CALPUFF, es que el umbral de altura determina qué modelo se utiliza. Esta opción permite al usuario aplicar uno de los modelos para todas las chimeneas, lo que provoca la eliminación de la discontinuidad del enfoque ISC3 para alturas de $H_b+0,5L_b$. Así, en CALPUFF, la técnica de Huber-Snyder se utiliza para chimeneas mayores de $H_b+L_bT_{bd}$, donde T_{bd} tiene un valor predeterminado de 0,5. Un valor negativo de T_{bd} indica que el método de Huber-Snyder se puede utilizar para todas las chimeneas, y un valor de 1,5, que se utilice el método de Schulman-Scire. Si T_{TB} es igual al valor predeterminado de 0,5, el enfoque de CALPUFF será equivalente al de ISC3.

Ambos métodos usan dimensiones del edificio específicas referidas a la dirección del viento (H_b, H_w). Cada uno utiliza 36 valores específicos, que corresponden a los vectores de viento de 10° a 360° , en incrementos de 10° . El software (BPIP) (EPA, 1993), que permite definir perfiles de edificios en esa forma, se puede utilizar para determinar las dimensiones del edificio en CALPUFF y definir la altura de la chimenea asociada con uno o más edificios.

3.6.1 Modelo de Huber-Snyder

Si la altura de la chimenea supera $H_b+T_{bd}L_b$, se aplica el algoritmo de Huber-Snyder. El primer paso consiste en calcular la altura efectiva del penacho, H_e , debido al impulso de elevación a una distancia, a sotavento, equivalente a dos alturas de edificio. Si H_e supera $H_b+1,5L_b$, el flujo descendente tras el obstáculo se supone que será insignificante. De lo contrario, se calcula el cambio en los coeficientes de dispersión del penacho. Para alturas H_s menores que $1,2H_b$, tanto σ_y y σ_z se modifican. En tanto que sólo se modifica σ_z , para alturas H_b por encima de 1,2 (pero, por debajo de $H_b+1,5L_b$).

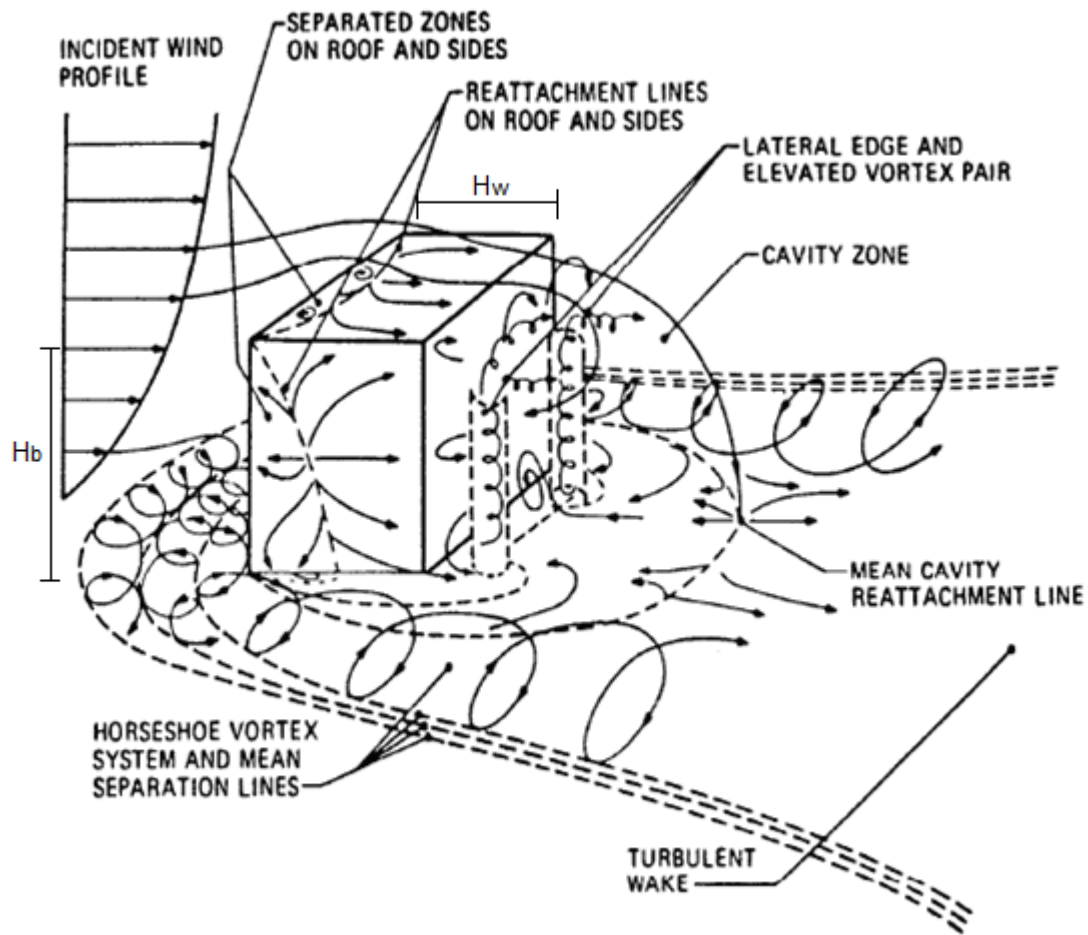


Figura 3.8 Flujo en los alrededores de un edificio de bordes afilados en la capa superficial (Hosker, 1984).

Un edificio se define como bajo si el ancho del edificio respecto a la dirección del viento, H_w , excede su altura (es decir, $H_w \geq H_b$); y se define como alto para $H_w < H_b$. Debido a que tanto la altura del edificio como su anchura pueden variar según la dirección del viento, la clasificación de un edificio también varía con esta.

Para edificios bajos, σ_z será:

$$\sigma'_z = 0,7H_b + 0,067(x - 3H_b) \quad (\text{Ec 3.123})$$

donde x es la distancia a favor del viento (en metros).

Para edificios altos,

$$\sigma'_z = 0,7H_w + 0,067(x - 3H_w) \quad 3H_w < x < 10H_w \quad (\text{Ec 3.124})$$

Como se ha indicado, si la relación H_w/H_b es menor o igual que 1,2, también se modifica el coeficiente de dispersión horizontal, σ_y .

Para un edificio bajo con una relación ancho-alto (H_w/H_b) menor de 5, la ecuación para σ_y será:

$$\sigma'_y = 0,35H_w + 0,067(x - 3H_b) \quad 3H_b < x < 10H_b \quad (\text{Ec 3.125})$$

Para edificios con (H_w/H_b) superior a 5, se obtienen dos opciones para σ_y .

$$\sigma'_y = 0,35H_b + 0,067(x - 3H_b) \quad 3H_b < x < 10H_b \quad (\text{Ec 3.126})$$

o,

$$\sigma'_y = 1,75H_b + 0,067(x - 3H_b) \quad 3H_b < x < 10H_b \quad (\text{Ec 3.127})$$

La Ec 3.126 sobreestima las concentraciones con respecto a la Ec 3.127, y se considera como una estimación del límite superior de los impactos del foco emisor. En el manual del modelo ISC3 se sugiere que la Ec 3.127 será la más apropiada si la fuente se encuentra a una distancia inferior a $2,5H_b$ del final del edificio.

La Ec 3.126 logrará una mejor estimación de σ_y si el foco emisor se encuentra cerca del centro del edificio. En la práctica, es esta solución la empleada en aplicaciones regulatorias, independientemente de la posición de la chimenea respecto del edificio.

Por último, para un edificio alto, la ecuación para σ_y será:

$$\sigma'_y = 0,35H_w + 0,067(x - 3H_w) \quad 3H_w < x < 10H_w \quad (\text{Ec 3.128})$$

3.6.2 Modelo de Schulman-Scire

Las principales características del algoritmo de Schulman-Scire son la incorporación de los efectos del flujo descendente en la reducción de la elevación del penacho y que el cambio de σ_z es una función gradual de la altura efectiva del penacho, en lugar de una función en etapas discretas.

La inclusión de los efectos de flujo descendente en las ecuaciones de elevación del penacho es una parte fundamental del método de Schulman-Scire. Estudios de túnel de viento de emisiones con sobreelevación provenientes de chimeneas (de altura inferior a la recomendada según las buenas prácticas ingenieriles) han demostrado que la elevación del penacho se reduce durante las condiciones de flujo descendente (Huber y Snyder, 1976). El aumento de la turbulencia mecánica en la sombra del edificio conduce a una mayor dispersión del penacho (que se refleja en los coeficientes de dispersión), lo que provoca una rápida dilución del mismo. Esta dilución reduce la tasa de crecimiento de la altura del penacho. La tasa inicial de dilución se determina mediante la asignación de un radio de dilución inicial del penacho.

El segundo componente del modelo de Schulman-Scire es la función de decaimiento lineal que se aplica al cambio de la σ_z . Así, este coeficiente de dispersión vertical se determina como:

$$\sigma_z^H = A\sigma'_z \quad (\text{Ec 3.129})$$

donde σ'_z se determina a partir de las Ec 3.123 y Ec 3.124, y

$$A = \begin{cases} 1 \\ \frac{H_b - H_e}{2L_b} + 1 \\ 0 \end{cases} \quad (\text{Ec 3.130})$$

en relación con las dimensiones del edificio indicadas.

3.7 Sobreelevación del penacho

Las ecuaciones para el cálculo de la sobreelevación del penacho en CALPUFF se han generalizado para aplicar a una variedad de tipos de focos emisores y características del penacho, incluyendo los siguientes efectos:

- Impulso mecánico y flotabilidad del penacho
- Estratificación atmosférica estable
- Penetración parcial del penacho en una capa de inversión elevada estable
- Flujo descendente tras obstáculos y efectos de descenso inicial del penacho debido a su baja velocidad de salida
- Cizalladura vertical del viento
- Elevación del penacho de emisiones de área
- Elevación del penacho de emisiones lineales

3.7.1 Ecuaciones básicas de sobreelevación del penacho

Las relaciones básicas de sobreelevación del penacho proveniente de fuentes puntuales se basan en las ecuaciones de Briggs (1975). La sobreelevación del penacho debida a la flotabilidad y el impulso mecánico de los gases en condiciones neutras o inestables, z_n , será:

$$z_n = \sqrt[3]{\frac{3F_m x}{\beta_j^2 u_s^2} + \frac{3Fx^2}{2\beta_1^2 u_s^3}} \quad (\text{Ec 3.131})$$

donde F_m es el flujo debido a la cantidad de movimiento (m^4/s^2),
 F es el flujo de flotabilidad (m^4/s^3),
 u_s es la velocidad del viento a la altura de la chimenea (m/s),
 x es la distancia en la dirección del viento a la que se calcula la elevación (m),
 β_1 es el parámetro de arrastre en condiciones neutras ($\sim 0,6$), y
 β_j es el coeficiente de arrastre de chorro ($\beta_j = 1/3 + u_s/w$).
 w es la velocidad de salida del gas de chimenea (m/s).

La distancia x_f a la que el penacho alcanza su máxima sobreelevación o final es:

$$x_f = \begin{cases} 3,5x^* \\ \frac{4D(w+3u_s)^2}{u_s w} \end{cases} \quad (\text{Ec 3.132})$$

donde D es el diámetro de chimenea (m), y x^* es la distancia a partir de la cual el penacho se encuentra lo bastante mezclado como para que su impulso vertical inicial desaparezca, calculada como:

$$x^* = \begin{cases} 14F^{5/8} \\ 34F^{2/5} \end{cases} \quad (\text{Ec 3.133})$$

En condiciones estables la sobreelevación final del penacho, z_{sf} , se determina mediante:

$$z_{sf} = \sqrt[3]{\frac{3F_m}{\beta_j^2 u_s \sqrt{S}} + \frac{6F}{\beta_2^2 u_s}} \quad (\text{Ec 3.134})$$

donde β_2 es el parámetro de arrastre en condiciones estables ($\sim 0,36$),

S es una forma de la frecuencia de Brunt–Vaisala que permite cuantificar la estabilidad atmosférica en función del gradiente de temperatura potencial, $\frac{g}{T_a} \frac{d\theta}{dz}$,
 g es la aceleración de la gravedad (m/s^2),
 T_a es la temperatura ambiente (K), y
 $d\theta/dz$ es el gradiente de temperatura potencial (K/m).

La sobreelevación del penacho de transición a una distancia x del foco emisor, en condiciones estables, se calcula mediante la Ec 3.131 hasta el punto en que $z_n=z_{sf}$. A partir de ahí, se calcula empleando $x=x_f$.

Además, para bajas velocidades de viento y condiciones de calma durante condiciones neutras o inestables se impone una velocidad mínima del viento de $u_s=1$ m/s.

Para calcular la sobreelevación del penacho en condiciones estables se utiliza la siguiente ecuación (Briggs, 1975):

$$z_{sf} = 4 \frac{F^{\frac{1}{4}}}{S^{\frac{3}{8}}} \quad (\text{Ec 3.135})$$

El aumento del impulso ascensional en condiciones estables se calcula con una velocidad mínima del viento de $u_s= 1$ m/s, siempre que no exceda el aumento del impulso en condiciones neutras.

3.7.2 Descenso inicial del penacho debido a su baja velocidad de salida

Si la relación de la velocidad de salida del gas de chimenea con respecto a la velocidad del aire ambiental en la parte superior de la chimenea es menor que 1,5 el penacho puede llegar a mezclarse a sotavento de la chimenea. Por eso, Briggs (1973) propone la modificación de la altura de chimenea para corregir su solución general considerando este efecto:

$$h'_s = \begin{cases} h_s + 2D\left(\frac{w}{u_s} - 1,5\right) \\ h_s \end{cases} \quad (\text{Ec 3.136})$$

donde D es el diámetro de la chimenea y h'_s es la altura de chimenea corregida.

3.7.3 Penetración parcial del penacho en una inversión térmica

Los penachos de chimeneas altas pueden interactuar con frecuencia con la capa de inversión en la parte superior de la capa de mezcla. Una fracción de la masa del penacho puede penetrar en la inversión y, por lo tanto, no estará disponible para su mezcla hacia la superficie. Manins (1979) desarrolló un procedimiento para estimar la penetración parcial del penacho en una inversión elevada usando datos experimentales en tanques de agua. Este esquema es el adoptado en el modelo CALPUFF.

El parámetro de penetración, P , y la fracción correspondiente, f , del penacho que queda por debajo de la inversión, se definen como:

$$P = \frac{F_b}{u_s b_i (h - h_s)^2} \quad (\text{Ec 3.137})$$

$$f = \begin{cases} 1 \\ \frac{0,08}{P} - P + 0,08 \\ 0 \end{cases} \quad (\text{Ec 3.138})$$

donde u_s es la velocidad del viento a la altura de la chimenea (m/s),
 F_b es la flotabilidad inicial de la emisión en la chimenea (m^4/s^3),
 h es la altura de inversión respecto al suelo (m),
 h_s es la altura de la chimenea (m),
 b_i es la potencia de la inversión, definida como: $b_i = g \Delta T_i / T_a$ (m/s^2)
 ΔT_i es el cambio de temperatura en la inversión (K),
 T_a es la temperatura del aire ambiente (K), y
 g es la aceleración de la gravedad (m/s^2).

Como se puede observar, no habrá penetración si $P < 0,08$, y la penetración será casi completa si $P \geq 0,3$. Manins (1979) comparó este esquema con los métodos de penetración parcial de Briggs (1969) y Briggs (1975) utilizando datos experimentales en tanques de agua. Encontró que el modelo de Briggs de 1969 subestima la cantidad de penacho que penetra en la capa de inversión, mientras que el método de 1975 tiende a sobreestimarla. Los datos de campo recogidos en la Central Térmica de Gladstone en Queensland, Australia, llevaron a las mismas conclusiones (Manins, 1984).

Determinando f mediante la Ec 3.138, el incremento efectivo de la altura del penacho para sus masas por debajo (z_{p1}) y por encima (z_{p2}) de la capa de inversión, vienen dados por (Hanna y Chang, 1991):

$$z_{p1} = \left(1 - \frac{f}{3}\right)(h - h_s) \quad (\text{Ec 3.139})$$

$$z_{p2} = (2 - f)(h - h_s) \quad (\text{Ec 3.140})$$

La sobreelevación para la masa de penacho por debajo de la de la capa de inversión se estima como el mínimo de (z_n, z_{p1}) donde z_n es la sobreelevación máxima, es decir, en $x = x_f$. Además, hay que tener en cuenta que z_n , z_{p1} y z_{p2} son siempre sobreelevaciones, es decir, alturas medidas desde la boca de la chimenea.

Las Ec 3.139 y Ec 3.140 se aplican sólo a los penachos que penetran parcialmente la capa de inversión. Si todo el penacho penetra y supera la capa de inversión ($f=0$), primero se calcula la sobreelevación z_{p2} siguiendo Briggs (1975). La sobreelevación final es el mínimo de z_n y z_p , donde z_p se determina mediante una ecuación de sobreelevación estable que depende de la altura de la

capa de inversión por encima de la chimenea y de la estratificación de la temperatura por encima de la altura de la capa de inversión:

$$z_p = \sqrt[3]{1,8(h-h_s)^3 + \frac{18,25F}{u_s S}} \quad (\text{Ec 3.141})$$

3.7.4 Flujo descendente tras obstáculos

Las observaciones de dispersión y elevación de penachos en túneles de viento, indican que la sobreelevación se puede reducir significativamente como consecuencia del flujo descendente tras obstáculos. Huber y Snyder (1982) encontraron que durante las condiciones de flujo descendente, la sobreelevación del penacho se redujo en un tercio por debajo del valor obtenido en ausencia del obstáculo. En otro análisis, Rittmann (1982), encontró una menor sobreelevación del penacho que la prevista por la ley 2/3 (una forma de la Ec 3.131) para focos más pequeños que son más propensos a ser afectados por la corriente descendente. Varios estudios (Bowers y Anderson, 1981; Scire y Schulman, 1981; Thuillier, 1982) con la versión original del modelo algoritmo del ISC de la corriente descendente tras obstáculos, que no tenía en cuenta sus efectos en la elevación del penacho, mostraron que no considerar estos efectos puede subestimar significativamente la inmisión máxima en condiciones de flujo descendente, como consecuencia de una sobreestimación de la sobreelevación real.

El aumento de la turbulencia mecánica en la sombra del edificio conduce a una mayor dispersión y causa una rápida dilución del penacho. Esta dilución reduce la velocidad de ascenso del penacho y lo conduce a alturas inferiores. Un método para considerar esa alta tasa de dilución inicial consiste en considerar un "radio de dilución" inicial para el penacho (Scire y Schulman, 1980). Esta técnica fue incorporada al modelo BLP (Buoyant Line and Point Source; Schulman y Scire, 1980) y a una versión modificada del modelo ISC, demostrando (Schulman y Hanna, 1986) que produce estimaciones más realistas de la inmisión en condiciones de flujo descendente tras obstáculos.

En esta técnica, la sobreelevación de un penacho afectado por el flujo descendente tras obstáculos, con $\sigma_{y_0} \leq \sigma_{z_0}$ en condiciones neutras o inestables viene dada por:

$$z_d^3 + \left(\frac{3R_0 z_d}{\beta_1} + \frac{3R_0^2}{\beta_1^2} \right) z_d = \frac{3F_m x}{\beta_j^2 u_s^2} + \frac{3Fx^2}{2\beta_1^2 u_s^3} \quad (\text{Ec 3.142})$$

donde R_0 es el radio de dilución, $R_0 = 2^{1/2} \sigma_{z_0}$, y σ_{y_0} , σ_{z_0} son los coeficientes de dispersión horizontal y vertical, respectivamente, a una distancia de $3H_B$ en la dirección del viento. El factor de $2^{1/2}$ convierte el coeficiente de dispersión gaussiano en una distribución efectiva "top-hat" o truncada, a efectos del cálculo de sobreelevación del penacho.

En condiciones estables, la sobreelevación final del penacho resulta ser:

$$z_d^3 + \left(\frac{3R_0 z_d}{\beta_2} + \frac{3R_0^2}{\beta_2^2} \right) z_d = \frac{3F_m}{\beta_j^2 u_s S^{1/2}} + \frac{6F}{\beta_2^2 u_s S} \quad (\text{Ec 3.143})$$

La sobreelevación del penacho en transición en condiciones estables se calcula con la Ec 3.142 hasta que se alcanza la sobreelevación máxima predicha por la ecuación Ec 3.143.

Por otra parte, cuando la mezcla horizontal del penacho en la sombra del edificio provoca que $\sigma_{y0} > \sigma_{z0}$ es necesario tener en cuenta la deformación alargada del penacho, que se puede representar como emisor lineal finito. En tal caso, la sobreelevación del penacho viene dada por la expresión para un emisor lineal de longitud L_e en condiciones neutras o inestables:

$$z_d^3 + \frac{3L_e}{\pi\beta_1} z_d^2 + \left(\frac{3R_0 z_d}{\beta_1} + \frac{6R_0 L_e}{\pi\beta_1^2} + \frac{3R_0^2}{\beta_1^2} \right) z_d = \frac{3F_m x}{\beta_j^2 u_s^2} + \frac{3Fx^2}{2\beta_1^2 u_s^3} \quad (\text{Ec 3.144})$$

y, análogamente, en condiciones estables:

$$z_d^3 + \frac{3L_e}{\pi\beta_2} z_d^2 + \left(\frac{3R_0 z_d}{\beta_2} + \frac{6R_0 L_e}{\pi\beta_2^2} + \frac{3R_0^2}{\beta_2^2} \right) z_d = \frac{3F_m}{\beta_j^2 u_s S^{1/2}} + \frac{6F}{\beta_2^2 u_s S} \quad (\text{Ec 3.145})$$

La longitud efectiva de emisor lineal que sustituye al penacho deformado, L_e , se define como:

$$L_e = 2\pi^{1/2} (\sigma_{y0} - \sigma_{z0}) \quad (\text{Ec 3.146})$$

cuando $\sigma_{y0} > \sigma_{z0}$. En caso contrario, $L_e = 0$, y las Ec 3.144 y Ec 3.145 se reducen a las Ec 3.142 y Ec 3.143, respectivamente.

Es importante señalar que debido al flujo descendente tras obstáculos los coeficientes de dispersión modificados, σ_{z0} y σ_{y0} , varían con la altura de la chimenea, el aumento del impulso vertical y las dimensiones del obstáculo, según se describe en la sección 3.6. Cuando σ_{z0} y σ_{y0} se aproximan a cero (es decir, el flujo descendente tras obstáculos es insignificante) las Ec 3.134 y Ec 3.135 se aproximan a las ecuaciones de Briggs no modificadas. El efecto de R_0 y L_e siempre disminuye la altura del penacho, lo que tiende a aumentar la inmisión máxima predicha.

3.7.5 Cizalla vertical del viento

En los algoritmos de sobreelevación del penacho generalmente se tiene en cuenta la variación de la velocidad del viento a la altura de la chimenea aplicando directamente dicha velocidad en las ecuaciones de sobreelevación del penacho. La mayoría de estas formulaciones suponen que la velocidad del viento es constante por encima de la boca de la chimenea. Esta suposición es razonable para chimeneas de tamaño medio y alto; sin embargo, la variación de la velocidad del viento por encima de la chimenea puede tener un efecto significativo en la reducción de la sobreelevación del penacho de emisiones procedentes de chimeneas bajas que se encuentren incrustadas en la capa superficial (con cizalla vertical) (Scire y Schulman, 1980).

Suponiendo que el perfil de velocidad vertical del viento por encima de la chimenea se puede aproximar como $u(z) \approx u_s(z/h_s)^p$ (donde u_s es la velocidad del viento a la altura de la chimenea, h_s , y $u(z)$ es la velocidad del viento a una altura z), la sobreelevación del penacho de una chimenea baja puede representarse en condiciones neutras e inestables como:

$$z_w = \left(\frac{e^2}{6+2p} \frac{F z_m^{3p}}{\beta_1^2 u_m^3} \right)^{1/e} x^{2/e} \quad (\text{Ec 3.147})$$

$$e = 3+3p \quad (\text{Ec 3.148})$$

donde p es el exponente para el cálculo de la velocidad del viento a una altura z .

En condiciones estables, la sobreelevación final del penacho será:

$$z_w = \left(\frac{2(3+p) z_m^p F}{\beta_2^2 u_m S} \right)^{1/3+p} \quad (\text{Ec 3.149})$$

El exponente p depende de la cizalla del viento y puede estimarse a partir de la categoría de estabilidad atmosférica o calcularse a partir de los valores verticales de viento generados por el modelo meteorológico empleado. Cabe señalar que de las Ec 3.147 y Ec 3.149 pueden obtenerse las ecuaciones de Briggs cuando no haya cizalla del viento por encima de la chimenea, adoptando el exponente $p=0$.

La consideración de $u(z) \approx u_s(z/h_s)^p$ será más adecuada para chimeneas bajas, donde se espera que el efecto de cizalla sea mayor. Sin embargo, esta relación no es aplicable con chimeneas más altas. Por lo tanto, las Ec 3.147 y Ec 3.149 se utilizan para proporcionar un límite superior de la sobreelevación del penacho para chimeneas pequeñas: en estas chimeneas, la sobreelevación real del penacho corresponde al valor mínimo de los tres obtenidos considerando o no el efecto de cizalla, o el efecto de corriente descendente tras obstáculos.

3.8 Dispersión costera y sobre el agua

Existen diferencias importantes en la estructura de las capas de mezcla marina y continental, que pueden tener efectos significativos en la dispersión del penacho sobre el agua y en entornos costeros. Estas diferencias surgen por tres razones básicas (LeMone, 1980):

- El agua tiene una alta capacidad calorífica y es parcialmente transparente a la radiación solar, por lo que tiene una oscilación térmica diaria relativamente pequeña ($\sim 0,5 \text{ C}^\circ$).
- La superficie del mar es generalmente más uniforme y aerodinámicamente menos rugosa que la superficie terrestre.
- En la capa límite atmosférica marina hay una aportación constante de humedad.

Como resultado de estas diferencias, el flujo de calor sensible sobre aguas abiertas resulta ser de un orden de magnitud (o más) inferior al flujo sobre tierra. La ausencia de un fuerte flujo de calor

sensible sobre el agua y la baja rugosidad de la superficie acuosa provoca una altura de la capa de mezcla relativamente baja, lo que favorece la posible captura del penacho. LeMone (1980) indicó que la altura típica de capa de mezcla marina es de sólo 500 m. Los datos de tres experimentos marinos y costeros publicados por Hanna et al., 1985, dos de los cuales se llevaron a cabo en California, mostraron muchas horas con alturas menores de 100 m.

A pesar de estas diferencias, las variaciones diurnas y anuales de estabilidad atmosférica sobre el agua están relacionadas con su comportamiento típico sobre tierra, aunque no necesariamente son iguales. Por ejemplo, las medidas en el mar del Norte de la temperatura del agua y del aire publicadas por Nieuwstadt (1977) mostraron que las inversiones de temperatura suelen persistir más de un día en el mes de junio, mientras que las condiciones inestables se producen todos los días de enero. Por otra parte, durante otras épocas del año, el ciclo de la estabilidad diurna sobre el agua está fuera de fase con el ciclo de estabilidad sobre tierra, es decir, estable en el agua durante el día e inestable por la noche.

Las técnicas utilizadas en el modelo meteorológico CALMET para la determinación de la altura de capa de mezcla sobre el agua, la estabilidad y los parámetros de la capa superficial se basan en la diferencia de temperatura aire-mar, la velocidad del viento y la humedad específica (Scire et al., 2000a). Estos métodos se aplican en CALMET a todas las celdas del dominio de simulación que están sobre el agua. En la interfase tierra-mar pueden producirse cambios bruscos en las propiedades de la dispersión, lo que puede afectar significativamente a la inmisión provocada por fuentes costeras. La formulación de un modelo de puffs como CALPUFF es adecuada para dar cabida a estos cambios en la zona de transición costera.

Una situación típica que parte inicialmente de condiciones estables se muestra en la Figura 3.9. Un penacho estrecho embebido en la capa estable por encima de la capa superficial marina, es interceptada por una creciente capa límite térmica interna (TIBL) terrestre; este crecimiento de la TIBL terrestre es provocado por el flujo de calor sensible asociado con el calentamiento solar de la superficie terrestre, que no tiene el mismo efecto sobre el mar. La convección sobre tierra puede precipitar rápidamente el contaminante hasta el suelo, provocando concentraciones localmente altas en superficie.

Muchos modelos de fumigación costera asumen la mezcla inmediata del contaminante atrapado por la TIBL (Lyons y Cole, 1973, Misra, 1980). Pero Deardorff y Willis (1982) a partir de sus experimentos de laboratorio, sugieren que las fluctuaciones de la turbulencia dentro de la TIBL pueden ser importantes y, en consecuencia, el penacho no se mezcla inmediatamente. Así, en el modelo dispersión en alta mar y en zonas costeras (OCD, Hanna et al., 1985) se describe este fenómeno de fumigación costera mediante la concentración mínima de entre la predicha por una técnica de fuente virtual o la predicha por el modelo de Willis y Deardorff.

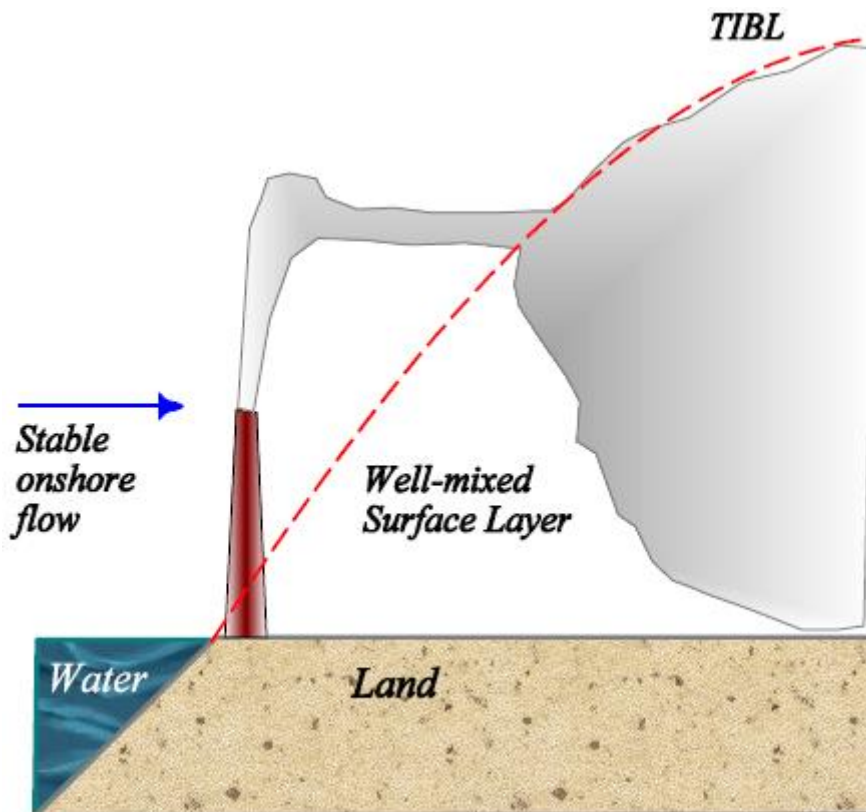


Figura 3.9 Ilustración esquemática de una condición típica de fumigación costera (Hanna et al., 1985).

En CALPUFF la interfaz tierra-mar se resuelve normalmente a la escala de la malla de simulación. Es decir, el modelo calcula las características de la turbulencia y la dispersión consistentes con las propiedades de los usos de suelo de cada celda de la malla, clasificada como acuática o terrestre de acuerdo con los campos meteorológicos proporcionados por CALMET. La transición de la dispersión marina a la continental se produce en la frontera costera delimitada por los usos de suelo. Una vez que un penacho situado en la capa límite marina entra en la capa de mezcla terrestre, el crecimiento de cada puff cambia adaptándose a las características de cada capa.

Por otra parte, el módulo TIBL (SGTIBL) realiza los cálculos a escala submalla para los casos en los que la posición del límite costero dentro de una celda y el crecimiento de la TIBL deba ser modelado con una mayor resolución espacial que la proporcionada por la malla de simulación. SGTIBL admite una representación lineal por tramos de la línea de costa de manera explícita, resolviendo el transporte del puff sobre tierra en condiciones de convección en las siguientes fases:

- subdivide el paso de tiempo de cálculo de CALPUFF en pequeñas sub-etapas
- calcula el cambio de la altura de la TIBL local para cada sub-etapa
- define las propiedades de dispersión adecuadas para el puff en cada sub-etapa

Después de completar estas fases, se procede con el transporte normal del puff y el cálculo de la inmisión.

Esta secuencia conserva las relaciones espaciales entre la trayectoria del puff (determinado por la ubicación de su origen y el campo de vientos del modelo CALMET) y la posición de la costa, la velocidad de crecimiento de la altura de la TIBL y las posiciones de los receptores en los que se calcula la inmisión.

Si el paso de tiempo de cálculo de CALPUFF se produce íntegramente dentro de una celda que no contiene un segmento de línea de costa, la capa límite correspondiente se caracterizará por las propiedades de las celdas locales del dominio que le afecten, de manera normal. En otro caso, se utilizan las propiedades de las celdas más cercanas, sean de tierra o de agua, en función de la posición relativa del puff en ese paso de tiempo respecto de la línea de costa. Por lo tanto, la línea de costa ha de ser coherente con los usos de suelo empleados; debe haber por lo menos una celda predominantemente de agua y una predominantemente terrestre colindantes con cualquier celda a través del cual pasa la línea de costa.

Una vez que un puff cruza una línea de costa del agua a la tierra, durante las condiciones propicias para la formación de una TIBL, la altura de mezcla que afecta al puff crece con la distancia a lo largo de su trayectoria. Este tratamiento TIBL para ese puff se mantendrá hasta que la altura de la TIBL calculada exceda la altura de la capa de mezcla de la celda local, o si desaparecen las condiciones que provocan la TIBL: por ejemplo, el puff podría retroceder hacia el agua, o podría llegar el ocaso y, en consecuencia, desaparecer la radiación solar. En este sentido, es importante señalar que para aplicar el algoritmo SGTIBL en CALPUFF se establece un valor mínimo del flujo de calor sensible de 5 W/m^2 , adoptado del modelo de dispersión Shoreline (SDM) (EPA, 1988).

Para el cálculo del crecimiento de la TIBL en el algoritmo SGTIBL se emplean las ecuaciones adaptadas del modelo de Garratt (1994). En ausencia de subsidencia, la ecuación de conservación para este modelo de orden cero de la capa límite convectiva (CBL) resulta ser:

$$\frac{\delta h_T}{\delta x} = \frac{(1 + 2\beta)H_0(x)}{\gamma \rho c_p u h_T} \quad (\text{Ec 3.150})$$

que, cuando se integra a lo largo de una distancia s , en cada sub-etapa n , considerando constantes H_0 , γ , y u se obtiene:

$$h_T(s) = \sqrt{\frac{2(1 + 2\beta)H_{0n}}{\gamma \rho c_p u_n} + h_{T0}^2} \quad (\text{Ec 3.151})$$

donde h_T es la altura de la TIBL resultante al final de la sub-etapa n (m),
 h_{T0} es la altura de la TIBL al inicio del sub-etapa n (m),
 H_0 es el flujo de calor sensible superficial (W/m^2) sobre tierra,
 γ es el gradiente de temperatura potencial (K/m) por encima de la capa de mezcla, considerado constante,
 ρ es la densidad del aire superficial (kg/m^3),
 c_p es el calor específico del aire a presión constante (J/kg/K),
 u es la velocidad media del viento dentro de la TIBL (m/s),

- β es la relación entre el flujo de calor por debajo de la altura de la TIBL, y el flujo de calor por encima de la superficie, siendo $\approx 0,2$ para la CBL sobre tierra, y
- n subíndice que hace referencia a los valores de las condiciones consideradas constantes en la sub-etapa n .

El parámetro β se introduce como solución al modelo de CBL, como fracción constante del flujo de arrastre en la parte superior de dicha capa respecto del flujo superficial. Un valor de $\beta=0$ indica que no hay arrastre en la parte superior de la capa, por lo que la altura de la capa mixta crece exclusivamente debido a la entrada de calor desde la superficie, que calienta la capa de mezcla. Cuando no hay ningún arrastre en la parte superior de la capa, la temperatura potencial en la parte superior es igual a la de la capa de mezcla. En el caso opuesto, $\beta=\infty$ indica que la capa superficial crece solamente por arrastre mecánico en la parte superior de la capa, sin flujo de calor desde la superficie, lo que produce una capa de mezcla mecánica cuya temperatura potencial es la temperatura promedio del perfil de temperatura potencial original sobre la altura de la capa de mezcla. El salto de temperatura potencial en la parte superior de la capa de espesor h es igual a $\gamma h/2$. La CBL real crecerá debido tanto al flujo de calor superficial como al flujo de arrastre a través de la parte superior de dicha capa, lo que provoca un salto de temperatura en la parte superior. Garratt (1994) propone un valor de $\beta= 0,2$, basado en la mayor parte de los datos experimentales de la CBL diurna terrestre analizados. Esta solución es más completa que la adoptada por el modelo SDM, que utiliza la ecuación de Weisman (1976) para la altura de la TIBL, equivalente a la Ec 3.151 con $\beta=0$.

3.9 Efectos del terreno complejo

El efecto topográfico sobre la inmisión se considera en CALPUFF de tres formas distintas:

1. El ajuste del campo de viento a las características del terreno a gran escala, incorporado en el modelo meteorológico CALMET, ya descrito.
2. La simulación explícita de las interacciones puff-suelo de distintos parámetros que pueden influir en el campo de viento a gran escala.
3. Un tratamiento "simplificado" de las interacciones puff-suelo de parámetros a gran y pequeña escala.

Esto permite a CALPUFF compensar la influencia del terreno sobre la inmisión en dos escalas diferentes.

En CALMET es posible emplear bien un campo de viento de diagnóstico o bien uno de pronóstico para simular la respuesta del flujo a gran escala a la influencia del terreno. El efecto del terreno que se extienda a una escala lo suficientemente grande para ser resuelto por las celdas que utiliza CALMET se pondrá de manifiesto en las condiciones de contorno para el campo de vientos. Y, un puff insertado en este campo de vientos va a crecer con el mismo a medida que se desplaza sobre el terreno, o será solo transportado por el flujo paralelo al terreno, dependiendo del grado de estratificación.

Después de este tratamiento a gran escala, los parámetros del terreno de menor escala que afecten al puff se calculan explícitamente mediante el algoritmo de terreno complejo para características de escala submalla, CTSG, que incorpora los métodos utilizados en el modelo de dispersión de terreno complejo CTDM.

Finalmente, las estimaciones de concentración de contaminante afectadas por cualquier otro efecto del terreno no considerado en el algoritmo CTSG, como ajustes simples de la altura efectiva del puff sobre del suelo, y/o del tamaño vertical del puff se pueden resolver de tres formas diferentes: El tratamiento original del modelo ISC, la aplicación de un coeficiente de trayectoria del penacho o una solución basada en parámetros del algoritmo CTSG, pero que no requiere ampliación del mismo a estos efectos del terreno.

3.9.1 Algoritmo de terreno complejo para parámetros de escala submalla (CTSG)

El algoritmo CTSG parte del campo meteorológico producido por el modelo CALMET, que incluye tanto el viento como la estructura térmica de la atmósfera, en la vecindad de cada localización del terreno; y también el flujo incidente sobre esa localización. A continuación, se procede a simular los cambios en el flujo y en la velocidad de dispersión en dicha localización, inducidos por las características del terreno en la misma. Básicamente, CTSG adopta el enfoque del modelo CTDM, si bien se hace hincapié en los elementos del enfoque CTDM con mayor incidencia sobre la inmisión.

3.9.1.1 Modelizado por regiones

El algoritmo CTSG adopta del modelo CTDM el concepto de división del flujo. Cuando el flujo de aire se aproxima a cualquier elevación del terreno, se divide en dos capas: En la capa superior, el flujo tiene la energía suficiente para transportar un paquete de fluido hacia arriba y sobre la elevación, superando el gradiente de densidades derivado de una condición de estabilidad atmosférica. En la capa inferior, el flujo no supera la elevación y se verá obligado a viajar alrededor de ella. Este concepto fue sugerido inicialmente por Drazin (1961) y Sheppard (1956); y se ha demostrado en diversos experimentos de laboratorio (Riley et al., 1976; de Brighton, 1978; Hunt y Snyder, 1980; Snyder, 1980; y Snyder y Hunt, 1984). La altura de división del flujo, H_d , es decir, la altura que determina la división entre ambas capas, se obtiene a partir de los perfiles de velocidad del viento (m/s) y de temperatura (en este caso, mediante la frecuencia de Brunt-Vaisala, N); esta altura se calcula para cada elevación determinando la altura más baja a la cual la energía cinética del flujo equilibra a la energía potencial alcanzada en la elevación de una masa de fluido, desde esa altura hasta la parte superior de la elevación. Como resultado, se establece la relación:

$$0,5u^2(H_d) = \int_{H_d}^H N^2(z)[H - z]dz \quad (\text{Ec 3.152})$$

donde $u(H_d)$ es la velocidad del viento en $z=H_d$, H es la altura de la elevación, y $N(z)$ es la frecuencia de Brunt-Vaisala a la altura z . En la práctica, el valor de H_d se obtiene resolviendo la integral como la suma (*RHS*) del efecto de varias capas con N constante en cada una, es decir, para una capa n ,

$$RHS_n = RHS_{n+1} + \int_{z_n}^{z_{n+1}} N_n^2(H - z)dz = N_n^2(H - z_{mn})(z_{n+1} - z_n) \quad (\text{Ec 3.153})$$

donde z_{mn} denota la altura media de la capa n , es decir, $0,5(z_{n+1} + z_n)$. La capa que contiene H_d se encuentra comparando la integral determinada por la de la Ec 3.152 (que llamaremos LHS_n) para cada altura n con su valor de RHS_n correspondiente, a partir de la capa que contiene la parte superior de la elevación. Si LHS_n excede de RHS_n , entonces H_d tiene que estar por debajo de z_n , por lo que el proceso se repite hasta que en la capa más baja se encuentre un LHS menor que RHS (en la capa superior, LHS será mayor que RHS). Esta condición es la que caracteriza la capa que contiene H_d . Entonces, ya se puede calcular H_d dentro de esta capa, N constante, suponiendo que la velocidad del viento sigue un perfil lineal. Esta será la capa j , donde las alturas de la parte superior e inferior de dicha capa son z_{n+1} y z_j , respectivamente.

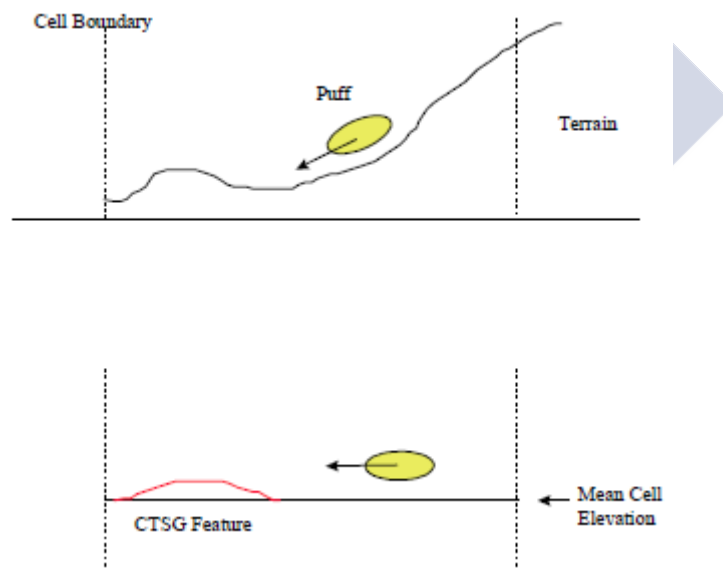


Figura 3.10 Aplicación del algoritmo CTSG. El panel inferior ilustra la porción del terreno presente en el panel superior que puede ser simulado mediante el algoritmo CTSG, y que considera la relación entre el terreno, los vientos modelados, y la parametrización del terreno según CTSG (Scire et al., 2000b).

Sea $u(z)$ en la capa como:

$$u(z) = a_j + b_j z \quad (\text{Ec 3.154})$$

entonces, la Ec 3.152 se transforma en,

$$\frac{1}{2}(a_j + b_j H_d)^2 = N_j^2 [H - 0,5(z_{j+1} + H_d)](z_{j+1} - H_d) + RHS_{j+1} \quad (\text{Ec 3.155})$$

donde el último término, RHS_{j+1} , indica el valor de RHS desde z_{j+1} hasta la cima de la elevación. La Ec 3.155 tiene una dependencia cuadrática de H_d , por lo que se resuelve fácilmente.

Una vez calculada H_d para una elevación específica, la escala de longitud de estratificación para el flujo por encima de H_d se calcula como u_m/N_m donde u_m y N_m son valores medios entre los correspondientes a H_d y a la primera capa de la malla meteorológica por encima de la parte superior de la elevación. Esta escala de longitud caracteriza el grado de estratificación del flujo por encima de H_d . Debe tenerse en cuenta que N_n se calcula a partir de las diferencias de temperatura a través de la capa.

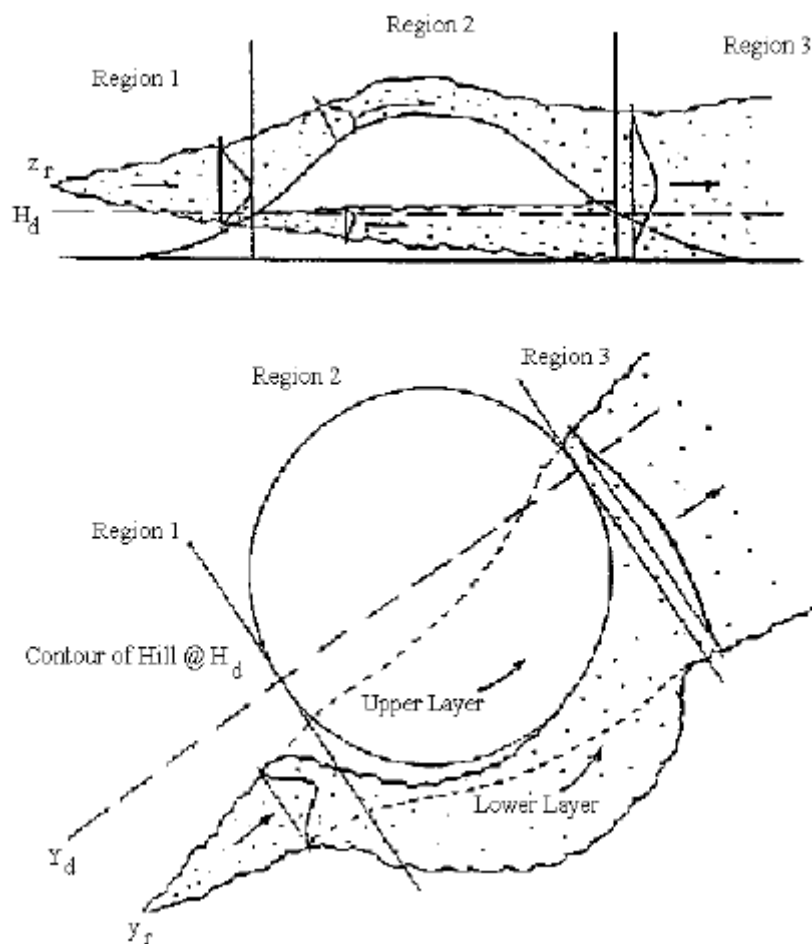


Figura 3.11 Ilustración de las regiones de modelado y partición del flujo por encima y por debajo de la altura de división del flujo, H_d (Scire et al., 2000b).

La Figura 3.11 ilustra cómo el algoritmo CTSG distingue el efecto submalla de una elevación sobre un puff, del flujo a gran escala derivado de la malla meteorológica. El material del puff por encima de H_d , la altura de división del flujo, experimenta una velocidad de dispersión alterada por el campo de flujo deformado sobre la elevación. Es este cambio en la dispersión el que conduce al incremento de inmisión observada sobre las elevaciones cuando H_d es cero. Cuando H_d no es cero, sólo la parte del puff que se encuentra por encima de H_d viajará por encima de la elevación. El puff se modeliza como si estuviera dividido a la altura H_d de manera que el material más

próximo al centro del puff pueda alcanzar la superficie sin dilución adicional. La teoría de difusión a través de columnas estrechas insertadas en un campo de flujo deformado (Hunt y Mulhearn, 1973) constituye la base para la estimación de los valores de inmisión en la capa superior.

Posteriormente, el material del puff por debajo de H_d se desvía alrededor de la elevación, insertándose en un flujo bidimensional horizontal. El estancamiento aerodinámico de este flujo conforma el límite de la elevación y, por lo tanto, separa las porciones del puff que viajan de un lado o del otro. El centro del puff puede afectar a la ladera de la elevación sólo si el puff está centrado de acuerdo con este estancamiento aerodinámico y dicho centro se encuentra por debajo de H_d .

A partir de aquí, las estimaciones de la concentración en esta capa inferior se basan en el análisis de Hunt et al. (1979); por lo que la inmisión cerca del punto de incidencia del puff sobre la elevación será igual a la que se obtenga directamente como contribución del puff en ausencia de la elevación a lo largo del estancamiento aerodinámico descrito, y teniendo en cuenta también la altura sobre el terreno del receptor en el que se calcula dicha inmisión. A medida que el penacho se encuentra con la elevación la distribución lateral de contaminante en el penacho se separa siguiendo el estancamiento aerodinámico, y cada segmento del penacho formado podrá viajar alrededor de la elevación de manera independiente y ser afectado por la reflexión completa sobre el suelo en el plano $z=0$ y $y=Y_d$ (estancamiento aerodinámico), es decir, sobre la ladera.

Por encima de H_d se considera que el flujo viaja paralelo al terreno en vertical, sin división horizontal; en tanto que por debajo de H_d el flujo viaja siguiendo la horizontal, sin división vertical. Además, en este caso el estancamiento aerodinámico define el límite de desplazamiento del flujo a izquierda o derecha del flujo horizontal original. Debido a estas consideraciones, es necesario distinguir la forma en que se pueden obtener las concentraciones de contaminante en las cercanías de los receptores; lo que puede dar lugar a discontinuidades de la concentración entre los receptores situados en H_d , a barlovento de la elevación, cuando el puff se encuentra lejos de experimentar el estancamiento aerodinámico del flujo por debajo de H_d , pero viaja hacia la elevación en la capa superior de H_d .

El algoritmo CTSG puede aplicarse siempre que se necesiten estimaciones de concentración en los receptores que se encuentran en elementos del terreno no representados en la malla meteorológica empleada. Además, especifica la relación entre un solo puff y todos los receptores en un elemento único del terreno y para un intervalo de tiempo determinado. En consecuencia, CTSG se aplica a cada par puff/elemento del terreno, en cada intervalo de tiempo, lo que puede incrementar el tiempo de cálculo necesario. Por ello, se obtiene alguna reducción en el tiempo de cálculo mediante el filtrado de los pares puff/elemento del terreno, considerando las combinaciones de tamaño y posición del puff y su relación con los elementos del terreno que

menos lo afectan; identificadas esas combinaciones, se resuelven como si no hubiese elevación del terreno.

3.9.1.2 Representación de la elevación del terreno

El algoritmo CTSG utiliza obstáculos analíticos simples para representar las características del terreno a escala submalla. Por debajo de H_d , CTSG emplea un cilindro elíptico para representar la elevación. Los ejes y la orientación de la elipse representan, respectivamente, las escalas (tamaño) de la elevación y la orientación de los elementos del terreno en la elevación mínima del puff, o en H_d . Por encima de H_d , CTSG utiliza una curva gaussiana para representar la elevación. El máximo de la campana de Gauss es igual a la diferencia de alturas entre la cima de la elevación y H_d . Las escalas de longitud horizontales y la orientación de la elevación se eligen de modo que la extensión lateral de la curva gaussiana a la mitad de su altura máxima sea representativa de la escala de la elevación, es decir, a medio camino entre H_d y la cima de la elevación.

Cuando el eje mayor de la elevación se sitúa a lo largo del eje x del sistema de coordenadas cartesiano empleado, estas figuras se definen como:

$$\text{elipse} \quad 1 = \left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 \quad (\text{Ec 3.156})$$

$$\text{gausiana} \quad h = H_d + H e^{-\left(\frac{x}{L_x}\right)^2 - \left(\frac{y}{L_y}\right)^2} \quad (\text{Ec 3.157})$$

donde (a,b) son las longitudes de los semiejes de la sección transversal horizontal del cilindro elíptico, por debajo de H_d , y (L_x,L_y) son las escalas de longitud de la curva gaussiana a lo largo de los dos ejes de la elevación, por encima de H_d .

Para cada terna (puff, elevación, valor de H_d) el modelo selecciona un cilindro elíptico y una curva gaussiana diferentes. Para ello, el usuario debe describir cada elemento de terreno como una elevación en forma de curva polinomial inversa. Para cada eje, la forma en que debe ajustarse el perfil de alturas de los elementos del terreno sigue la expresión:

$$ht = relief \left[\frac{1 - \left(\frac{|x|}{axmax}\right)^{expo}}{1 + \left(\frac{|x|}{scale}\right)^{expo}} \right] \quad (\text{Ec 3.158})$$

donde ht es la altura de un punto en la elevación sobre el plano de la celda; $|x|$ es el modulo de la distancia desde el centro de la elevación hasta el perfil polinomial inverso de la altura ht ; $axmax$ es el valor de $|x|$ para el cual ht es igual a cero (base de la elevación); $relief$ es la altura máxima de la

elevación sobre el plano de la celda, *scale* es la escala de la longitud de la función polinómica, que corresponde a la mitad del máximo de la función, y *expo* es el exponente de la función polinómica.

A partir de esta descripción matemática de la forma de la elevación, CTSG resuelve para cada *x*, en la elevación específica *ht*, a lo largo de cada eje de la elevación, a fin de obtener los semiejes del cilindro elíptico y la campana de Gauss:

$$axis(ht) = scale \left[\frac{1 - \frac{ht}{relief}}{\frac{h}{relief} + \left(\frac{scale}{ax\ max}\right)^{expo}} \right]^{\frac{1}{expo}} \quad (\text{Ec 3.159})$$

Por debajo de H_d la altura utilizada para obtener los ejes del cilindro elíptico es la mínima entre H_d y la altura del puff. Por encima de H_d , se determinan las escalas de longitud a medio camino entre H_d y la cima de la elevación, y las escalas de longitud correspondientes a la campana de Gauss se forman al multiplicar aquellas escalas de longitud por 1,20; este factor se establece a fin de restringir que la campana de Gauss y la función polinómica de la elevación ocupen el mismo espacio a mitad de altura entre H_d y la cima de la elevación.

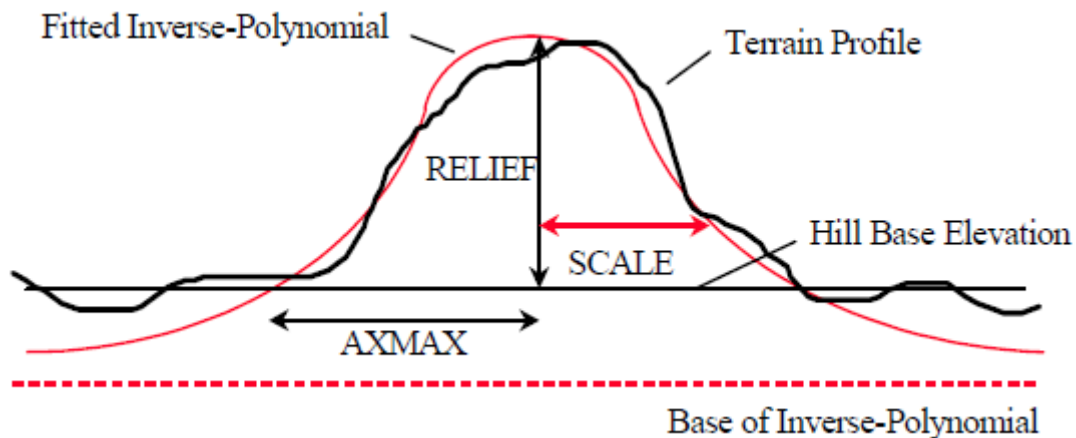


Figura 3.12 Perfil de un elemento de terreno a lo largo de uno de sus dos ejes. El ajuste inverso a la función polinómica (línea roja) define la forma de la elevación para su aplicación en el algoritmo CTSG (Scire et al., 2000b).

Alternativamente a esta aproximación teórica de la forma de cada elevación, el usuario puede elegir utilizar un archivo descriptivo del terreno, denominado "TERRAIN". Este archivo proporciona al modelo una serie de parámetros que definen elipses y perfiles polinómicos, ajustados a los elementos del terreno para una serie de valores de H_d . Con esta opción, CALPUFF utiliza las funciones de interpolación del modelo CTDMPPLUS para obtener los valores apropiados de la elipse y la curva gaussiana para cada elevación, y así calcular H_d .

3.9.1.3 Capa superior

La estimación de la concentración (g/m^3) en un receptor en la capa superior de la superficie de una elevación, originada por una columna cuya posición inicial es (z_p, y_p) , viene dada por:

$$C(t_R, y_R, 0; t_0) = \frac{qF_z F_y}{2\pi u \sigma_{ze} \sigma_{ye}} \quad (\text{Ec 3.160})$$

donde t_R es el tiempo de viaje (s) desde el foco emisor hasta el receptor, t_0 es el tiempo de viaje a lo largo de la línea central del penacho, desde el foco emisor hasta la base de la elevación a barlovento de esta (si H_d es distinto de cero, t_0 es el momento donde el flujo se encuentra con la elevación a una altura igual a la menor de z_p y H_d), y_R es la ubicación del receptor transversal al flujo (m), q es el flujo másico (g/s), F_y y F_z son las funciones de distribución horizontal y vertical respectivamente, u es la velocidad media del viento (m/s) a la altura del centro del penacho, y σ_{ze} y σ_{ye} son los parámetros efectivos de dispersión (m) dados por:

$$\sigma_{ze}^2 = \sigma_{z0}^2 + \left(\frac{\sigma_{z^*}}{T_z}\right)^2 \quad \sigma_{ye}^2 = \sigma_{y0}^2 + \left(\frac{\sigma_{y^*}}{T_y}\right)^2 \quad (\text{Ec 3.161})$$

El subíndice 0 indica el valor obtenido en $t=t_0$, y el subíndice * denota:

$$\sigma_{x^*}^2 = \sigma_x^2(t_R) - \sigma_x^2(t_0) \quad (\text{Ec 3.162})$$

T_z y T_y son factores que reflejan los efectos de la distorsión del flujo sobre la elevación en la dispersión vertical y transversal, respectivamente.

En el caso de un puff, la función de muestreo para el cálculo de la inmisión (GLC) se reescribe a partir de la Ec 3.160 como:

$$GLC = \frac{Q}{t_2 - t_1} \frac{F_y(t_R) F_z(t_R)}{4\pi u \sigma_{ze} \sigma_{ye}} \left[\text{erf} \left(\frac{t_2 - t_R}{\sqrt{2} \frac{\sigma_{ye}}{u}} \right) - \text{erf} \left(\frac{t_1 - t_R}{\sqrt{2} \frac{\sigma_{ye}}{u}} \right) \right] \quad (\text{Ec 3.163})$$

para el período de t_1 a t_2 , siendo ahora Q la masa total de material (g) en el puff.

Las funciones de distribución vienen dadas por:

$$F_y = e^{-0,5 \frac{(y_{Re} - y_p)^2}{\sigma_{ye}^2}} \quad (\text{Ec 3.164})$$

$$F_z = e^{-0,5 \frac{(z_p - H_d)^2}{\sigma_{ze}^2}} \text{erfc} \left(\sigma_z \frac{H_d - z_p}{2T_z \sigma_{ze} \sigma_{z0}} \right) + e^{-0,5 \frac{(z_p + H_d)^2}{\sigma_{ze}^2}} \text{erfc} \left(\sigma_z \frac{H_d + z_p}{2T_z \sigma_{ze} \sigma_{z0}} \right) \quad (\text{Ec 3.165})$$

F_y contiene información sobre la desviación de la trayectoria sobre la elevación, así como sobre los cambios en la dispersión. Así, la posición lateral efectiva del receptor con respecto a la línea central del penacho y la tasa efectiva de crecimiento del penacho se verán alteradas por la deformación aerodinámica sobre la elevación. Por lo tanto, la ubicación efectiva del receptor (Y_{Re})

y el tamaño efectivo transversal del penacho (σ_{ye}) son utilizados para calcular la función de distribución horizontal.

F_z también incluye el cambio de la dispersión en el tamaño efectivo de la columna vertical del penacho, σ_{ze} , y que incluye también la reflexión completa del penacho sobre la superficie de la elevación (en H_d) sólo para que el material que se extiende por encima de H_d en $t=a$, al dividirse el puff en $z=H_d$. La reflexión sobre esta superficie da lugar a la combinación de los productos de la función exponencial y de error en la Ec 3.165 (Strimaitis et al., 1988).

Estas expresiones no incluyen el efecto de la inversión térmica en altura en la distribución vertical del puff. Cuando la altura de la capa de mezcla limita la dispersión del penacho, la función F_z deberá contener más términos para simular reflexiones múltiples. La derivación de F_z en la altura de la capa de mezcla es una extensión de la formulación del modelo CTDMPLUS, y no es equivalente a la dispersión en una capa límite. Como resultado, en la altura de la capa de mezcla, z_L , la función de distribución vertical de contaminante en un puff a barlovento de la elevación vendrá dada por:

$$F_{z0} = e^{-\frac{(z_p-z)^2}{2\sigma_{z0}^2}} + e^{-\frac{(z_p+z)^2}{2\sigma_{z0}^2}} + \sum_t \left(e^{-\frac{(2iz_L-z_p-z)^2}{2\sigma_{z0}^2}} + e^{-\frac{(2iz_L-z_p+z)^2}{2\sigma_{z0}^2}} \right) + \sum_t \left(e^{-\frac{(2iz_L+z_p-z)^2}{2\sigma_{z0}^2}} + e^{-\frac{(2iz_L+z_p+z)^2}{2\sigma_{z0}^2}} \right) \quad (\text{Ec 3.166})$$

A su vez, sobre la elevación la función de distribución vertical (evaluada para un receptor en la superficie de la elevación, H_d) emitida por un foco emisor puntual situado a una altura z a barlovento de la elevación vendrá entonces dada por:

$$F_{zh} = 2 \left[e^{-\frac{(z-H_d)^2}{2\left(\frac{\sigma_{z*}}{T_z}\right)^2}} + \sum_i \left(e^{-\frac{[2i(z_L-H_d)-(z-H_d)]^2}{2\left(\frac{\sigma_{z*}}{T_z}\right)^2}} \right) + \sum_i \left(e^{-\frac{[2i(z_L-H_d)+(z-H_d)]^2}{2\left(\frac{\sigma_{z*}}{T_z}\right)^2}} \right) \right] \quad (\text{Ec 3.167})$$

Por lo tanto, la contribución total de la distribución vertical de material en el puff, a barlovento de la elevación, sobre la concentración en un receptor en la superficie de la elevación (inmisión), se obtiene integrando el producto de estas dos distribuciones entre $z=H_d$ y $z=z_L$. La F_z total resultante vendrá dada por:

$$F_z = 0,5 \left[\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} A_j B(E_j, E_{0i}^+) + \sum_{i=2}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} A_j B(E_j, E_{0i}^-) \right] \quad (\text{Ec 3.168})$$

donde

$$A_j = \min(2, j) \quad (\text{Ec 3.169})$$

$$E_j = 2(j-1)(z_L - H_d) \quad (\text{Ec 3.170})$$

$$E_{0i}^+ = 2z_L(i-1) + z_p \quad E_{0i}^- = 2z_L(i-1) - z_p \quad (\text{Ec 3.171})$$

y

$$\begin{aligned}
 B(E, E_0) = & e^{-\frac{(E-E_0+H_d)^2}{2\sigma_{ze}^2}} \left\{ \operatorname{erf} \left[K \left(\sigma_{ze}^2 (z_L - H_d) - D_1 \right) \right] + \operatorname{erf} (KD_1) \right\} \\
 & + e^{-\frac{(E+E_0-H_d)^2}{2\sigma_{ze}^2}} \left\{ \operatorname{erf} \left[K \left(\sigma_{ze}^2 (z_L - H_d) - D_2 \right) \right] + \operatorname{erf} (KD_2) \right\} \\
 & + e^{-\frac{(E+E_0+H_d)^2}{2\sigma_{ze}^2}} \left\{ \operatorname{erf} \left[K \left(\sigma_{ze}^2 (z_L - H_d) + D_3 \right) \right] - \operatorname{erf} (KD_3) \right\} \\
 & + e^{-\frac{(E-E_0-H_d)^2}{2\sigma_{ze}^2}} \left\{ \operatorname{erf} \left[K \left(\sigma_{ze}^2 (z_L - H_d) + D_4 \right) \right] - \operatorname{erf} (KD_4) \right\}
 \end{aligned} \tag{Ec 3.172}$$

donde

$$K = \frac{T_z}{\sqrt{2}\sigma_{ze}\sigma_{z0}\sigma_{z^*}} \tag{Ec 3.173}$$

$$D_1 = \sigma_{z^*}^2 \frac{E_0 - H_d}{T_z^2} + \sigma_{z0}^2 E \tag{Ec 3.174}$$

$$D_2 = \sigma_{z^*}^2 \frac{E_0 - H_d}{T_z^2} - \sigma_{z0}^2 E \tag{Ec 3.175}$$

$$D_3 = \sigma_{z^*}^2 \frac{E_0 + H_d}{T_z^2} - \sigma_{z0}^2 E \tag{Ec 3.176}$$

$$D_4 = \sigma_{z^*}^2 \frac{E_0 + H_d}{T_z^2} + \sigma_{z0}^2 E \tag{Ec 3.177}$$

Cada término de la suma en la Ec 3.168 es un producto de las funciones exponencial y de error, como en la Ec 3.165, y representa las múltiples reflexiones del puff en H_d y z_L . Si bien en la práctica los sumatorios no son calculados hasta el infinito. Así, el sumatorio interior para el índice j representa las reflexiones entre H_d y z_L una vez que el penacho se desplaza sobre la elevación, mientras que el sumatorio exterior sobre i representa las reflexiones entre 0 y z_L , antes de que el puff llegue a la elevación. El algoritmo que evalúa estos sumatorios continuará incrementando los índices hasta que el cambio fraccional en F_z (entre un sumatorio y el siguiente) sea menor del 1%. Además, la mezcla de contaminante resulta perfecta cuando σ_z alcance el valor de $1,6z_L$. En este punto, F_z de la Ec 3.168 se reduce a:

$$F_z = \frac{\sqrt{2}\sigma_z}{z_L} \tag{Ec 3.178}$$

Estas ecuaciones dan lugar a la forma básica de la contribución vertical a la dispersión gaussiana H_d sea cero y cuando z_L sea infinita. En ese límite $D1=D4$, $D2=D3$, y el análisis de los factores exponenciales revela que los índices (i,j) deben ser iguales para poder obtener términos distintos de cero. En consecuencia, el único término distinto de cero será cuando $i=j=1$, de modo que F_z queda:

$$F_z = (H_d = 0, z_L = \infty) = 2e^{-\frac{z_p^2}{2\sigma_{ze}^2}} \tag{Ec 3.179}$$

que es la forma comúnmente utilizada para la contribución vertical gaussiana para terreno plano.

La evaluación de las funciones de distribución F_y y F_z requiere el uso de un modelo de flujo que proporcione la aerodinámica para el flujo estratificado sobre una elevación. La ubicación transversal efectiva del receptor, Y_{Re} , y las dimensiones efectivas de puff, σ_{ze} y σ_{ye} , dependerán de las propiedades del flujo: estas propiedades están incluidas en el algoritmo de CTDMPLUS. Este algoritmo incorpora además una solución aproximada de la ecuación lineal del movimiento para el flujo de Boussinesq en estado estacionario sobre una elevación con forma gaussiana. Esta solución está formulada hacia atrás, es decir, el algoritmo responde a la pregunta: "¿De dónde viene la línea de flujo que pasa por el punto (x,y,z) ?" En lugar de a la pregunta: "¿A dónde va la línea de corriente que pasa por el punto (x,y,z) en el flujo a barlovento de una elevación, ya que el flujo se desvía por la presencia de dicha elevación?" Como tal, la relación entre la posición transversal del centro del puff, en ausencia de elevaciones del terreno (Y_P), y la posición transversal "original" (Y_{RE}) de la línea de flujo que pasa a través del receptor se obtiene directamente a partir de este algoritmo de flujo, ya que se conoce la posición del receptor en la elevación (x_R, y_R, z_R) (Perry et al., 1989).

Por su parte, la evaluación de σ_{ze} y σ_{ye} es más complicada. Como se indica en la Ec 3.161, estas dimensiones efectivas del puff requerirán el cálculo de σ_z/T_z y σ_y/T_y , que dependen además de las tasas de crecimiento del puff en ausencia de elevación y de la distorsión del flujo inducida por la elevación. Para su estimación se aplica la teoría de un penacho estrecho incluido en un flujo con deformación de simetría axial, desarrollado por Hunt y Mulhearn, 1973. Sus resultados muestran que la difusión de material en el flujo deformado es aproximadamente igual a:

$$\sigma_{zd}^2(t) = \frac{1}{S_z^2(t)} \int_0^t S_z^2(t') 2K_z(t') dt' \quad (\text{Ec 3.180})$$

$$\sigma_{yd}^2(t) = \frac{1}{S_y^2(t)} \int_0^t S_y^2(t') 2K_y(t') dt' \quad (\text{Ec 3.181})$$

donde K_z y K_y son las difusividades turbulentas, S_y y S_z son funciones de la deformación en el flujo y σ_{yd} y σ_{zd} describen el tamaño de un penacho deformado. Debido a que se supone que la deformación es insignificante lejos de la elevación, las Ec 3.180 y Ec 3.181 pueden reescribirse como:

$$\sigma_z^2(t) = \frac{1}{S_z^2(t)} \left[\sigma_{z0}^2 + \int_{t_0}^t S_z^2(t') 2K_z(t') dt' \right] \quad (\text{Ec 3.182})$$

$$\sigma_y^2(t) = \frac{1}{S_y^2(t)} \left[\sigma_{y0}^2 + \int_{t_0}^t S_y^2(t') 2K_y(t') dt' \right] \quad (\text{Ec 3.183})$$

Las expresiones entre corchetes son equivalentes a las cantidades σ_{ze}^2 y σ_{ye}^2 , definidas por la Ec 3.161, de manera que:

$$\frac{\sigma_{z^*}^2}{T_z^2} = \frac{\sigma_z^2(t) - \sigma_{z0}^2}{T_z^2} = \int_{t_0}^t S_z^2(t') 2K_z(t') dt' \quad (\text{Ec 3.184})$$

$$\frac{\sigma_{y^*}^2}{T_y^2} = \frac{\sigma_y^2(t) - \sigma_{y0}^2}{T_y^2} = \int_{t_0}^t S_y^2(t') 2K_y(t') dt' \quad (\text{Ec 3.185})$$

Las funciones de deformación son dadas por:

$$S_z(t) = e^{-Th(t)} \quad S_y(t) = e^{-Tl(t)} \quad (\text{Ec 3.186})$$

donde Th y Tl son los factores de deformación. Th es la relación entre líneas de flujo, espaciadas en la vertical, del flujo deformado y del flujo sin distorsiones. Mientras que Tl es la relación correspondiente para las líneas de flujo espaciadas en la dirección transversal (perpendicular al flujo). La inversa del producto de estos dos factores en cualquier punto del flujo será igual al factor de aceleración, Tu . Estos factores se calculan mediante el modelo CTDMPLUS. Las integrales Ec 3.184 y Ec 3.185 se evalúan numéricamente a lo largo de la trayectoria del centro del puff.

En ausencia de terreno, las difusividades turbulentas K , vertical y transversal (m^2/s), se determinan a partir de los coeficientes de dispersión:

$$2K(t) = \frac{d\sigma^2}{dt} \quad (\text{Ec 3.187})$$

donde σ denota indistintamente a σ_y y a σ_z . Se supone que el efecto del terreno sobre la difusividad turbulenta esta restringido al cambio en la turbulencia vertical sobre la elevación. El coeficiente de dispersión será entonces el producto de la turbulencia por una función dependiente del tiempo (en ausencia de terreno). Sobre la elevación, se supone que la velocidad de turbulencia vertical incremente la velocidad del viento como en la teoría de la "capa interna", y se supone que la velocidad lateral de la turbulencia es constante como en la teoría de "distorsión rápida" (Britter et al., 1981). Estas consideraciones tienden a acentuar el efecto de la elevación en el cálculo de la difusión. Sustituyendo las Ec 3.186 y Ec 3.187 e incrementando la intensidad vertical de la turbulencia por el factor de aceleración Tu , los integrandos de Ec 3.184 y Ec 3.185 se convierten en:

$$S_z^2 2K_z = e^{2(1-Th)} Tu^2 \frac{d\sigma_z^2}{dt} \quad (\text{Ec 3.188})$$

$$S_y^2 2K_y = e^{2(1-Tl)} Tu^2 \frac{d\sigma_y^2}{dt} \quad (\text{Ec 3.189})$$

Debido a los requerimientos de cálculo para obtener Th , Tl , y Tu , estos factores se evalúan en no más de 25 puntos a lo largo de la línea de flujo que pasa a través del centro del puff. Esta interpolación lineal entre estos puntos se utiliza a posteriormente en la integración numérica requerida para evaluar las Ec 3.184 y Ec 3.185 en cada receptor. El rango de puntos se centra en el punto medio de las intersecciones de la trayectoria del puff (sin desviación) y la elipse que marca el límite de la porción de la elevación por debajo de H_d , y cubre una distancia igual a una

vez y media veces la distancia entre los puntos de intersección de la recta $y=0$ (el plano central del flujo sobre la elevación) y la elipse. Si la trayectoria desviada del puff no corta la elipse, entonces los factores de distorsión se ajustarán a la unidad y la elevación no tendría efecto alguno sobre σ_z y σ_y .

Se debe tener en cuenta que la elevación tampoco tiene ningún efecto sobre σ_z o σ_y cuando la tasa de crecimiento del puff es prácticamente cero. Esto no quiere decir que la elevación no tenga ningún efecto sobre las concentraciones, sin embargo, debido a la distorsión del flujo en los resultados de la elevación en $y_{Re} \neq y_R$, y dividiendo la altura de división del flujo, aún permite que el material de puff en $z=H_d$ se ponga en contacto con la superficie de la elevación.

3.9.1.4 Capa Inferior

La ecuación para la estimación de la concentración (g/m^3) en un receptor, en la superficie de una elevación en la capa inferior, debido a un penacho cuya posición inicial es (z_r, y_r) , está dada por:

$$C(t_r, y_d, z_R; t_0) = \frac{qF_z F_y}{2\pi u \sigma_z \sigma_y} \quad (\text{Ec 3.190})$$

donde Y_d es la ubicación transversal del viento (m) de la altura de división del flujo lateral que coincide con la vertiente lateral de la elevación, Z_r es la elevación del receptor desde la superficie de la elevación, F_y y F_z son las funciones de distribución vertical y horizontal, respectivamente, u es la velocidad media del viento (m/s) a la elevación del centro del penacho, y σ_z y σ_y son los parámetros de dispersión (m) en t_r . Debe tenerse en cuenta que, a diferencia de la Ec 3.180 para la capa superior, los cambios en la velocidad de difusión inducidos por la elevación en la capa inferior son considerados pequeños.

En el caso de un puff, la función de muestreo nos permite reescribir la estimación de la concentración para un receptor en la superficie (Ec 3.190) como:

$$GLC = \frac{Q}{t_2 - t_1} \frac{F_y(t_R) F_z(t_R)}{4\pi u \sigma_z \sigma_y} \left[\text{erf} \left(\frac{t_2 - t_R}{\sqrt{2} \frac{\sigma_y}{u}} \right) - \text{erf} \left(\frac{t_1 - t_R}{\sqrt{2} \frac{\sigma_y}{u}} \right) \right] \quad (\text{Ec 3.191})$$

Las funciones de distribución están dadas por:

$$F_y = e^{-\frac{(y_d - y_p)^2}{2\sigma_y^2}} \left\{ 1 \pm \text{erf} \left[\frac{(y_d - y_p)\sigma_{y^*}}{\sqrt{2}\sigma_{y0}\sigma_y} \right] \right\} \quad (\text{Ec 3.192})$$

$$F_z = 0,5e^{-\frac{(z_p - z_R)^2}{2\sigma_z^2}} \left\{ \text{erf}[(b1 - b2 - b3)K] + \text{erf}[(b1 + b2 + b3)K] \right\} \\ + 0,5e^{-\frac{(z_p + z_R)^2}{2\sigma_z^2}} \left\{ \text{erf}[(b1 - b2 + b3)K] + \text{erf}[(b1 + b2 - b3)K] \right\} \quad (\text{Ec 3.193})$$

donde

$$K = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma_z\sigma_{z0}\sigma_{z^*}} \quad b1 = H_d\sigma_z^2 \quad (\text{Ec 3.194})$$

$$b2 = z_R\sigma_{z0}^2 \quad b3 = z_p\sigma_{z^*}^2 \quad (\text{Ec 3.195})$$

La notación es la misma que la empleada en la sección 3.9.1.3. La única nueva magnitud introducida en estas ecuaciones es Y_d , que es la posición lateral de la estratificación a barlovento de cualquier distorsión de flujo. Al igual que en el modelo CTDMPLUS, se calcula resolviendo el patrón bidimensional de las líneas de flujo sobre una elipse.

F_y contiene información acerca de la cantidad de material a cada lado de la elevación y de cómo se muestrea el penacho en la dirección lateral. El desplazamiento lateral es la distancia desde la línea central a Y_d , lo que refleja la idea de que todos los receptores se encuentran ubicados en ambos lados de una elevación, coincidente con la posición de la altura de división del flujo lateral. Además, el material puede ser dividido hacia cualquiera de los lados, y podrá ocurrir una reflexión completa del material a lo largo de esta superficie, dando lugar a las funciones exponenciales y de error de la Ec 3.192. Debe tenerse en cuenta que el signo de la función de error será positivo cuando tanto el receptor como la trayectoria del centro del puff se encuentren en el mismo lado de Y_d . Si todo el material estuviera en un solo lado, de Y_d a t_0 , entonces F_y sería igual a 2 ó a 0, dependiendo de si el receptor, así como el puff, estaban en el mismo lado o en el otro lado de Y_d .

F_z contiene información acerca de la cantidad de material por debajo de H_d y hasta t_0 , y de cómo este material se muestrea en la vertical. El resultado es el producto de una función exponencial y otra de error, en la que el muestreo en altura Z_R es más evidente en la función exponencial, y los efectos de la división del penacho en H_d figuran en las funciones de error (Strimaitis et al., 1988).

Estas expresiones no incluyen el efecto de una inversión en altura en la distribución vertical del puff. Cuando la altura de la capa de mezcla, Z_L , afecta al penacho, la función F_z contendrá muchos más términos para simular reflexiones múltiples y el resultado será análogo al descrito en la sección 3.9.1.3:

$$F_z = 0,5 \left[\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} B(E_j^+, E_{0i}^+) + \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=2}^{\infty} B(E_j^-, E_{0i}^+) + \sum_{i=2}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} B(E_j^+, E_{0i}^-) + \sum_{i=2}^{\infty} \sum_{j=2}^{\infty} B(E_j^-, E_{0i}^-) \right] \quad (\text{Ec 3.196})$$

donde

$$E_j^+ = 2(j-1)z_L + z_R \quad E_j^- = 2(j-1)z_L - z_R \quad (\text{Ec 3.197})$$

$$E_{0i}^+ = 2(i-1)z_L + z_p \quad E_{0i}^- = 2(i-1)z_L - z_p \quad (\text{Ec 3.198})$$

y

$$B(E, E_0) = e^{-\frac{(E_0-E)^2}{2\sigma_z^2}} \left\{ \text{erf} [K(b1-b2-b3)] + \text{erf} [K(b1+b2+b3)] \right\} \\ + e^{-\frac{(E_0+E)^2}{2\sigma_z^2}} \left\{ \text{erf} [K(b1+b2-b3)] + \text{erf} [K(b1-b2+b3)] \right\} \quad (\text{Ec 3.199})$$

donde

$$K = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma_z\sigma_{z0}\sigma_{z^*}} \quad b1 = H_d\sigma_z^2 \quad \text{=s las 2} \quad (\text{Ec 3.200})$$

$$b2 = E\sigma_{z0}^2 \quad b3 = E_0\sigma_{z^*}^2 \quad (\text{Ec 3.201})$$

La forma B es idéntica a la de F_z (Ec 3.193) para el caso de que no exista ningún límite para la mezcla vertical. Las diferencias surgen en el uso de (E, E_0) en lugar de (Z_r, Z_p) , por lo que la presencia de la altura de la capa de mezcla se pone de manifiesto en la Ec 3.196.

El sumatorio exterior sobre el índice i representa reflexiones entre la altura de la capa de mezcla y la superficie, antes de que el puff alcance la elevación. El sumatorio interior sobre j tiene en cuenta la reflexión que puede ocurrir así como la difusión de materiales por encima de H_d cuando el puff pasa sobre la elevación. El sumatorio interno producirá generalmente términos distintos de cero sólo para $j=1$, a menos que se encuentre una altura de mezcla sólo ligeramente superior a H_d . Pero esta circunstancia no puede ocurrir, teniendo en cuenta la definición de H_d y Z_L . En la evaluación de los sumatorios se incluyen términos para los valores mayores de cada índice hasta que el cambio relativo en F_z sea menor del 1%. La distribución de material en la vertical resulta perfectamente mezclada cuando σ_z alcanza $1,6Z_L$: en este punto, F_z en la Ec 3.191 se reduce a Ec 3.178.

3.9.2 Ajustes simples de la dispersión debida al terreno

En CALPUFF se aplican ajustes del terreno adicionales a los previstos por el modelo CALMET y la subrutina CTSG. El campo de viento transporta un puff a lo largo de la superficie, pero nunca provoca que cambie su altura. Por lo tanto, el puff puede ser canalizado o desviado por el terreno, pero no será afectado ni interactuará fuertemente con el terreno sin un tratamiento adicional del fenómeno. Algunas aplicaciones de carácter general suelen incluir variaciones del terreno en muchas escalas espaciales, pero por su complejidad no son prácticas para abordarlas con la subrutina CTSG.

CALPUFF ofrece tres métodos de ajuste simple de la dispersión debida al terreno. Dos de ellos están incorporados en modelos de penacho existentes: el ajuste del terreno original del modelo ISC y el coeficiente de ajuste de trayectoria del penacho. El tercero es un tratamiento exclusivo del modelo CALPUFF, que es consistente con los conceptos sobre los efectos de la deformación en el flujo en el crecimiento del puff, incluidos en el tratamiento CTSG, pero introduciendo simplificaciones que permiten su aplicación práctica a los datos orográficos empleados por CALPUFF.

3.9.2.1 Ajuste ISC

El modelo ISC original no está diseñado para su uso en situaciones en las que los receptores están a una cota superior a la altura de la chimenea. Para resolver este problema, los receptores que se encuentren por encima de esta altura se sitúan a una cota modificada de 0,005 m por debajo de la altura de la chimenea, en cada período de simulación y para cada foco emisor. Por su parte, la altura de mezcla no se reajusta con ningún parámetro del terreno y los cálculos de flujo descendente tampoco modifican la altura de la chimenea que se utiliza para determinar la cota modificada del receptor.

Una vez que se determina la cota del receptor, el factor de distribución vertical contendrá la diferencia de alturas entre la línea central del penacho y la cota modificada del receptor. De esta forma, la línea central del penacho se reduce en una cantidad igual a la cota modificada del receptor, desde la base de la chimenea.

3.9.2.2 Ajuste por coeficiente de trayectoria del penacho

En este ajuste la altura del penacho en un receptor dependerá de la altura del penacho sobre el nivel del terreno, de la altura del receptor por encima de la base de la chimenea y de un coeficiente de trayectoria del penacho (C), dependiente de la categoría de estabilidad. Valores típicos de este coeficiente son: $C=0,35$ para categorías estables (E y F) y $C=0,5$ para el resto (categorías A, B, C y D).

Sean H_s la cota de la base de la chimenea (sobre el nivel del mar) y H_r la cota del receptor (sobre el nivel del mar), H_{p0} la altura efectiva del penacho emitido, después de su sobreelevación, y H_p la altura del penacho sobre el receptor:

- Si la cota del receptor excede la altura efectiva del penacho emitido, entonces,

$$H_p = H_{p0}C \quad (\text{Ec 3.202})$$

- Si la cota del receptor se encuentra por debajo de la altura efectiva del penacho emitido, entonces,

$$H_p = H_{p0} - (H_r - H_s)(1 - C) \quad (\text{Ec 3.203})$$

Debe tenerse en cuenta que $H_r \geq H_s$ no es una restricción para la aplicación de la ecuación anterior. Si la cota del terreno desciende por debajo de la cota de la base de la chimenea a lo largo de la trayectoria del puff, la altura del puff aumentará en consecuencia. En general, la altura de mezcla no cambiará, a menos que la altura efectiva del puff se haga mayor que la altura de mezcla, en cuyo caso la altura de mezcla se reinicia considerando mezcla libre durante el cálculo de la concentración en el receptor.

Cuando $C=0$, la diferencia total entre las cotas de la base de la chimenea y la del receptor se resta de la altura del puff. Esta solución se denomina de “nivel de penacho”, ya que mantiene constante dicho nivel.

3.9.2.3 Ajuste CALPUFF basado en la deformación

En general, este ajuste debe tener en cuenta los siguientes aspectos:

- (1) El ajuste debe estar constituido por funciones analíticas de propiedades físicas del flujo, la dispersión y el terreno.
- (2) Los problemas asociados con las reflexiones deben reducirse al mínimo.
- (3) Los ajustes deben basarse en las propiedades locales del terreno, de modo que no se requieran las alturas relativas a cotas específicas, la base de la chimenea o la base del penacho.
- (4) Los ajustes deben estar relacionados con los conceptos utilizados en la subrutina CTSG (modelo CTDM).
- (5) Los puff provenientes de diferentes focos que coincidan en algún punto deben ser tratados por igual, según interactúen con los parámetros del terreno en dicho punto.

En este método las propiedades de un puff se ajustan sobre la base de la deformación local del flujo debida al terreno, mediante una simplificación del método CTSG. Esencialmente, la dispersión eficaz del puff en la vertical puede ser alterada por el terreno, aumentando de este modo las concentraciones a nivel del suelo en la región en la que la altura del puff sea aproximadamente igual a σ_z . Adicionalmente, también se puede modificar la altura a la que se calcula la inmisión para simular los procesos de choque.

Dentro de este método es necesario determinar la influencia del terreno en el impacto del penacho y en su deformación.

3.9.2.3.1 Influencia del terreno sobre el impacto

Para condiciones muy estables ($Fr < 1$) se supone que el campo de vientos obligará a la mayor parte del flujo a que sea paralelo a los contornos de la elevación del terreno, de modo que el puff se encontrará con un terreno menos elevado. Cuanto menor sea esta elevación aparente del terreno, más fácil será la generación de una división local del flujo a la altura H_d ya vista, por debajo de la cual el flujo es esencialmente bidimensional. Si la cota topográfica es mayor que la altura del puff, una parte del flujo por debajo del puff puede ser desviada lateralmente, permitiendo que el flujo que contenga al puff se acerque más a la superficie. El cambio resultante en la altura del puff respecto del suelo se modela explícitamente en CALPUFF si el puff no ha llegado ya a la

superficie. Es decir, el aire limpio por debajo del puff, y por debajo de H_d , será desviado, mientras que el que contenga porciones significativas de material permanecerá inalterado.

Por debajo del nivel de H_d la distribución lateral del puff se mantiene y este fenómeno se simula mediante la colocación de receptores en alturas virtuales relacionadas con la cota del terreno justo debajo del centro del puff. Esto permite que los bordes del puff rocen las paredes laterales de un valle o un canal, reproduciendo la inmisión por impacto.

Si un receptor se encuentra en una cota por encima de la cota de la base del puff, pero por debajo de H_d , la altura virtual del receptor será la diferencia de cotas en el receptor y en la ubicación del puff; por lo tanto, se calculará la inmisión sobre el receptor a partir de la distribución en el puff por encima del terreno.

Pero si esa altura virtual es igual a la altura real del puff sobre el suelo, la concentración obtenida directamente a partir de la distribución en el puff será la inmisión por impacto.

Finalmente, si la altura virtual excede de la parte superior del puff, la concentración resultante será insignificante, debido a que el material del puff se encontrará confinado dentro del valle por debajo de la altura de ese receptor.

La Figura 3.13 ilustra este tratamiento: el puff se desplaza en el plano de la figura, y su tamaño se denota por la medida de la elipse con ejes iguales a σ_y , σ_z . La cota debajo del puff se muestra mediante la línea discontinua horizontal y el terreno real se muestra por líneas continuas. El receptor se indica por la estrella y, bajo el mismo, su altura virtual. Cuando Fr es pequeño y H_d es grande, el receptor se coloca a esa altura virtual de modo que las concentraciones en el receptor son determinadas por su interceptación dentro del puff. Mientras que cuando Fr es grande y H_d es cero, este receptor se coloca en una cota por debajo del centro del puff, ya que el plano central del puff seguirá el terreno real.

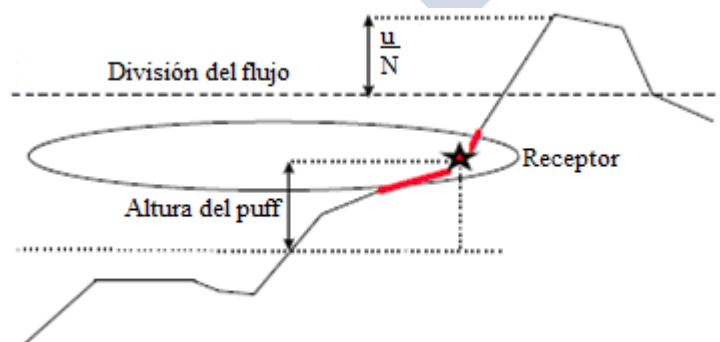


Figura 3.13 Representación del tratamiento en CALPUFF de la interacción del puff con una elevación lateral del terreno en condiciones fuertemente estratificadas (estable). Se supone que el viento se desplaza hacia el interior de la página (Scire et al., 2000b).

La implementación de este esquema requiere un método de estimación de H_d : en primer lugar, se asigna la cota de la cima a cada celda del modelo, utilizando la matriz de datos del terreno

procedente del archivo de resultados de CALMET (que incorpora la topografía empleada). Esta cota reproduce la pendiente máxima de la celda, teniendo en cuenta las cotas de las celdas adyacentes. Si esa cota es la máxima respecto de las adyacentes (un máximo local), la pendiente se reduce y se invierte su signo, para indicar que la celda está situada en la cima de la colina en este segmento del terreno. A continuación, utilizando la cota de la cima para la celda en la que se encuentra un receptor (E_r), la elevación E_d de la altura de división del flujo se calcula como:

$$E_d = E_t - \frac{u}{N} \quad (\text{Ec 3.204})$$

donde la velocidad del viento u , y la frecuencia de Brunt-Vaisala, N , son propiedades medias del flujo, desde la parte inferior a la parte superior del puff.

A su vez, la altura de división del flujo por encima de la superficie para este puff y este receptor es:

$$H_d = \text{MAX}(0, 0; E_d - E_p) \quad (\text{Ec 3.205})$$

donde E_p es la cota del terreno bajo el puff.

Del mismo modo, la altura del receptor por encima de la superficie para este puff será:

$$z_r = \text{MAX}(0, 0; E_r - E_p) \quad (\text{Ec 3.206})$$

donde E_r es la elevación del terreno en el receptor.

Ahora, la altura virtual (Z_{rp}) se puede especificar como:

$$\begin{array}{ll} \text{si} & H_d \neq 0, 0, \quad Z_{rp} = 0, 0 \\ \text{si} & H_d > Z_r, \quad Z_{rp} = Z_r \\ \text{y, si} & H_d \leq Z_r, \quad Z_{rp} = H_d \end{array} \quad (\text{Ec 3.207})$$

El primer caso da como resultado el cálculo en un terreno llano y el segundo un impacto completo, sin ninguna desviación. El tercero es un caso intermedio, en que se permite que cualquier material del puff, que se encuentre por encima de H_d ascienda por la pendiente del terreno. Así, los receptores por encima de H_d sólo detectan concentraciones en el puff en H_d , debido a que solo estas entran en contacto con la superficie.

En la práctica, sólo se espera que las concentraciones de impacto surjan en valles con flujos muy estables estratificados. Estas concentraciones serán detectadas a lo largo de las laderas del valle, en cotas aproximadamente iguales a la altura del puff, cuando las ráfagas de viento se mantengan confinadas en el flujo del valle.

Una consideración relacionada con el tratamiento de los receptores a lo largo de las laderas de un valle es el efecto de dichas laderas en el crecimiento de la distribución lateral del puff. El flujo medio dentro de un valle, con fuerte estratificación estable, se orientará a lo largo del eje del valle. Los movimientos laterales del puff están limitados por la dimensión transversal del valle. Por lo tanto, el valor medio de σ_y en el tiempo no debería ser mucho mayor que la anchura del valle. Este efecto se introduce en CALPUFF introduciendo un valor límite, σ_{yc} , para σ_y :

$$\sigma_{yc} = 0,4W_v \quad (\text{Ec 3.208})$$

donde W_v es el ancho del valle en la posición del centro del puff. Estos anchos de valle se calculan para cada celda, en un rango de diferentes alturas por encima del suelo. Con estos datos, el ancho limitante para un puff particular se determina por interpolación de la altura del centro del puff por encima del suelo. El valor de 0,4 se determina para hacer coincidir el área dentro de la distribución gaussiana lateral del puff, con la distribución de probabilidad denominada "top-hat", de ancho W_v , sujeta a la restricción de que las concentraciones máximas de ambas distribuciones sean iguales.

Debido a esta limitación en el valor de σ_{yc} con el movimiento del puff a lo largo del valle habrá momentos en los que dicho valor pueda ser sustancialmente menor que la σ_y inicial del puff. Cuando esto suceda, el crecimiento lateral del puff será cero y σ_y se mantendrá en su valor inicial.

3.9.2.3.2 Cálculo de la deformación

En ausencia de división del flujo, el componente de elevación del modelo CTDMPLUS calcula unas σ_y y σ_z efectivas, de la que se obtienen las concentraciones modificadas por el terreno usando la ecuación gaussiana estándar en el puff (Ec 3.182 y Ec 3.183) de la subrutina CTSG. Así, para σ_z se define un factor deformación $T_z = \eta/z_f$, donde η es el espaciado entre líneas de flujo en el flujo deformado, y z_f es el espaciado entre las mismas líneas de flujo en el flujo no deformado sobre terreno llano.

Esta consideración del tamaño efectivo del puff se introduce para permitir que las concentraciones se calculen suponiendo la existencia de un terreno llano, aún cuando no lo sea. Se infiere además que el efecto primario de la deformación en el flujo es alterar la tasa de intercambio de material a través de las líneas de flujo. Por lo tanto, la relación σ_z/η en el flujo deformado puede ser mayor que la relación correspondiente σ_z/z_f .

El cálculo de la deformación del puff siguiendo los principios de la subrutina CTSG requiere, sin embargo, su simplificación para su aplicación práctica. En el modelo CALPUFF esta simplificación se desarrolla en los siguientes pasos:

- 1) La pendiente del terreno $|\alpha|$ por debajo del puff, tomada a lo largo de la dirección de transporte, y el relieve local proporcionan la información utilizada para estimar la influencia del terreno sobre el crecimiento vertical del puff durante un intervalo de tiempo.
- 2) Para representar la escala del terreno se utiliza un sustituto bidimensional de la elevación, de igual pendiente.
- 3) El factor de deformación T_z se determina a partir de la ecuación de desviación de las líneas de flujo, aplicada a la colina sustituta.

- 4) Tanto T_z como su derivada dT_z/dt se evalúan en la posición de la elevación sustituta en la que dT_z/dt tome un valor extremo: en la cara a barlovento de la elevación si la pendiente del terreno es positiva; y a sotavento, si es negativa.
- 5) Se supone que el factor de deformación es una función lineal del intervalo de tiempo Δt , y σ_{ze} se calcula a partir T_z , dT_z/dt .

Con este planteamiento, el tamaño vertical efectivo del puff suponiendo terreno llano (σ_{ze}) se define mediante:

$$\frac{z_f}{\sigma_{ze}} = \frac{\eta}{\sigma_z} \quad (\text{Ec 3.209})$$

o

$$\sigma_{ze}^2 = \frac{1}{T_z^2} \sigma_z^2 \quad (\text{Ec 3.210})$$

Al igual que en la subrutina CTSG, el efecto de la deformación sobre σ_z puede estimarse como:

$$\sigma_z^2(t) = \frac{1}{S_z^2(t)} \int_0^t 2K(t') S_z^2(t') dt' \quad (\text{Ec 3.211})$$

La integral se evalúa durante la vida del puff, incorporando así la historia de la totalidad de la deformación experimentada por dicho puff. La función de deformación S_z depende del valor local del factor de deformación, T_z :

$$S_z(t) = e^{1-T_z(t)} \quad (\text{Ec 3.212})$$

Para una deformación débil, se observa que la función de deformación es, aproximadamente:

$$S_z(t) = \frac{1}{T_z(t)} \quad (\text{Ec 3.213})$$

En el modelo CALPUFF, la integral de la Ec 3.180 se evalúa progresivamente, ya que el puff se desplaza a intervalos Δt . Por lo tanto, en cada instante t hasta $t+\Delta t$ se recalcula la integral para evaluar el efecto de la deformación sobre el crecimiento en σ_z , desde el tiempo t hasta $t+\Delta t$:

$$\sigma_z^2(t + \Delta t) = \frac{S_z^2(t) \sigma_z^2(t) + \int_0^{\Delta t} 2K(t+t') S_z^2(T+t') dt'}{S_z^2(t + \Delta t)} \quad (\text{Ec 3.214})$$

La Ec 3.214 se puede aproximar fácilmente mediante la sustitución de $2K(t+t')$ como su valor medio durante el intervalo:

$$2\bar{K}(t, \Delta t) = \frac{\sigma_{ze}^2(t, t + \Delta t) - \sigma_{ze}^2(t)}{\Delta t} \quad (\text{Ec 3.215})$$

Aquí se introduce la notación $\sigma_{ze}(t, t+\Delta t)$ para denotar el valor de la σ_z efectiva calculada en el instante $t+\Delta t$ a partir de su valor en el instante t . Es decir, si se utiliza una curva de dispersión para

σ_z , encontraremos el valor actual de $\sigma_{ze}(t)$ y podemos estimar el valor en $t+\Delta t$ moviéndose un intervalo de tiempo Δt a lo largo de la curva, suponiendo que no haet al. efectos del terreno.

A mayores, se supone que el factor de deformación, T_z , varía linealmente en dicho intervalo de tiempo, de modo que:

$$T_z(t+t') = T_z(t) + \frac{dT_z}{dt} t' \quad (\text{Ec 3.216})$$

y así la Ec 3.214 se convierte en:

$$\sigma_z^2(t+\Delta t) = \frac{S^2(t)\sigma_z^2(t) + 2\bar{K}(t, \Delta t) \int_0^{\Delta t} e^{1-T_z(t)-\frac{dT_z}{dt}t'} dt'}{S^2(t+\Delta t)} \quad (\text{Ec 3.217})$$

La evaluación de la integral en la Ec 3.217, da lugar a la ecuación:

$$S^2(t+\Delta t)\sigma_z^2(t+\Delta t) = S^2(t)\sigma_z^2(t) + 2\bar{K}(t, \Delta t) \frac{1 - e^{-2\Delta t \frac{dT_z}{dt}}}{2 \frac{dT_z}{dt}} \quad (\text{Ec 3.218})$$

Este resultado puede interpretarse mediante la asociación de $S^2(t)\sigma_z^2(t)$ con $\sigma_{ze}^2(t)$, sobre la base de la Ec 3.210 y la relación aproximada en la Ec 3.213. Por lo tanto,

$$\sigma_{ze}^2(t+\Delta t) = \sigma_{ze}^2(t) + S^2(t) \left[\sigma_{ze}^2(t, t+\Delta t) - \sigma_{ze}^2(t) \right] \frac{1 - e^{-2\Delta t \frac{dT_z}{dt}}}{2\Delta t \frac{dT_z}{dt}} \quad (\text{Ec 3.219})$$

proporciona el crecimiento de la propagación vertical efectiva durante un intervalo de tiempo Δt , bajo la influencia de un campo de vientos deformado.

La aplicación de la Ec 3.219 requiere un modelo para determinar la deformación $T_z(t)$ en el campo de vientos. La subrutina CTSG, contiene una descripción de las escalas de longitud y la posición de un parámetro del terreno y el modelo de flujo dentro de CTSG proporciona una función de deformación del flujo. En este ajuste simplificado, sin embargo, se emplea un sustituto para obtener la deformación, para lo que se infiere la escala de un parámetro de terreno bidimensional (que se extiende transversal al flujo) a partir de la pendiente de la superficie subyacente a lo largo del flujo. El módulo de esta pendiente del terreno $|\alpha|$ se identifica con un sustituto de la elevación, de altura h_0 , y de longitud media L , de modo que:

$$|\alpha| = \frac{h_0}{2L} \quad (\text{Ec 3.220})$$

El modelo de flujo utilizado en la subrutina CTSG proporciona la siguiente ecuación para la desviación de una línea de flujo (δ) sobre una cumbre bidimensional, en flujo estratificado:

$$\delta(x, \eta) = h(x) e^{-\eta/L} \left(\cos \ell \eta - \frac{x}{L} \text{sen} \ell \eta \right) \quad (\text{Ec 3.221})$$

donde la función de la altura de la elevación tiene la forma:

$$h(x) = \frac{h_0}{1 + \left(\frac{x}{L}\right)^2} \quad (\text{Ec 3.222})$$

El factor de estratificación es $\ell=N/u$, siendo x la dirección hacia sotavento y origen en el centro de la elevación, y η la altura de la línea de flujo por encima de la superficie en la posición x .

Para asociar una deformación a la pendiente a lo largo de la trayectoria del puff se deben asignar valores representativos de T_z y dT_z/dt de la elevación sustituta. El lugar elegido para evaluar T_z y dT_z/dt es el punto en el que dT_z/dx toma un valor extremo. En consecuencia, el factor de deformación se define mediante la relación entre la altura de división del flujo y la misma altura a barlovento:

$$T_z(x) = \frac{\eta(x)}{\eta_\infty} = \frac{\eta(x)}{h(x) + \eta(x) - \delta(x, \eta)} \quad (\text{Ec 3.223})$$

El factor de la deformación en (x/L) vendrá dado por:

$$T_z^{-1}(x/L) = 1 + \frac{2|\alpha|}{\frac{\eta}{L} \left[1 + \left(\frac{x}{L}\right)^2\right]} \left[1 - e^{-\eta/L} \left(\cos \ell \eta - \frac{x}{L} \text{sen} \ell \eta\right)\right] \quad (\text{Ec 3.224})$$

y el cambio de T_z con la distancia (x/L) es:

$$\frac{dT_z}{dx}(x/L) = \frac{-2|\alpha|T_z^2}{\eta \left[1 + \left(\frac{x}{L}\right)^2\right]} \left[-2(x/L) + e^{-\eta/L} \left(2(x/L) \cos \ell \eta + \left[1 + \left(\frac{x}{L}\right)^2\right] \text{sen} \ell \eta\right)\right] \quad (\text{Ec 3.225})$$

La introducción de una colina sustituta que simplifica el cálculo de la deformación requiere la reformulación de las alturas de división del flujo, η , relativas a las escalas de longitud de la colina sustituta. Por una parte, se establece η igual a la altura del puff, debido a que la deformación sobre la escala del puff determinará la modificación de su crecimiento. Sin embargo la escala de la elevación, no se ha determinado, ya que en esta aproximación sólo se ha utilizado la pendiente del terreno. Para determinar esta escala se procesa la malla de cotas para obtener el relieve local de cada celda, considerando cada orientación (N/S, NE/SO, E/W, y SE/NO) de modo que la altura de la elevación, H_0 , de la Ec 3.220 se pueda determinar según la dirección en la que viaja el puff y los valores de H_0 para las orientaciones indicadas. El relieve para cada celda y orientación se obtiene siguiendo el cambio gradual de la cota en ambas direcciones a lo largo de cada orientación, y la comparación de este con el primer cambio. Considerando cada cambio en la cota como una pendiente, α_i , y denotando la pendiente en la celda como α_0 , se acumulan los cambios en la cota hasta que se cumpla la siguiente condición:

$$\left| \frac{\alpha_i}{\alpha_0} - 1 \right| > \beta \quad (\text{Ec 3.226})$$

donde se toma $\beta=1$. Con esta elección de β , los cambios de cota topográfica se acumulan en cada dirección hasta que la pendiente se duplique, o hasta que cambie de signo. De esta manera, los parámetros locales definen la altura elevación para cada celda (y orientación), lo que resulta apropiado para determinar la fortaleza de la interacción entre el terreno y el puff en cada intervalo de tiempo: si η/h_0 es grande (>10), el puff estará muy por encima del terreno y el efecto de este sobre el flujo a dicha altura será pequeño. Si η/h_0 es pequeña ($<0,1$), el puff se moverá en un flujo altamente afectado por el terreno. En ambos casos, la pendiente del terreno a lo largo de la trayectoria del puff podría ser la misma, pero es η/h_0 quien diferencia la fortaleza del efecto del terreno sobre el puff.

3.10 Deposición

Los gases caen en la atmósfera debido a la fuerza de gravedad. Su velocidad de caída se determina por el equilibrio entre la fuerza de gravedad y la fuerza de fricción que surge debido a la viscosidad del aire. Esta caída se llama sedimentación. Pero la masa de los gases es tan pequeña que sus velocidades de caída son insignificantes. Una molécula típica de gas tiene un diámetro del orden de 0,5 nm. Tal diámetro produce una velocidad de sedimentación del orden de 10 cm por año. Debido a que este es un proceso lento y que pequeñas turbulencias mueven las moléculas de gas mucho más rápido, en cuestión de segundos, que la sedimentación, en años, la velocidad de sedimentación de los gases son importantes sólo en escalas de tiempo de miles de años. La deposición seca elimina los gases en las interfases aire – superficie y se produce cuando los gases, en contacto con una superficie, se adhieren a o reaccionan.

La precipitación elimina los gases solubles por lavado. Cuando una gota de agua cae a través del aire que contiene un gas soluble, este puede disolverse en la gota. A medida que la gota cae, más gas se disuelve si el aire está sobresaturado (es decir, si la presión parcial del gas es superior a su presión de vapor de saturación según lo determinado por la concentración del gas disuelto en el agua de lluvia dividido por su constante de la ley de Henry). Si el aire no está saturado, una parte del gas en la gota se evapora para mantener la saturación en la superficie de la gota.

3.10.1 Deposición seca

En la transferencia y deposición de contaminantes sobre la superficie del terreno están involucrados diversos procesos complejos. Así, Sehmel (1980) compiló algunos de los factores más importantes que se sabe influyen en las tasas de deposición seca. Las variables que se enumeran incluyen las propiedades del contaminante a depositarse (tamaño de partícula, forma y densidad, si procede; difusividad del gas, solubilidad, reactividad, etc), las características de la superficie (rugosidad, tipo de vegetación, masa y estado fisiológico, etc), y las variables atmosféricas (estabilidad, intensidad de la turbulencia, etc).

Una medida comúnmente utilizada para cuantificar la deposición es la velocidad de deposición, v_d , definida como:

$$v_d = \frac{F}{\chi_s} \quad (\text{Ec 3.227})$$

donde v_d es la velocidad de deposición (m/s),
 F es el flujo de deposición de contaminantes ($\text{g/m}^2\text{s}$), y
 χ_s es la concentración de contaminante (g/m^3).

Debido al número y la variabilidad de los factores que influyen en las tasas de deposición seca, las velocidades de deposición recogidas en la bibliografía exhiben una variabilidad considerable. Por ejemplo, las mediciones de velocidad de deposición de SO_2 publicadas por Sehmel (1980) varían en más de dos órdenes de magnitud mientras que los trabajos de Slinn et al. (1978) mostraron una variabilidad aún mayor. Dado que resulta poco práctico incluir en un modelo de deposición seca los efectos de todas las variables que influyen en el proceso, es posible (sobre la base de las propiedades atmosféricas, de la superficie y de los contaminantes) cuantificar muchos de los efectos más significativos. El módulo de deposición de CALPUFF proporciona tres métodos que reflejan, a diferentes niveles de detalle, el tratamiento de la deposición seca.

- Tratamiento completo para distintas velocidades de deposición espacial y temporal de gases/partículas predichas por un modelo de deposición basado en resistencias.
- Variaciones típicas de velocidades de deposición para cada contaminante a lo largo de 24 horas, especificadas por el usuario. Esta opción permite aplicar una dependencia temporal "típica" de deposición a lo largo del día, pero no incluye las dependencias espaciales.
- Ninguna deposición seca. Se incorpora en el modelo para eludir todos los cálculos de deposición seca. Esta opción permitirá una ejecución más rápida del modelo en ejecuciones simplificadas o para contaminantes que no experimenten una deposición significativa. Además, como es sabido esta opción dará lugar a los mayores valores de inmisión.

El usuario debe especificar, para cada contaminante, si la deposición seca es importante y el método específico utilizado para calcular sus velocidades de deposición.

Si se utiliza el modelo de deposición de resistencias, es necesario suministrar los valores de varios parámetros que describen las características del contaminante (solubilidad, reactividad, difusividad para los gases, etc) y que se utilizan en el cálculo de las resistencias. Además, se requieren varios parámetros de referencia y el estado de la vegetación en función de su irrigación (estresada, sin estrés o inactiva).

3.10.2 Modelo de resistencias

El modelo de deposición seca de CALPUFF se basa en el enfoque clásico que expresa la velocidad de deposición como la inversa de la suma de las resistencias a la deposición de cada

uno de los elementos del aire y el suelo que dificultan en dicho proceso para cada contaminante. A ello se unen los términos de sedimentación gravitacional para las partículas. Así, cada resistencia representa la oposición al transporte del contaminante a través de la atmósfera hasta la superficie. Slinn et al. (1978) describieron un modelo de resistencias de múltiples capas para la deposición seca. Como se ilustra en la Figura 3.14, en este modelo la atmósfera se puede dividir en cuatro capas para realizar el cálculo de las tasas de deposición seca. Además, para los gases se incluye una capa adicional (vegetación):

- (A) Capa superior. La capa superior es la región por encima de la altura de mezcla actual. Contiene el material contaminante, ya sea emitido directamente por chimeneas altas, o dispersado hacia arriba durante la actividad turbulenta previa. Debido a la baja tasa de mezcla turbulenta en esta capa, el contaminante estará esencialmente separado de la superficie. Por lo tanto, este material no está sujeto a la deposición seca hasta que no vuelva a entrar en la capa de mezcla.
- (B) Capa de mezcla. La altura de la capa de mezcla define la profundidad de la capa límite turbulenta. Esta capa (B) se extiende hacia abajo hasta una altura de referencia dentro de la capa superficial atmosférica. La mezcla de contaminantes está dominada por procesos turbulentos. Durante las condiciones de convección, los contaminantes en esta capa se mezclan uniforme y rápidamente abarcando la vertical de la capa. En consecuencia, la resistencia a la transferencia de contaminantes durante estas condiciones será muy pequeña en comparación con las resistencias en las capas (C), (D) y (E). Sin embargo, durante condiciones estables, la resistencia de esta capa puede ser importante (Wesely y Hicks, 1977). El tratamiento de la resistencia en la capa de mezcla se basa en la difusividad turbulenta media de la capa límite, parametrizada en términos de las variables de escala micrometeorológica.
- (C) Capa superficial. La capa superficial es una capa delgada (~10 m) próxima al suelo que se ajusta rápidamente a los cambios en las condiciones de la superficie. Debido a que sus flujos verticales de propiedades son casi constantes, también se denomina capa de flujo constante. La resistencia atmosférica, r_a , se utiliza para caracterizar la tasa de transferencia de contaminantes en esta capa (C).
- (D) Capa de deposición. Sobre superficies lisas, es una capa no turbulenta y muy delgada que se desarrolla justo por encima de la superficie. Con superficies rugosas esta capa cambia constantemente y es probable que presente turbulencia de forma intermitente. Por esta razón, Hicks (1982) llamó a esta capa "cuasilaminar". Los mecanismos de transferencia primaria a través de la capa de deposición laminar (no turbulenta) son la difusión molecular de los gases, y, para las partículas, la difusión browniana y el impacto inercial. Sin embargo, los elementos de rugosidad de la superficie pueden, a veces, penetrar en la capa de deposición, lo que proporciona una ruta alternativa para la transferencia de contaminantes (Hicks, 1982). En

condiciones de baja resistencia atmosférica, la resistencia de esta capa de deposición (D), r_d , puede ser la resistencia mayor y dominante que controla la velocidad de deposición de las partículas y de algunos gases solubles de alto peso molecular.

(E) La capa de vegetación. La vegetación es un sumidero importante para muchos gases contaminantes, solubles o reactivos. Después de pasar a través de los estomas, los contaminantes solubles se disuelven en las células del mesófilo húmedo en el interior de las hojas. Contaminantes reactivos también pueden interactuar con el exterior (cutícula) de las hojas. Debido a la respuesta de los estomas a factores externos tales como la humedad, la temperatura y la radiación solar, la resistencia en esta capa de vegetación (E) (la resistencia de la cubierta vegetal, r_c) puede mostrar una variabilidad diaria y estacional significativa. Un planteamiento alternativo de esta capa de vegetación, que resulta especialmente importante en áreas con escasa vegetación o sobre el agua, es la deposición directa en la superficie de tierra/agua; a pesar de que no incluye vegetación. Sin embargo, es conveniente incluir la resistencia de la superficie tierra/agua como un componente de r_c , ya que al igual que la resistencia de la vegetación ocurre en una capa por debajo de la capa de deposición laminar (D).

LAYER	RESISTANCE	TYPICAL DEPTH (M)	HEIGHT (M)
(A) Layer Aloft	C_u	10^4	h
(B) Atmospheric Boundary Layer (Mixed-Layer)	C_m	10^2-10^3	z_s
(C) Surface-Layer (Constant-Flux Layer)	r_a	10^1-10^2	z_d
(D) Deposition Layer (Quasi-Laminar Layer)	r_d	w/u^*	0
(E) Vegetation Layer	r_c		

*1 El material en la capa superior no está disponible para la deposición en la superficie hasta que sea arrastrado a la capa de mezcla.

*2 Resistencia de la capa de mezcla media incluida en la Ec 3.233.

Figura 3.14 Estructura de múltiples capas utilizada en el modelo de resistencia a la deposición seca (adaptado de Slinn et al. 1978)

En el modelo CALPUFF se realiza un seguimiento de la fracción de la masa de contaminantes por encima y por debajo de la capa de mezcla. En cualquier punto y cualquier instante de tiempo solamente puede depositarse en la superficie el material contaminante situado por debajo de la altura de mezcla. Sin embargo, como la altura de mezcla cambia en cada intervalo, la masa de contaminantes se transfiere en ese intervalo entre las capas (A) y (B). Por lo general, durante la mañana la capa límite crece en respuesta al calentamiento solar de la superficie terrestre, por lo que el material situado en la capa superior penetra la capa de mezcla y vuelve a estar disponible para la deposición seca en la superficie. Por la noche la actividad convectiva se detiene y el material por encima de la altura de la capa límite nocturna superficial estará aislado hasta el próximo período diurno.

Una vez que el puff se mezcla uniformemente a través de la capa límite, se puede utilizar un método de agotamiento de superficie (Scire et al., 1984b) para calcular la resistencia de la capa de mezcla (capa (B)). El flujo de contaminante, F , en la altura de referencia de la capa superficial puede escribirse como:

$$F = \frac{D_{b1}(\chi_m - \chi_s)}{(h - z_s)} = v_d \chi_s \quad (\text{Ec 3.228})$$

donde χ_m es la concentración de contaminante (g/m^3) dentro de la capa de mezcla,
 χ_s es la concentración de contaminante (g/m^3) en la parte superior de la capa superficial,
 h es la altura de capa de mezcla (m),
 z_s es la altura de la capa de superficial (m), y
 D_{b1} es la difusividad turbulenta media en la capa límite (m^2/s).

La difusividad turbulenta de la capa límite durante condiciones estables puede expresarse como (Brost y Wyngaard, 1978):

$$D_{b1} = k_1 u_* h \quad (\text{Ec 3.229})$$

y durante condiciones neutras o inestables como:

$$D_{b1} = \text{MAX}(k_1 u_* h; k_2 w_* h) \quad (\text{Ec 3.230})$$

donde k_1 y k_2 son constantes, con los valores por defecto de 0,01 y 0,1, respectivamente.

El flujo de deposición de cualquier contaminante viene definido por el producto de su velocidad de deposición, v_d , y su concentración, χ en cada capa. Pero en la capa superficial estos productos $v_d \chi_s$ deben ser escritos como $v'_d \chi_m$, donde v'_d es la velocidad de deposición efectiva que tiene en cuenta la transferencia de masa desde la capa límite. A partir de la Ec 3.228, v'_d es:

$$v'_d = \frac{D_{b1} v_d}{D_{b1} + v_d (h - z_s)} \quad (\text{Ec 3.231})$$

Cuando la mezcla turbulenta dentro de la capa (B) es rápida en comparación con la tasa de deposición en la superficie, la atmósfera reemplaza rápidamente el material que se deposita. En estas condiciones, D_{b1} es mucho más grande, y $v'_d \sim v_d$. Sin embargo, en otras condiciones la

velocidad de deposición puede estar limitada por la tasa de transferencia de contaminantes a través de la capa (B) hasta la proximidad de la superficie: en condiciones estables, D_{b1} puede ser pequeña en comparación con $v_d(h-z_s)$, y v'_d puede ser sustancialmente más pequeña que v_d . Finalmente, en las cercanías de un foco emisor, antes de que el penacho se haya extendido a través de la capa límite, se supone que $v'_d \sim v_d$, lo permite que se mantenga una distribución gaussiana vertical.

En realidad, son las resistencias en las capas por debajo de la altura de referencia de la capa superficial de flujo constante las que determinan v_d . Una vez que se determina v_d , se calcula v'_d a partir de la Ec 3.231. En cada intervalo, la masa del contaminante en el puff se ajusta teniendo en cuenta su eliminación por deposición seca:

$$Q_m(t + \Delta t) = Q_m(t) e^{-\frac{v'_d \Delta t}{\Delta s} \int_s^{s+\Delta s} g(s') ds'} \quad (\text{Ec 3.232})$$

donde Q_m son las masas (en g) de contaminante en el puff por debajo de la altura de mezcla (h), en los instantes t y $t+\Delta t$,
 Δt es el intervalo de tiempo (en s),
 $s, s+\Delta s$ son las posiciones del puff al principio y al final de la intervalo, y
 $g(s)$ es el término vertical de la ecuación gaussiana del puff. Para un puff uniformemente mezclado en la vertical, $g(s)=1/h$.

Es importante señalar que, en el caso de que el usuario especifique directamente los valores de las velocidades de deposición para cualquiera de los contaminantes, estos valores especificados corresponden a la velocidad de deposición efectiva, v'_d .

3.10.3 Resistencias para gases

A la altura de referencia de la capa superficial, z_s , la velocidad de deposición para los gases se expresa como la inversa de una suma de tres resistencias (Wesely y Hicks, 1977; Hicks, 1982):

$$v_d = \frac{1}{r_a + r_d + r_c} \quad (\text{Ec 3.233})$$

donde r_a es la resistencia atmosférica (s/m) a través de la capa superficial (C),
 r_d es la resistencia (s/m) de la capa de deposición (D), y
 r_c es la resistencia (s/m) de la cubierta vegetal (E).

3.10.3.1 Resistencia atmosférica de la capa superficial (C)

La resistencia atmosférica se obtiene por la integración de las relaciones del gradiente de flujo micrometeorológico, definido por (Wesely y Hicks, 1977) mediante diversos parámetros de escala:

$$r_a = \frac{1}{ku_*} \left[\ln \left(\frac{z_s}{z_0} \right) - \varphi_H \right] \quad (\text{Ec 3.234})$$

donde z_s es la altura de referencia de la capa superficial (m),
 z_0 es la longitud de rugosidad de la superficie (m),
 k es la constante de von Karman ($\sim 0,4$),
 u_* es la velocidad de fricción (m/s), y
 φ_H es el término de corrección por la estabilidad.

Los términos para la corrección de la estabilidad tienen en cuenta los efectos de la flotabilidad derivados de la difusividad turbulenta del contaminante. Se considera que la transferencia del contaminante es análoga a la del calor (Wesely y Hicks, 1977). El archivo de salida del modelo meteorológico, CALMET incluye un campo de longitudes de rugosidad superficial. A partir de los usos de suelo, el modelo CALMET proporciona un mapa de longitudes de rugosidad superficial; sin embargo, también es posible estimarla a partir del uso de suelo predominante de la tierra de cada celda o proporcionar medidas reales de dicha longitud. Sobre el agua, debido al efecto del viento en altura de las olas, la longitud de rugosidad superficial varía como una función de la velocidad del viento y se calcula internamente dentro de CALPUFF utilizando la parametrización de Hosker (1974):

$$z_0 = 2,0 \cdot 10^{-6} u^{2,5} \quad (\text{Ec 3.235})$$

donde u es la velocidad del viento (m/s) a 10 m, y z_0 es la longitud de rugosidad (en m).

3.10.3.2 Resistencia de la capa de deposición (D)

Debido a la importancia de la difusión molecular para el transporte a través de la capa de deposición laminar, la resistencia de esta capa de deposición de contaminantes gaseosos se define en términos del número de Schmidt (Sc):

$$r_d = \frac{d_1 S_c^{d_2}}{k u^*} \quad (\text{Ec 3.236})$$

donde S_c es el número de Schmidt (ν/D),
 ν es la viscosidad cinemática del aire ($0,15 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$),
 D es la difusividad molecular del contaminante (m^2/s),
 d_1, d_2, k son parámetros empíricos, y
 u^* es la velocidad de fricción (m/s).

Los estudios experimentales analizados por Hicks (1982) sugieren un rango de valores para las variables empíricas de esta ecuación de 1,6 a 16,7 para d_1/k y de 0,4 a 0,8 para d_2 . A partir de los resultados de Shepherd (1974) Slinn et al. (1978) y Hicks (1982) recomiendan valores intermedios de $d_1=2$ (o $d_1/k=5$), y $d_2=2/3$.

3.10.3.3 Resistencia de la cubierta vegetal (E)

La resistencia de los gases en la capa de vegetación se determina considerando tres vías alternativas o simultáneas (es decir, paralelas) para la absorción/reacción del contaminante dentro de la vegetación (o de la superficie):

- (1) Mesófila: Transferencia a través del poro estomático y su disolución o reacción en las células del mesófilo.
- (2) Cuticular: Reacción con o transferencia a través de la cutícula de la hoja.
- (3) Tierra/agua: Transferencia a la superficie tierra/agua.

En el modelo de resistencias, estas vías se tratan como tres resistencias en paralelo:

$$r_c = \frac{1}{\frac{LAI}{r_f} + \frac{LAI}{r_{cut}} + \frac{1}{r_g}} \quad (\text{Ec 3.237})$$

donde r_f es la resistencia mesófila interna del follaje (s/m), según la vía (1),
 r_{cut} es la resistencia cuticular (s/m), en la vía (2),
 r_g es la resistencia del suelo o de la superficie del agua (s/m), para la vía (3), y
 LAI es el índice de área foliar (proporción de área de superficie de hojas dividida por el área de la superficie del suelo). El LAI se especifica en el modelo como una función del uso de suelo.

La vía (1) es normalmente la más importante para la absorción de los contaminantes solubles en zonas con vegetación. La resistencia del follaje interno es la suma de dos componentes:

$$r_f = r_s + r_m \quad (\text{Ec 3.238})$$

donde r_s es la resistencia (s/m) al transporte a través del poro estomático, y
 r_m es la resistencia (s/m) a la disolución o reacción del contaminante en la células del mesófilo (parénquima esponjoso).

La apertura/cierre estomática es una respuesta a las necesidades de las plantas para la absorción de CO_2 y la prevención de la pérdida de agua a través de las hojas. Es por ello que la acción estomática impone un fuerte ciclo diario de la resistencia estomática, así como también de la velocidad de deposición debido a su importante papel en la determinación de las tasas de deposición de los contaminantes gaseosos solubles en agua, tales como el SO_2 .

La resistencia estomática se puede escribir como (O'Dell et al., 1977):

$$r_s = \frac{p}{bD} \quad (\text{Ec 3.239})$$

donde p es una constante estomática ($\approx 2,3 \times 10^{-8} \text{ m}^2$),
 b es la anchura de la apertura de los estomas (m), y
 D es la difusividad molecular del contaminante (m^2/s).

La anchura de la apertura de los estomas es una función de la intensidad de la radiación, la disponibilidad de humedad y la temperatura. La variación de b durante períodos en los cuales la vegetación es activa puede ser representada como (Pleim et al., 1984):

$$b = b_{\max} \frac{S}{S_{\max}} + b_{\min} \quad (\text{Ec 3.240})$$

donde b_{\max} es el ancho máximo (m) de la apertura de los estomas ($\sim 2,5 \times 10^{-6} \text{ m}$) (Padro et al., 1991),
 b_{\min} es el ancho mínimo (m) de la apertura de los estomas ($\sim 0,1 \times 10^{-6} \text{ m}$),
 S es la radiación solar (W/m^2) recibida en el suelo, y
 S_{\max} es el valor de radiación solar (W/m^2) al que se produce la apertura total de los estomas.

Sin embargo, durante los períodos de estrés hídrico la necesidad de evitar la pérdida de humedad se vuelve crítica, y los estomas se cierran. Se puede suponer que $b=b_{\min}$ para la vegetación seca en condiciones de estrés de humedad. Cuando la vegetación está inactiva, la resistencia del follaje interior se hace muy grande, esencialmente a través de la primera vía. Para reflejar este

distinto comportamiento de la vegetación en función de su estado, en CALPUFF el estado de la vegetación seca se especifica como uno de los siguientes estados: (a) activa y desestresada, (b) activa y estresada, o (c) inactiva.

El efecto de la temperatura sobre la actividad estomática ha sido analizado por Pleim et al. (1984). Los efectos más significativos se deben a las temperaturas extremas. Durante los períodos fríos ($T < 10\text{ }^{\circ}\text{C}$), la actividad metabólica disminuye y b es igual a b_{min} . Durante condiciones de clima cálido ($T > 35\text{ }^{\circ}\text{C}$), los estomas están totalmente abiertos ($b = b_{max}$) para permitir la refrigeración de la planta por evaporación, suponiendo que la vegetación está en el estado (a) menos activa y desestresada. Estos efectos de la temperatura proporcionan límites adicionales sobre el valor de r_s derivado de la Ec 3.239.

3.10.3.4 Resistencia mesofílica

La resistencia mesofílica depende de la solubilidad y la reactividad del contaminante. Se trata de un parámetro de entrada suministrado al modelo de deposición para cada especie gaseosa. O'Dell et al. (1977) han estimado la resistencia mesofílica de varios contaminantes. Para los contaminantes solubles, tales como HF, SO₂, NH₃ y Cl₂, $r_m \sim 0,0$. La resistencia mesofílica puede ser grande para contaminantes menos solubles, tales como NO₂ (~500 s/cm) y NO (9400 s/cm). Para otros contaminantes, r_m puede ser estimada en base a las propiedades de solubilidad y reactividad del contaminante.

3.10.3.5 Resistencia cuticular

La segunda vía para la deposición de los gases en la capa de vegetación es a través de la cutícula de la hoja. Esto incluye el potencial de paso directo a través de la cutícula o la reacción del contaminante en la superficie de la cutícula. Hicks (1982) señaló que las medidas de deposición de SO₂ en trigo (Fowler y Unsworth, 1979) mostraron una deposición de la cutícula significativa. Sin embargo, Hosker y Lindberg (1982) sugieren que el paso de gases a través de la cutícula es insignificante. Por lo tanto, es probable que la deposición cuticular esté controlada por la reactividad del contaminante. Pleim et al. (1984) definió r_{cut} como una función de la reactividad del contaminante en relación con los valores de referencia para el SO₂.

$$r_{cut} = \frac{A_{ref}}{A} r_{cut}(ref) \quad (\text{Ec 3.241})$$

donde A es el parámetro de reactividad para la deposición del gas,
 A_{ref} es la reactividad de referencia de SO₂ (~8,0), y
 r_{cut} es la resistencia de referencia de la cutícula (s/m), que para el SO₂, se ha determinado empíricamente.

Padro et al. (1991) sugirieron que $r_{cut}(ref)$ es de aproximadamente 30 s/cm. Otros valores de reactividad r_{cut} estimados para algunos contaminantes son: 8,0 (NO₂), 15,0 (O₃), 18,0 (HNO₃) y 4,0 (PAN, peroxiacetilnitrato).

3.10.3.6 Resistencia tierra/agua

La tercera vía modelada mediante la capa de vegetación (E) implica la deposición directa sobre la superficie del suelo o del agua. En las zonas moderada a fuertemente cubiertas por la vegetación, el follaje interno y la resistencia cuticular generalmente controlan la resistencia total de la cubierta vegetal. Sin embargo, en zonas con escasa vegetación, la deposición directa a la superficie puede ser una vía importante. A mayores, la deposición sobre el agua de contaminantes solubles puede ser muy rápida.

La resistencia, r_g , sobre superficies terrestres se puede expresar en relación con un valor de referencia para el SO₂ (Pleim et al., 1984.):

$$r_g = \frac{A_{ref}}{A} r_g(ref) \quad (Ec\ 3.242)$$

donde $r_g(ref)$ es la resistencia terrestre de referencia del SO₂ (~10 s/cm) (Padro et al., 1991).

Slinn et al. (1978) definió la resistencia en la fase líquida del contaminante depositado como una función de su solubilidad y reactividad. Sus resultados se pueden expresar como:

$$r_g = \frac{H}{\alpha_* d_3 u_*} \quad (Ec\ 3.243)$$

donde H es la constante de la ley de Henry, es decir, la relación entre la concentración de contaminante en el gas y en el líquido en equilibrio con este. Valor empleados en el modelo CALPUFF son: ($H \sim 4 \times 10^{-2}$ (SO₂), 4×10^{-7} (H₂O₂), 8×10^{-8} (HNO₃), 2×10^0 (O₃), $3,5 \times 10^0$ (NO₂), 1×10^{-2} (PAN), y 4×10^{-6} (HCHO)),
 α_* es el factor de disociación del contaminante, que incrementa su solubilidad en la fase acuosa ($\alpha_* \sim 10^3$ para SO₂, ~ 1 para el CO₂), y
 d_3 es una constante ($\sim 4,8 \times 10^{-4}$).

3.11 Dispersión del puff durante períodos de calmas

Como ya se ha indicado, el planteamiento general gaussiano no funciona correctamente durante los períodos de calma, en los que las velocidades de viento tan bajas provocan al fin un incremento desmesurado e irreal de la dispersión gaussiana. Es por ello que el modelo CALPUFF incorpora un tratamiento diferenciado de la dispersión de sus puffs sometidos a condiciones de calmas.

Los períodos de calma son aquellos en los que la velocidad de transporte del puff es menor que un umbral de velocidad definido por el usuario (por defecto =0,5 m/s). Cuando se usan datos meteorológicos adaptados al modelo ISC, los preprocesadores meteorológicos empleados asocian a los períodos de calmas una velocidad de viento de 0,0 m/s y, para las horas sin calma,

se elige una velocidad mínima de 1,0 m/s. Por lo tanto, en los períodos de calmas todos los puffs permanecerán inmóviles. Sin embargo, los vientos generados por CALMET pueden incorporar las velocidades de transporte menores de 1 m/s, por lo que el umbral de velocidad predeterminado para definir un período de calmas se utiliza para identificar estos períodos en los que las distancias de transporte son mínimas, pero no cero, y aplicar el tratamiento diferenciado correspondiente.

CALPUFF no requiere ningún módulo especial para simular periodos de calmas, pero sí son necesarios varios ajustes en los algoritmos normales. Estos ajustes modifican la forma en que son liberados los puffs, dirigen su ascenso gradual, simulan los efectos en las cercanías del foco emisor y cambian el tamaño del puff en cada cálculo de la inmisión. De hecho, estos ajustes son consistentes con el modelo conceptual en el cual las nuevas emisiones se elevan desde una fuente y se dispersan como una función del tiempo debido a las fluctuaciones del viento alrededor de una fluctuación media igual cero, mientras que las emisiones ya existentes se estancan y se dispersan siguiendo el mismo principio. También los métodos para la sobreelevación del penacho durante las calmas son las mismas descritas anteriormente.

Los ajustes para los puffs liberados durante las calmas incluyen:

1. Se liberan puffs deformados con una longitud de deformación igual a cero, es decir, sin deformación.
2. Toda la masa del período de calmas (horas) se coloca en un único puff.
3. La distancia hasta la sobreelevación final se fija en cero, es decir, no hay aumento gradual.
4. No se incluyen los efectos de flujo descendente tras obstáculos.
5. El crecimiento de σ_y y σ_z se basa en el tiempo transcurrido (no la distancia recorrida) hasta el cálculo de la inmisión, independientemente de la opción de dispersión seleccionada.
6. Se imponen valores mínimos de las propiedades de turbulencia σ_v y σ_w .

Los ajustes realizados a los puffs liberados antes de encontrarse con un período de calmas son:

1. La distancia hasta alcanzar la sobreelevación final se fija en cero, es decir, sin aumento gradual.
2. El crecimiento de σ_y y σ_z se basa en el tiempo transcurrido (no la distancia recorrida) hasta el cálculo de la inmisión, independientemente de la opción de dispersión seleccionada.
3. Se imponen valores mínimos de las propiedades de turbulencia σ_v y σ_w .

Cuando se utilizan los datos meteorológicos tipo ISC (medidas en una estación) y la velocidad media es cero, el valor de u implícito también será cero y la categoría de estabilidad PGT será el único parámetro disponible para la estimación de la turbulencia en tales períodos. Cuando se utilizan los resultados procedentes del modelo CALMET, u y w pueden estar disponibles, incluso cuando la velocidad de transporte del puff sea menor que el umbral, de modo que pueda ser

estimada la turbulencia. Sin embargo, esto puede no ser un procedimiento robusto si los datos de viento utilizados por CALMET incluyen calmas reales. En condiciones de calmas, las estimaciones de σ_v y σ_w pueden ser indeterminadas. CALPUFF se basa en estas velocidades de crecimiento del puff (usando las fórmulas de dispersión dependientes del tiempo) durante los períodos que se consideran calmas, por lo que esta es una cuestión de importancia práctica. Los períodos de calmas pueden estar asociados tanto con capas límite muy estables como convectivas, con propiedades de turbulencia claramente diferentes.

Teniendo en cuenta estas consideraciones, CALPUFF permite el uso de velocidades de turbulencia mínimas dependientes de la estabilidad. Estas velocidades se utilizan siempre que las obtenidas de otro modo (medida o prevista) sean inferiores a los mínimos establecidos. Para aplicaciones convencionales, los valores predeterminados se basan en la intensidad efectiva de la turbulencia implícita en las curvas PGT (Briggs 1973). El factor principal en estas curvas se comporta como si de una intensidad de turbulencia se tratase, es decir, como la relación entre la velocidad de la turbulencia y la velocidad media. Debido a que estas curvas se han aplicado históricamente para velocidades de viento de 1,0 m/s y mayores, se estima que la velocidad de turbulencia mínima σ_w correspondiente a I_z , considera una velocidad de 1,0 m/s. La velocidad de turbulencia lateral podría ser estimada de la misma manera, utilizando los valores I_y , pero esto implicaría ignorar la influencia del rozamiento por el viento en condiciones de calma: Hanna et al. (1986) sugieren un mínimo apropiado, promedio horario, de $\sigma_v \approx 0,5$ m/s. Por lo tanto, el mínimo predeterminado será $\sigma_v = 0,5$ m/s para todas las categorías de estabilidad.

Finalmente, cuando se aplique CALPUFF con medidas detalladas de viento y turbulencia, se debe tener especial cuidado para asegurarse de que las mediciones válidas no sean sustituidas por estos valores mínimos de turbulencia. En estos casos, la velocidad mínima medida se establecerá como el umbral de calmas y la turbulencia mínima individual debe reflejar las características de los sensores de viento y del sistema de recogida de datos utilizado.

4 La Central Térmica As Pontes y su entorno

La generación de energía en Centrales Térmicas que utilizan carbón como combustible originan una serie de residuos gaseosos y sólidos que han de ser evacuados al exterior, de modo que la magnitud y naturaleza de estas emisiones dependen fundamentalmente de las características de los combustibles, diseño de las instalaciones y el funcionamiento de los sistemas de depuración adoptados.

En lo que respecta a la emisión de contaminantes atmosféricos, la combustión de este tipo de carbón genera, entre otras, tres especies o grupos de contaminantes primarios:

- Dióxido de azufre, SO_2 , resultado de la combustión completa del azufre presente en el Lignito.
- Óxidos de Nitrógeno, NO_x , como consecuencia de la reacción del N_2 y O_2 a elevadas temperaturas en el hogar de la caldera y, en menor medida, del contenido de N del carbón.
- Partículas sólidas, resultado de las cenizas que se producen en la combustión del carbón en calderas.

Aun aplicando las medidas de control adecuadas y manteniendo los límites de emisión prescritos por la legislación, los efluentes pueden contener cantidades significativas de compuestos contaminantes, por lo que para mantener los criterios de calidad de aire admisibles a nivel de suelo, de modo que se garantice que los gases contaminantes que puedan alcanzar el suelo lo hagan en magnitudes inocuas para la salud del hombre y de los seres vivos, se recurre como acción final a la capacidad dispersante de la atmósfera mediante el uso de chimeneas; de este modo la C.T. de As Pontes cuenta con una chimenea de 356,5 m de altura sobre el suelo.

Desde el momento de su emisión, los gases inician un proceso de interacción con la atmósfera, interviniendo fenómenos de difusión y transporte simultáneamente con transformaciones físicas y químicas, de modo que, de forma variable, los compuestos contaminantes emitidos pueden volver a la superficie terrestre originando así episodios de inmisión.

Todo este proceso es muy complejo, dependiendo de diversos factores entre los cuales podemos señalar los siguientes:

- Cantidades y propiedades tanto físicas como químicas de los gases emitidos.
- Características del foco emisor.
- Condiciones meteorológicas.
- Topografía y naturaleza del terreno.

En la localidad de As Pontes de García Rodríguez, en el Noroeste de Galicia, España, Endesa S.A. cuenta con una Central Térmica de 1400 MWe de potencia instalada. Esta potencia se distribuye en cuatro grupos de 350 MWe (ENDESA, 2011). A partir del año 1993 se inició un primer proceso de transformación de la Central Térmica, con objeto de utilizar, con la máxima eficiencia, mezclas de lignito local (con hasta un 2% de azufre) con carbones subbituminosos de importación, caracterizados estos últimos por sus bajos contenidos en azufre. Posteriormente, en los años 2005 y 2006 se inició una segunda transformación, por la que se incrementaría paulatinamente el uso de carbones subbituminosos, hasta que en el año 2008 dejase de consumirse lignito local. Así, en los años 2005 y 2006, en tres de los grupos de potencia se siguió quemando la mezcla en proporción 70:30, en masa; y en uno, ya transformado, el 100 % de subbituminoso (Dios et al., 2013).

El territorio analizado alrededor de la CT As Pontes se sitúa al norte de Galicia, y comprende las provincias de A Coruña y Lugo (Figura 4.1). La zona de estudio está centrada en la chimenea de As Pontes, y comprende la citada depresión de As Pontes y sus contornos, de modo que se pueden considerar como límites geográficos aproximados los siguientes: al norte limita con el océano Atlántico, al oeste, con la latitud de Arteixo e incluye las rías de Ares, Ferrol y Betanzos; al este, con la latitud de Foz y Meira; mientras que el límite sur se sitúa en la latitud de Lugo. La delimitación de esta área obedece a la consideración de establecer un dominio de 99 km², centrado en la chimenea, que permitiese abarcar no solo el entorno más próximo a la chimenea directamente afectado por sus emisiones (que no se extiende más allá de los 30 km desde la chimenea; (Souto, 1993), sino también las extensiones limítrofes, a fin de reproducir mejor con los modelos meteorológicos y de dispersión atmosférica posibles efectos de las condiciones de contorno sobre la zona de mayor interés. Además, los vértices del dominio se hicieron coincidir con los nodos más próximos del modelo WRF (Rodríguez et al., 2012) utilizado en algunas de las simulaciones para el suministro de las condiciones meteorológicas alrededor y dentro del dominio de simulación del modelo CALMET.

4.1 Orografía del entorno

El área de estudio considerada se caracteriza por un relieve muy accidentado (Saavedra, 2010), con importantes contrastes (Figura 4.1): el núcleo central estaría formado por la depresión de As Pontes, en dirección oeste-este, por la que se extiende el valle del río Eume, desde su nacimiento en la provincia de Lugo, en la vertiente oeste de la sierra de O Xistral, hasta su desembocadura formando la ría de Pontedeume. Hacia la mitad de su recorrido, el río Eume se abre paso entre dos conjuntos montañosos, la sierra da Faladoira, al norte, y el cordal de Montouto y la sierra da Loba, al sur, que se prolongan en dirección norte-sur formando parte de la Dorsal Gallega, con altitudes no superiores a los 750-850 metros. Esta depresión o llanura interior de pequeño tamaño

se encuentra rodeada por el relieve suave de la costa atlántica al oeste y por la costa cantábrica al norte, de relieve más abrupto (sierra da Capelada), mientras que al nordeste se sitúan las sierras septentrionales, destacando la sierra del Xistral. Hacia el sur el relieve se hace más suave y uniforme, en forma de llanuras elevadas en la altiplanicie lucense (A Terra Chá), con alturas entre 400 y 600 metros, y las tierras bajas de la comarca de Betanzos, formadas por los valles del río Mandeo y el Mendo, con altitudes inferiores a los 200 metros. Por tanto, se trata de un terreno complejo, donde las sierras graníticas alternan con depresiones y valles fluviales.

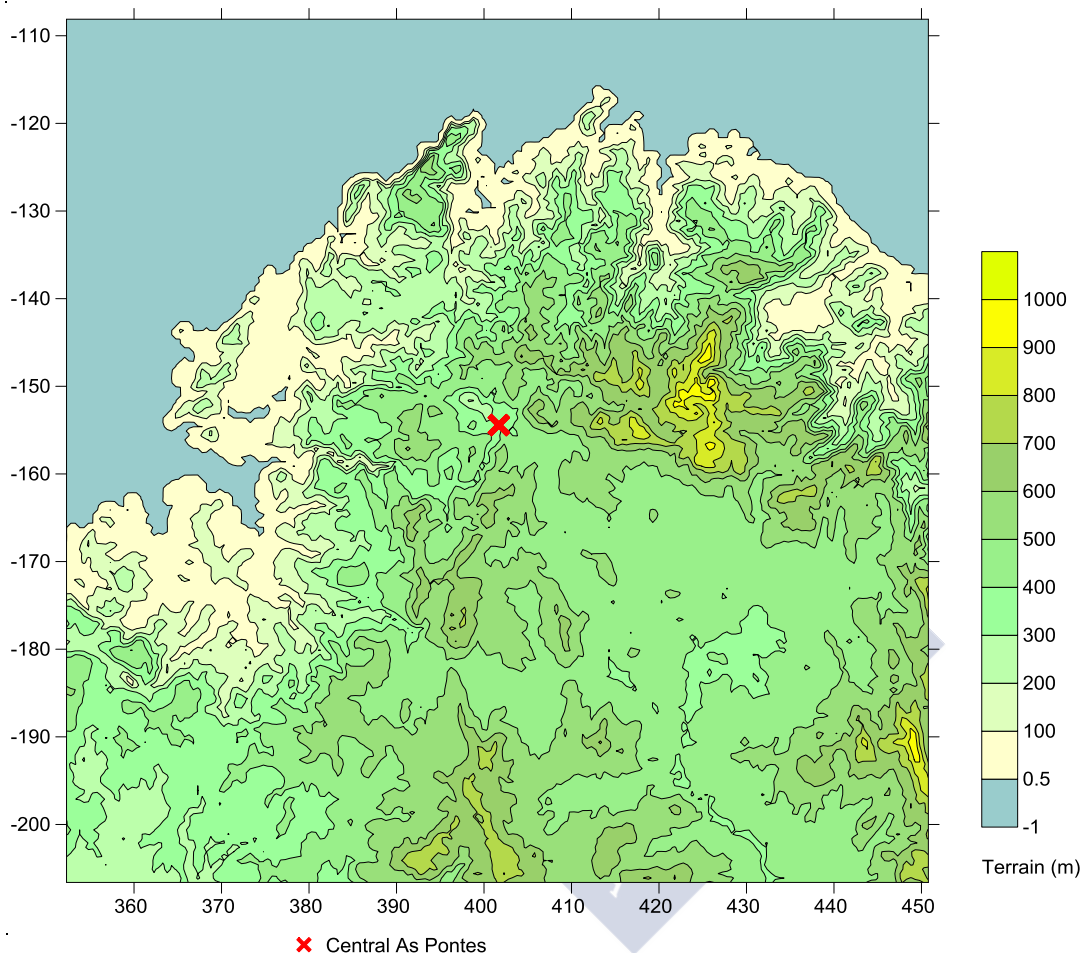


Figura 4.1 Situación geográfica y orografía del área de estudio.

4.2 Climatología

La climatología del área de estudio (Figura 4.2) es muy variada (Saavedra, 2010), ya que debido a su complejidad orográfica confluyen en la zona varios tipos climáticos, aunque biogeográficamente pertenezca a la región eurosiberiana de clima atlántico, como la mayor parte de Galicia. De oeste a este, podrían citarse los siguientes tipos de clima: clima oceánico, característico del litoral noroccidental y septentrional; clima suboceánico litoral con influencia del interior, clima de montaña, en las sierras de la Dorsal Gallega; clima suboceánico con cierto grado de continentalización (Precedo y Sancho, 2001).

A causa de esta gran variabilidad climática, resulta más sencillo para caracterizar el clima de la zona recurrir a los valores típicos de algunos parámetros climáticos clásicos, como la temperatura y la precipitación.

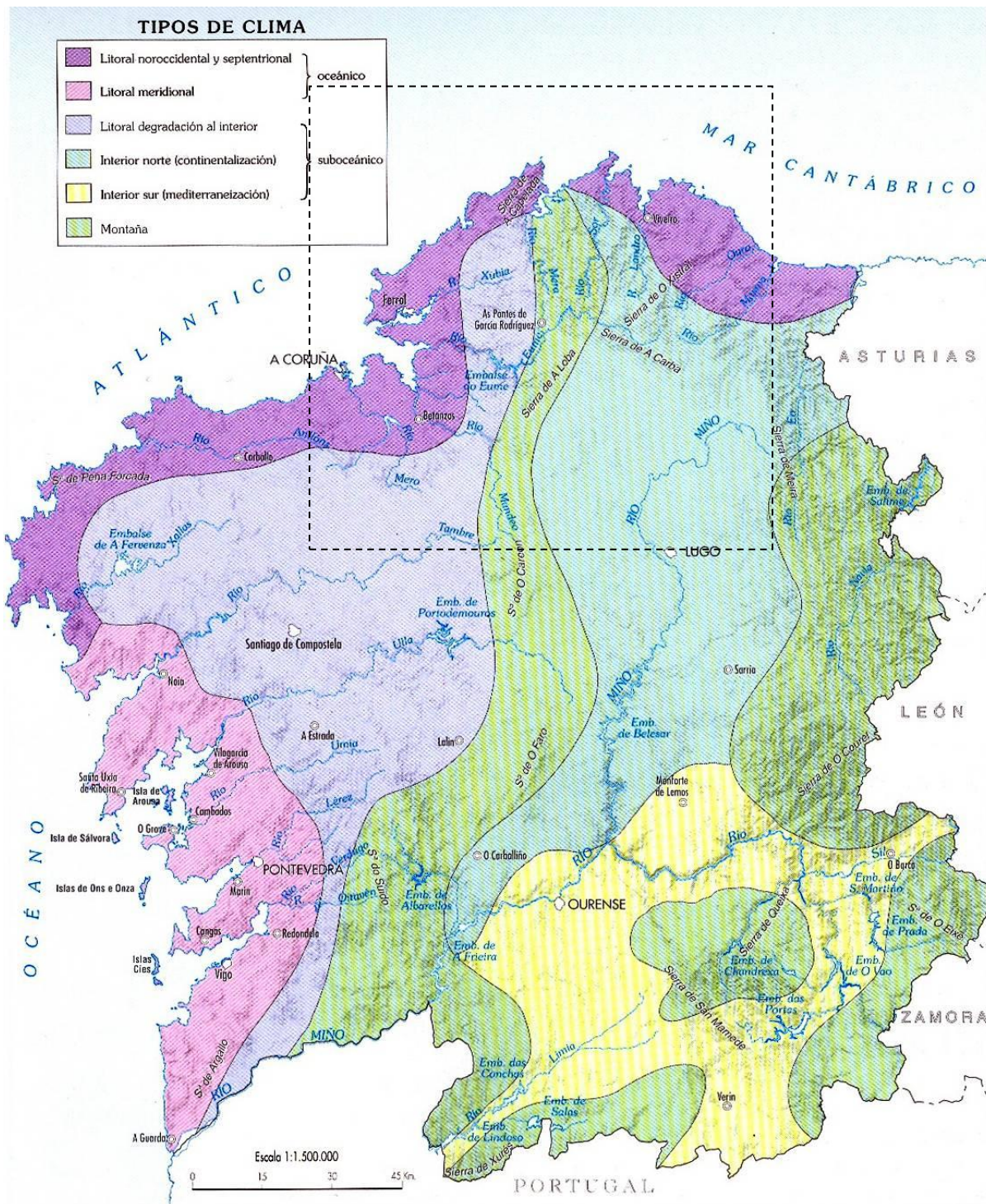


Figura 4.2 Tipos climáticos existentes en Galicia (Precedo y Sancho, 2001). En líneas discontinuas la zona aproximada del estudio.

Las temperaturas de verano en el norte de la provincia de A Coruña se caracterizan por presentar unas isotermas de temperatura media de agosto entre 17 °C y 19 °C, en un gradiente descendente desde la costa occidental hacia el interior. Son valores de temperatura media

inferiores a los del sur de Galicia, con isotermas entre 20 °C y 21 °C, y sólo superan a las zonas montañosas del este y sureste gallego (Figura 4.3).

La pluviometría en el entorno de As Pontes se sitúa entre los 1600-1800 mm anuales, con disminución progresiva hacia occidente y oriente (1000 a 1200 mm en el golfo Ártabro y en las estribaciones orientales de la Serra do Xistral). Las isoyetas de verano oscilan entre 100 y 160 mm de lluvia en la zona, entre los valores más elevados del noroeste peninsular (Figura 4.4 y Figura 4.5) (Precedo y Sancho 2001).

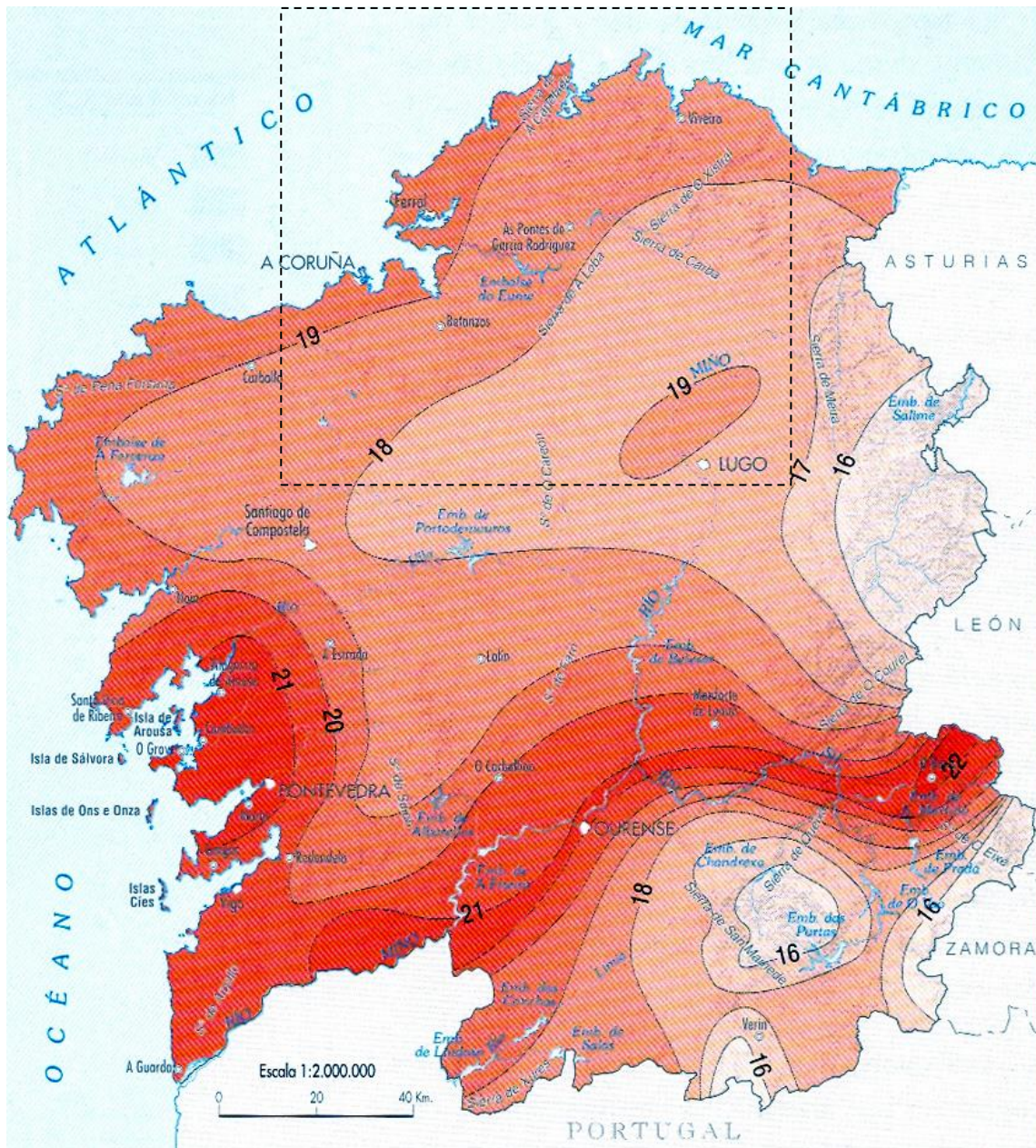


Figura 4.3 Isotermas de agosto para Galicia (°C), (Precedo y Sancho, 2001). En líneas discontinuas la zona aproximada del estudio.

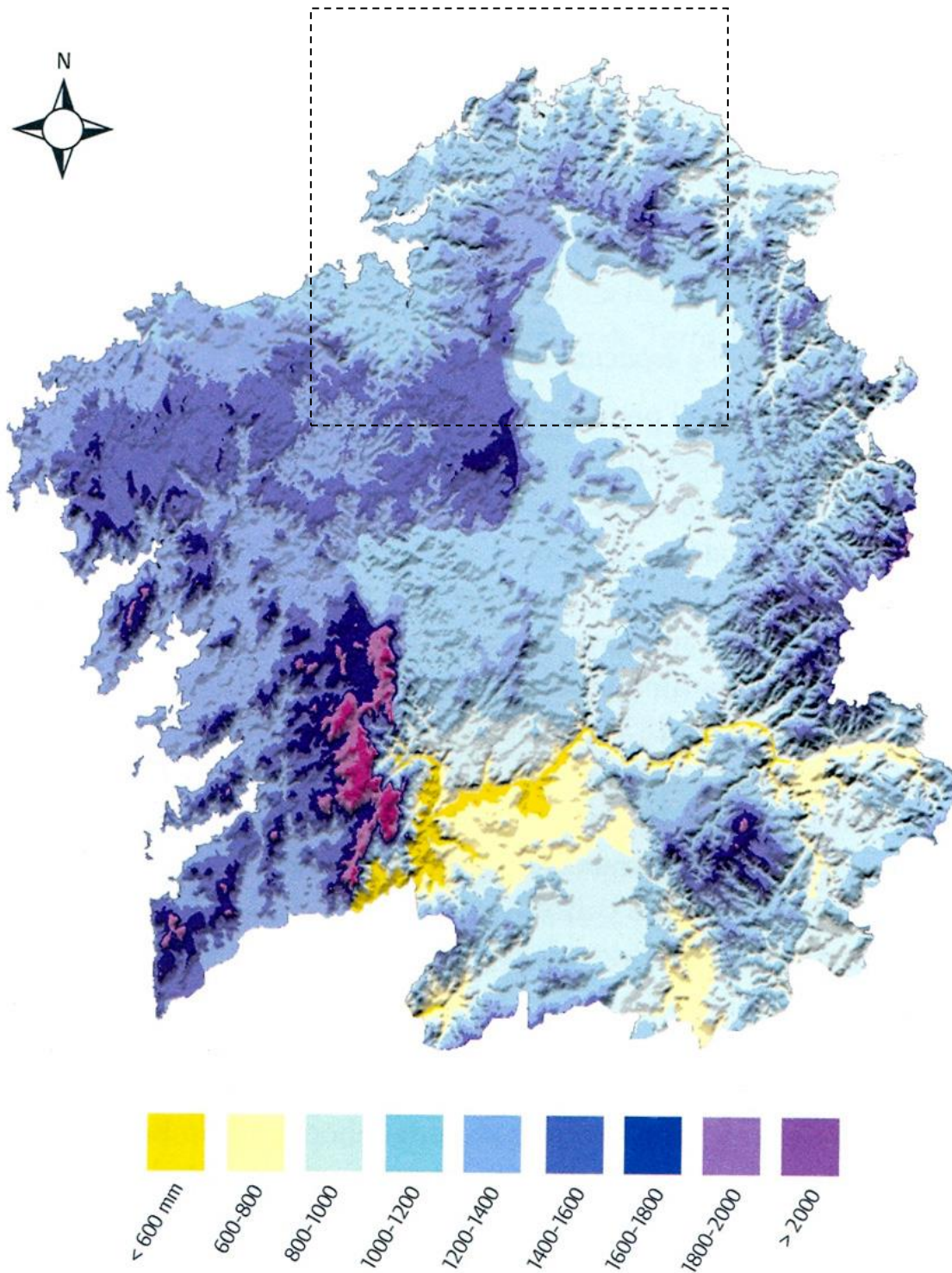


Figura 4.4 Mapa de precipitación anual acumulada (mm) en Galicia (Naranjo y Pérez Muñuzuri 2006). En líneas discontinuas la zona aproximada del estudio.

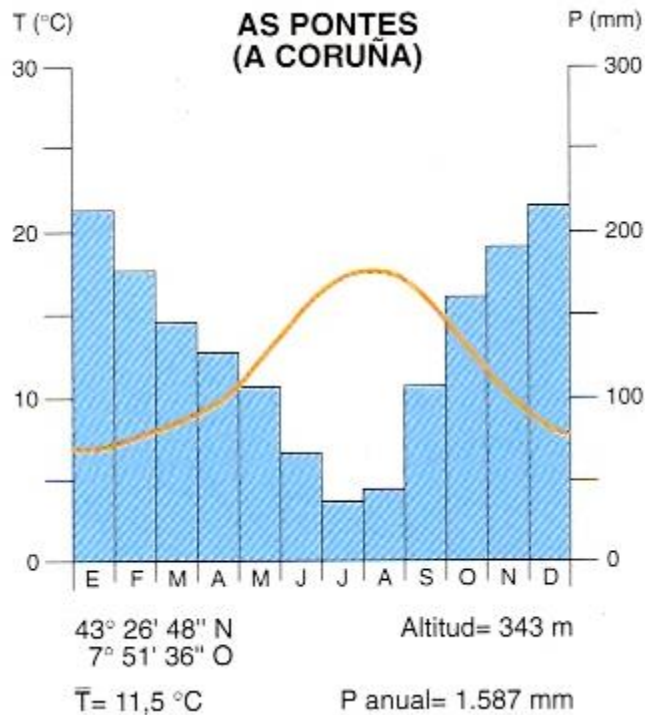


Figura 4.5. Gráfico termopluviométrico para la villa de As Pontes (Precedo y Sancho, 2001).

4.3 C.T. As Pontes: Medidas de emisión, meteorológicas y de calidad del aire

Dentro del dominio de estudio definido, la Central Térmica As Pontes dispone, para efectuar tanto el control de las emisiones a la atmósfera como de las inmisiones en su entorno, de un Sistema de Seguimiento y Control de la Calidad del Aire (Figura 4.6), formado por los siguientes elementos:

- Sistema de Control de Emisiones.
- Red de Vigilancia y Control de la Calidad del Aire.
- Estaciones Meteorológicas.
- Unidad Central de adquisición de datos y gestión de la información.

4.3.1 Sistemas de Control de Emisiones

Los gases generados por combustión del carbón, una vez que han pasado por los precipitadores electrostáticos, son impulsados por ventiladores de tiro inducido a través de la chimenea de 356,5 m. Internamente, la chimenea dispone de 4 conductos verticales metálicos de 6,34 m de diámetro (liners), uno para cada Grupo de la Central Térmica (Figura 4.5). Esta disposición presenta la ventaja de que se puede determinar independientemente la calidad de los gases emitidos por cada Grupo en operación.

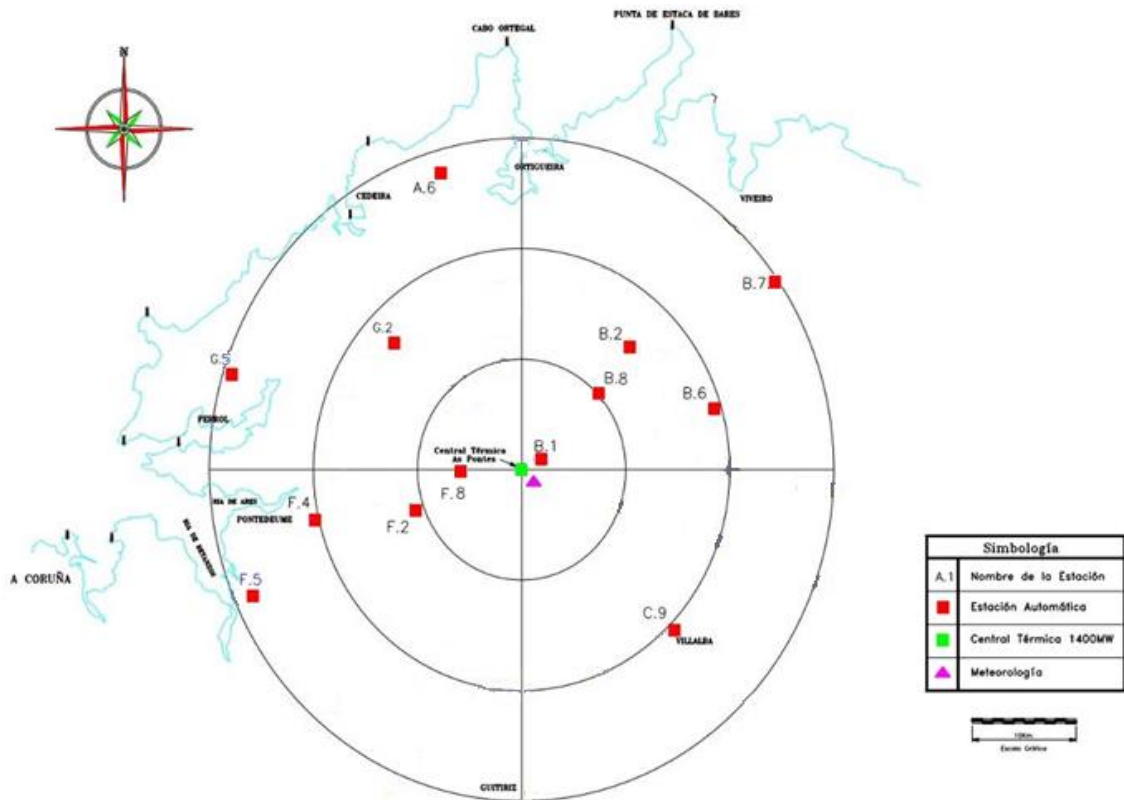


Figura 4.6 Mapa del entorno de la C.T. As Pontes con la distribución de las estaciones del Sistema de Seguimiento y Control de la Calidad del Aire en el período 2005-2006.

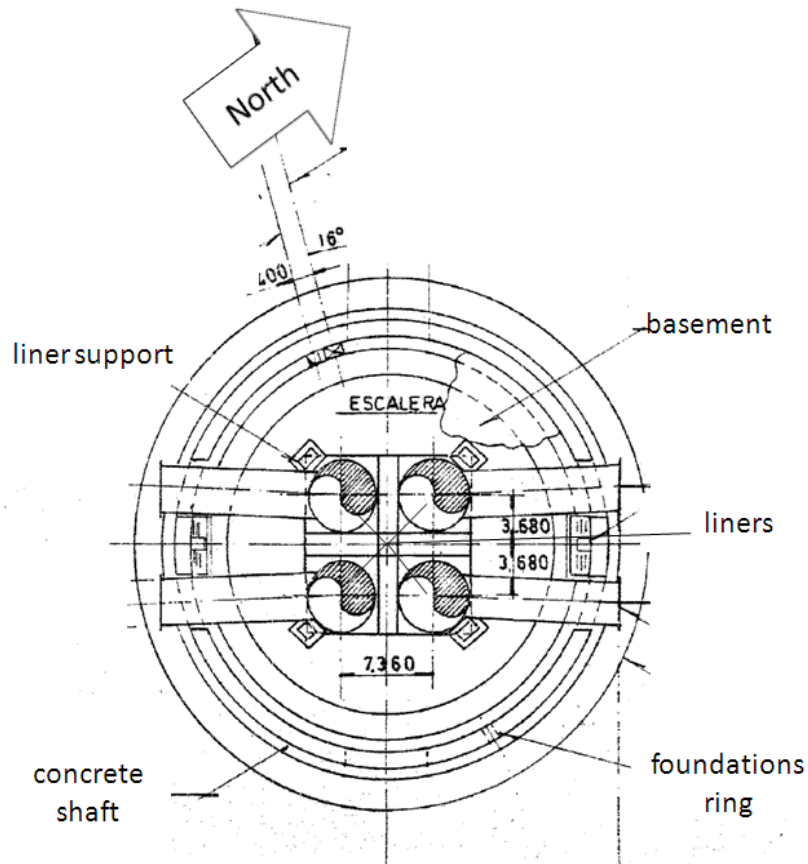


Figura 4.5 Vista planta de la chimenea de la Central Térmica As Pontes, con los cuatro liners en su interior. Medidas en mm y grados (°).

Con el objeto de determinar la composición de los gases emitidos, la C.T. As Pontes dispone de un Sistema de Control de Emisiones (De Castro, 2001) dotado de analizadores en continuo de dióxido de azufre, óxidos de nitrógeno, partículas y oxígeno para cada uno de sus cuatro grupos. El Sistema, situado en la planta 215 de chimenea (a 215 m de altura), muy alejado de perturbaciones de flujo de gases y, por tanto, en una zona óptima de medida, proporciona medidas que transmite en tiempo real a las Salas de Control de la Central Térmica, permitiendo tener la información necesaria para mantener en todo momento la calidad de los gases dentro de los límites de emisión establecidos por la legislación vigente.

Es de destacar, asimismo, que se pueden realizar operaciones de calibración de los analizadores de dióxido de azufre y óxidos de nitrógeno desde el ordenador central de adquisición de datos, situado en el Laboratorio, mediante la introducción de aire seco y gases patrón, sin necesidad de desplazarse físicamente a la ubicación de los equipos.

4.3.2 Red de Vigilancia de la Calidad del Aire

La Central Térmica As Pontes dispone de una Red de Vigilancia de la Calidad del Aire con objeto de evaluar en todo momento la inmisión existente. En el año 2005 estaba en su entorno constituida por 13 estaciones automáticas, dotadas de analizadores de dióxido de azufre y de óxidos de nitrógeno (Figura 4.6), y que se encuentran distribuidas alrededor de la Central abarcando un radio de 30 km.

Los principales objetivos de esta red de vigilancia son: vigilar el grado de cumplimiento de la legislación vigente en cuanto a niveles de contaminación atmosférica admisibles a nivel de suelo, alertar de episodios puntuales de inmisión que pueden aparecer en condiciones meteorológicas adversas para el proceso de difusión del penacho y proporcionar información básica para los programas de Control Suplementario de Calidad Atmosférica implantados en la Central Térmica. En este trabajo de investigación, los datos de estas estaciones se emplearán en la validación del modelo de dispersión atmosférica CALPUFF.



Figura 4.6 Estación automática Condomiñas (B-7)



Figura 4.7 Estación de Inmisión y meteorológica de Curuxeiras (B-6)

Algunas de esas estaciones (Figura 4.9) disponen de instrumentación adicional, como medidores continuos de partículas en suspensión, analizadores de ozono, sensores de temperatura ambiente, de velocidad de viento y de dirección de viento.

Las estaciones automáticas (Tabla 4.1), además de estar equipadas con un registro de información a nivel local donde se almacenan datos horarios, transmite información en tiempo real, vía radio, al ordenador central de Adquisición y Gestión de la información situado en la Central Térmica.

Los organismos públicos competentes tienen acceso en tiempo real mediante comunicación telefónica a estos datos de la Red de Vigilancia y Control de la Calidad del Aire.

Por otra parte, el ordenador central está conectado a los Sistemas de Predicción de Inmisión implantados en la Central Térmica (Bermúdez et al., 2002; Souto et al., 2009), concebidos como herramientas de ayuda a la operación en la toma de decisiones tendientes a conseguir reducciones de las emisiones atmosféricas en condiciones meteorológicas desfavorables.

Del mismo modo que en el Sistema de Control de Emisiones, existe la posibilidad de efectuar comprobaciones del funcionamiento de los equipos desde el ordenador central, mediante la introducción de gases patrón, obteniéndose además información adicional sobre el estado de las estaciones con indicaciones sobre el encendido de los equipos, cortes de tensión eléctrica e incluso de apertura de puerta de entrada.

Tabla 4.1 Lista de estaciones de inmisión de la Red de Vigilancia de la Calidad de Aire de la C.T. de As Pontes.

Estaciones de inmisión			
A-6	Capelada	F-2	Fraga Redonda
B-1	Magdalena	F-4	Taboada
B-2	Louseiras	F-5	Bemantes
B-6	Curuxeiras	F-8	Maciñeira
B-7	Condomiñas	G-2	Vilanova
B-8	Marraxón	G5	Cabana
C-9	Mourence		

4.3.3 Estación Meteorológica Central

Con objeto de mantener la calidad del aire en su entorno, hasta el año 2008 la Central Térmica As Pontes realizaba actuaciones encaminadas a la reducción de las emisiones de dióxido de azufre

en circunstancias especiales, mediante la disminución de la potencia total de la central o la utilización de mezclas de carbones con bajo contenido en azufre.

Puesto que los cambios en las condiciones de operación, que implican una reducción de las emisiones de dióxido de azufre, no se pueden realizar de modo inmediato y, ya que los episodios de inmisión se caracterizan por cambios bruscos y pronunciados de las concentraciones ambientales medidas, es imprescindible disponer de herramientas de predicción (i.e., SAGA, Souto et al., 2009) que permitan evitar la superación de los límites legales de inmisión.

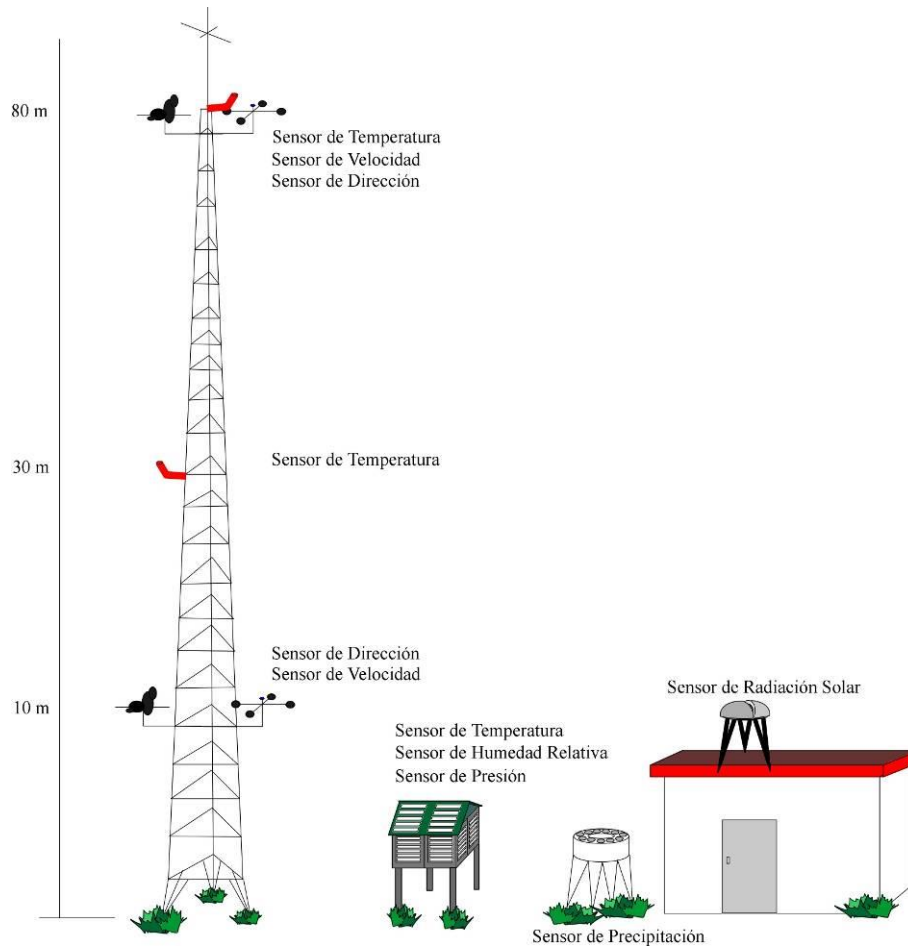


Figura 4.8 Esquema representativo de los diferentes sensores de la Estación Meteorológica Central " A Mourela" y su disposición en altura.

Para determinar la eficacia de una herramienta de predicción basada en modelos meteorológicos y de dispersión atmosférica, como SAGA (Souto et al., 2009), se necesita disponer de información meteorológica de la capa límite atmosférica, en superficie y en altura; y, preferiblemente, con medida y almacenamiento en tiempo real. Además, se debe tener en cuenta que la trayectoria de un penacho en las proximidades del foco emisor está muy influida por la velocidad de salida y la temperatura de emisión de los gases, pero que a una distancia mayor de 2 ó 3 km del foco emisor, su desplazamiento tanto vertical como horizontal está altamente gobernado por las condiciones meteorológicas existentes, que son fundamentales en los procesos de dispersión de los

contaminantes atmosféricos. También estos datos son de interés tanto para la aplicación como para la validación del modelo meteorológico CALMET evaluado en este trabajo de investigación.

En el caso de la Central Térmica As Pontes se dispone de una Estación Meteorológica Central situada en “A Mourela”, que se haya integrada en el Sistema de Seguimiento y Control de la Calidad del Aire, juntamente con la Red de Vigilancia de la Calidad del Aire y el Sistema de Control de Emisiones. La Estación Meteorológica “A Mourela”, está dotada de una estación convencional, con un mástil de 80 m de altura y sensores a distintos niveles, como refleja la Figura 4.8. La estación se encuentra situada a 1500 m de distancia de la chimenea de la Central Térmica y a 1200 m de la torre de refrigeración más próxima, sobre una planicie en un lugar despejado de obstáculos que interfieran en las medidas meteorológicas. Toda la información se procesa y envía al Ordenador Central del Sistema de Seguimiento y Control de la Calidad del Aire en tiempo real.

A mayores, en el mismo recinto se encuentra situada una estación pluviométrica manual dotada de pluviómetro, termohidrógrafo, termómetro y heliógrafo, de menor interés a efectos de la dispersión de los contaminantes.

4.3.4 Unidad Central de Adquisición de Datos y Gestión de la Información

Toda la información procedente de los sistemas de control de emisiones, de inmisiones y meteorología se recibe y gestiona en un Ordenador Central, con periféricos en el Laboratorio, la oficina de Medio Ambiente y las Salas de Control de la Central Térmica. Esta información constituye una parte fundamental de la Base de Datos de Medio Ambiente de la C.T. As Pontes.

4.3.5 Datos meteorológicos en el entorno del foco emisor

A pesar de la existencia de varias estaciones meteorológicas integradas en el Sistema de Seguimiento y Control de la Calidad del Aire de la CT As Pontes, la importancia de las condiciones meteorológicas en la dispersión de los contaminantes hace aconsejable el aprovechamiento de los datos meteorológicos relevantes de que se disponga en el entorno del foco emisor. Es por ello que, además de los datos de dichas estaciones, se ha considerado conveniente el uso de datos de estaciones en superficie y, también, de radiosondeos meteorológicos operacionales disponibles en el dominio de estudio.

4.3.5.1 Estaciones meteorológicas en superficie adicionales

En el caso de las estaciones meteorológicas en superficie, por su disponibilidad, amplitud y fiabilidad se ha considerado el uso de las estaciones meteorológicas gestionadas por MeteoGalicia, Xunta de Galicia (Salsón et al., 2003). Este servicio tuvo su origen en el año 2000,

fruto de un convenio de investigación entre la Consejería de Medio Ambiente y la Universidad de Santiago de Compostela (Pérez-Muñuzuri y Souto, 2000).

MeteoGalicia tiene como objetivos principales la realización de la predicción meteorológica de Galicia y la explotación y mantenimiento de la red de observación meteorológica y climatológica de la Xunta de Galicia (MeteoGalicia, 2010). Con el objetivo de mejorar y optimizar su funcionamiento, MeteoGalicia se estructura en cuatro áreas principales: predicción operativa, predicción numérica, visualización y climatología. Del mismo modo, MeteoGalicia desarrolla modelos meteorológicos, oceanográficos y de oleaje de muy alta resolución para mejorar sus predicciones meteorológicas.



Figura 4.9 Ubicación de todas las estaciones de la red meteorológica de MeteoGalicia (MeteoGalicia, 2010).

La red de observación de MeteoGalicia cuenta con 102 estaciones automáticas, 6 manuales, 2 móviles, y 56 agrometeorológicas (Figura 4.9). Las estaciones automáticas cuentan entre sus sensores con anemómetros, veletas, evaporímetros Gauge, piranómetros, pluviómetros, sonda de presión, previstorm, sonda de temperatura y humedad superficiales, de temperatura y humedad del suelo, y visibilímetro. Además de los parámetros meteorológicos en superficie convencionales, entre los parámetros registrados están las temperaturas media, la máxima y la mínima del aire a

1,55 m; las humedades relativas media, máxima y mínima; las temperaturas de rocío, de suelo y aire a 10 cm; horas de frío y de sol, a 2 y 4 m; irradiación global diaria, insolación, velocidad de viento, racha, dirección de racha, dirección de viento predominante, lluvia, balance hídrico, evapotranspiración de referencia, presión barométrica, presión reducida al nivel del mar, campo eléctrico terrestre y horas de luz.

Para este trabajo de investigación se seleccionaron las estaciones meteorológicas automáticas de MeteoGalicia ubicadas dentro del dominio de simulación definido para los modelos CALMET y CALPUFF, como se describe en el Capítulo 5.

4.3.5.2 Radiosondeos meteorológicos operacionales

Si bien la disponibilidad de medidas meteorológicas en superficie y en continuo proporciona una valiosa información para la validación de los modelos meteorológicos, no hay que olvidar que la dispersión de los contaminantes atmosféricos, incluso dentro de la capa límite atmosférica, se desarrolla a cierta altura sobre el suelo; que, en el caso del penacho de la CT As Pontes, alcanza valores considerables por la altura de su chimenea y la sobreelevación que experimenta (Souto, 1993; Souto et al., 2001). Es por ello que la disponibilidad de medidas meteorológicas en altura, aún esporádicas, resulta especialmente interesante para la validación de los modelos meteorológicos aplicados a la dispersión de contaminantes atmosféricos.

Una forma de medir las condiciones meteorológicas en altura in-situ es el uso de radiosondeos meteorológicos. Un radiosondeo meteorológico consiste en el lanzamiento de una sonda con varios sensores impulsada por un globo de latex (habitualmente, lleno de helio de aproximadamente 1,2 m de diámetro). Este puede ascender hasta unos 25 km de altitud, dependiendo entre otros factores de la presión atmosférica, durante 1 hora u hora y media. Al concluir el ascenso y alcanzar presiones más bajas, el globo explota, y regresa nuevamente a tierra auxiliándose de un paracaídas.

Durante su recorrido, los sensores miden y la sonda transmite a intervalos de tiempo inferiores a 1 min. datos de temperatura, humedad relativa, presión y posición, y de ésta se deduce la velocidad y dirección de viento a lo largo de su recorrido. Esto proporciona una estructura vertical de la atmósfera muy detallada y, en particular, de la capa límite atmosférica. A través de una antena de radiofrecuencia y un receptor GPS se reciben los datos de la sonda en tierra, que se almacenan íntegramente para su posterior análisis y explotación. Este recorrido de la sonda puede ser muy variable, con un desplazamiento horizontal total que puede ser superior a los 100 km.

Así, en el año 2006 MeteoGalicia operaba un radiosondeo meteorológico desde la Escuela Técnica Superior de Ingeniería, en Santiago de Compostela, con lanzamientos diarios a las 6Z y

18Z. A pesar de la distancia existente entre el punto de lanzamiento en Santiago de Compostela y la CT As Pontes, dada la capacidad de la sonda para desplazarse horizontalmente, y a la mayor homogeneidad de la atmósfera por encima del estrato superficial, estas medidas pueden resultar de interés para su uso en los modelos meteorológicos aplicados en este trabajo.

Por su parte, la actual Agencia Estatal de Meteorología, AEMET, creada en el año 2008 (BOE, 2008) y sucesora directa en España del Instituto Nacional de Meteorología, INM, opera de forma rutinaria un radiosondeo meteorológico desde A Coruña, recibe y procesa datos satelitales geoestacionarios y cuenta con una red de 90 observatorios, 260 estaciones automáticas de observación, 8 estaciones de radiosondeo (7 en tierra y 1 en el buque Esperanza del Mar), 15 radares meteorológicos, 20 equipos de detección de rayos y una red de 4 500 estaciones pluviométricas y termoplumiométricas.

Una de las estaciones de radiosondeos de AEMET opera desde A Coruña, realizando lanzamientos dos veces al día, a las 0Z y 12Z. Al igual que en el caso del radiosondeo de MeteoGalicia, la distancia con la CT As Pontes no supone una gran limitación para su aplicación en este trabajo, si bien el hecho de que el lanzamiento se realice sobre la línea de costa y en plena zona urbana desvirtúa la validez de los datos en los niveles bajos. De todos modos, de estos lanzamientos AEMET solo almacena datos sobre niveles tipo de presión (de los cuales, habitualmente solo 2 ó 3 se encuentran dentro de la capa límite atmosférica), que también son los únicos suministrados de manera rutinaria a la Organización Meteorológica Mundial (OMM). Esta Organización, a su vez, los pone a disposición de la comunidad científica internacional (WMO, 2010) a través de algunos servicios meteorológicos nacionales instituciones públicas. A pesar de la limitación que supone disponer de datos a tan solo 2-3 alturas, el hecho de que se trate de lanzamientos rutinarios disponibles durante todos los períodos de estudio en este trabajo ofrece también una valiosa información para la aplicación y validación de los modelos meteorológicos empleados.

5 Sistema CALMET/CALPUFF para validación

Una vez estudiadas en este trabajo las distintas opciones de configuración de los modelos CALMET y CALPUFF, tanto en lo que refiere a los datos de entrada que pueden manejar como a los diferentes métodos y parametrizaciones empíricas que incorporan, este capítulo se orienta fundamentalmente a la configuración y validación de ambos modelos sobre diversos períodos en los que se detectaron valores apreciables de inmisión de SO₂ alrededor de la C.T. As Pontes. Además, se incluye una posible aplicación del Sistema CALMET/CALPUFF en un entorno radicalmente diferente, incluyendo la validación del modelo CALMET sobre el mismo.

En lo que se refiere a la validación del modelo CALPUFF en el entorno de la C.T. As Pontes, la elección de este contaminante como trazador se debe, principalmente, a la preponderancia de dicho foco en la emisión de SO₂ en los años 2005 y 2006, frente al resto de emisiones del mismo contaminante catalogadas en los inventarios europeos EMEP (Vestreng et al., 2005; Vestreng et al., 2006).

Un segundo aspecto a considerar en esta elección es la posible transformación química del SO₂ dentro del dominio de estudio que, a efectos de su dispersión y limitado por el diseño de la red de inmisión existente, alcanza los 30 km de radio alrededor de la C.T. As Pontes.

El SO₂ es un gas incoloro con un olor irritante característico, que puede ser perceptible por el ser humano a diferentes niveles, dependiendo de la sensibilidad individual, pero generalmente se percibe entre 0,3-1,4 ppm y es fácilmente notable a 3 ppm (Baxter, 2000; Wellburn, 1994). El SO₂ no es inflamable, ni explosivo y es relativamente estable, si bien es altamente soluble en agua (85 gL⁻¹; Gangolli, 1999). Su densidad es más del doble que la del aire ambiental (2,62 gL⁻¹ a 25°C y 1 atm; Lide, 2003).

El dióxido de azufre es el contaminante atmosférico antropogénico predominante de entre los que contienen azufre (Seinfeld y Pandis, 2012). Su presencia en el aire continental de fondo varía en un rango de 20 ppt a 1 ppb, mientras que en el aire contaminado de la capa límite sobre el mar alcanza niveles entre 20 y 50 ppt. En zonas urbanas puede alcanzar valores de varios cientos de ppb.

El tiempo de vida del SO₂ en la atmósfera, basado en la reacción con el radical OH y en los niveles atmosféricos típicos de OH, es de aproximadamente una semana. El SO₂ es uno de los gases que se elimina de forma efectiva de la atmósfera por deposición seca: su velocidad de deposición seca es, aproximadamente, de 1 cm·s⁻¹ y su tiempo de vida por deposición seca, a 1 km de altura en la capa límite, es de aproximadamente 1 día. En presencia de nubes, la eliminación de SO₂ se puede incrementar.

En el caso de estudio seleccionado, teniendo en cuenta que el dominio en el que se mide la inmisión de SO₂ está limitado a los 30 km alrededor de la C.T. As Pontes (lo que supone tiempos de transporte inferiores a 1 hora) y que se han seleccionado períodos de estudio sin precipitaciones (ya que incrementarían la eliminación del SO₂, reduciendo su inmisión y su posible aplicación como trazador), en el peor de los casos la eliminación del SO₂ en estas condiciones sería inferior al 12% (Seinfeld y Pandis, 2012), si bien la baja contaminación de la atmósfera en dicho dominio dará lugar a transformaciones mucho menores (Méndez et al., 2003). En consecuencia, en la aplicación del modelo CALPUFF a la dispersión del SO₂ procedente de dicho foco, a efectos de su transformación química se consideró que dicho contaminante era inerte. A efectos de su deposición seca, se adoptaron los valores por defecto de velocidad de deposición incluidos en el modelo CALPUFF.

5.1 Validación de modelos atmosféricos

Existe un número elevado de posibles configuraciones a elegir por el usuario para obtener un modelo adecuado a las características de la región y los fenómenos a estudiar. Por lo cual no existe una configuración universal que sirva para cualquier región y cualquier proceso, por consiguiente, el modelo antes de su aplicación debe ser validado, contrastándolo con medidas para conocer el grado de veracidad de la predicción propuesta y obtener así una configuración adecuada del modelo (Hernández-Ceballos, 2010).

Por otra parte, la importancia de la validación de los modelos meteorológicos es destacada por Ames et al. (2002), quien comenta que las consideraciones tomadas en la configuración del modelo CALMET podrían influir fuertemente en los resultados de los cálculos de dispersión del modelo CALPUFF.

En consecuencia, la validación de un modelo de dispersión atmosférica, como CALPUFF, requiere necesariamente la validación del modelo meteorológico CALMET que le proporciona las condiciones meteorológicas en cada entorno concreto, considerando distintas configuraciones y datos meteorológicos de entrada al modelo CALMET.

5.2 Dominio de simulación

Pocos lugares reúnen, de conjunto, las peculiaridades de Galicia para la modelización de la calidad de aire. El territorio gallego cuenta con numerosas elevaciones, valles y ríos que, si bien no son de gran magnitud, por su elevado número y continua sinuosidad se le considera un terreno complejo (Souto, 1993). Adicionalmente es una zona costera afectada por el Océano Atlántico y el Mar Cantábrico, con numerosas bahías y rías. Como se ha indicado, en esta región se encuentra ubicada la Central Térmica de Carbón As Pontes, que cuenta con una chimenea singular de gran

altura, 356,5 m, y toda una Red Seguimiento y Control de la Calidad Atmosférica a sus alrededores que proporciona medidas meteorológicas y de inmisión en tiempo real desde hace varias décadas.

Como consecuencia, el dominio en el que se plantea la validación del sistema CALMET/CALPUFF resulta único, por cuanto a la complejidad del entorno del mismo (terreno complejo, entorno costero, meteorología cambiante) se une la existencia de un foco emisor predominante a gran altura cuyo penacho llega, incluso, a superar durante el día la altura de la capa de mezcla. Si bien en otras ocasiones puede verse atrapado por ella de manera abrupta, provocando la detección local de sus emisiones a nivel del suelo. En este sentido, la dispersión del penacho sobre el dominio elegido resulta especialmente difícil de modelizar, como se ha demostrado en anteriores experimentos (Davakis et al., 1998; Souto et al., 2000).

Estas características singulares han llevado a la necesidad de adoptar varias configuraciones para el dominio de simulación de los modelos CALMET y CALPUFF, tomando también en consideración las mallas anidadas del modelo WRF que proporciona datos de entrada al modelo CALMET.

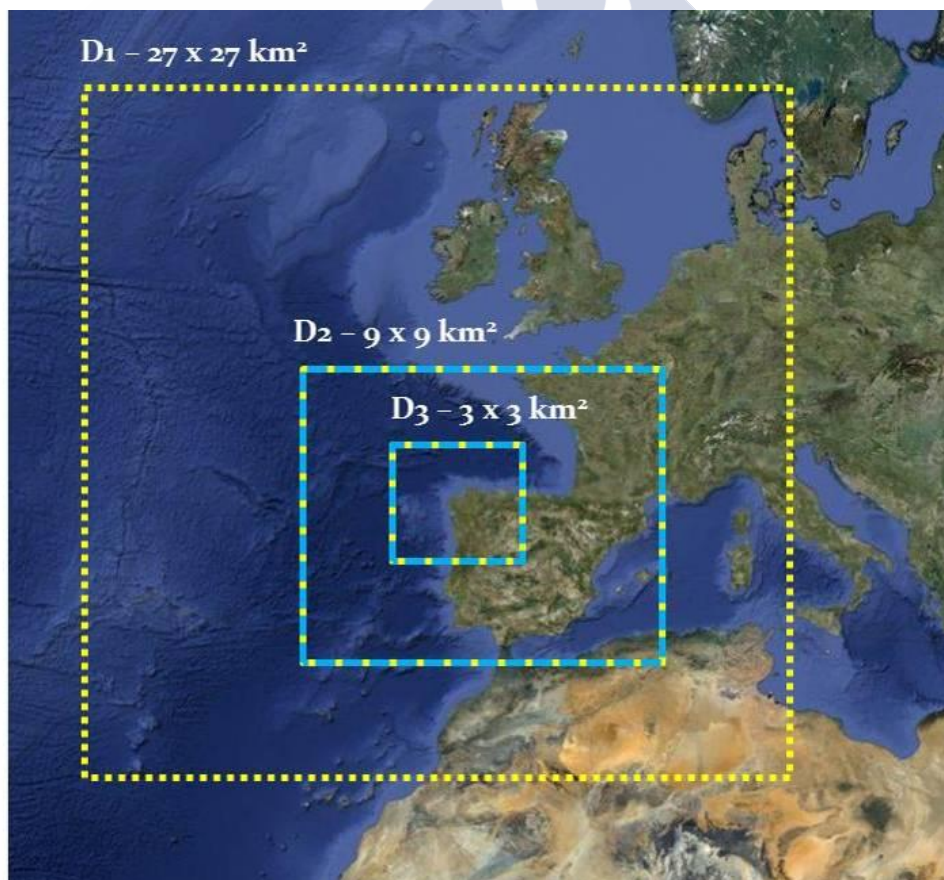


Figura 5.1 Dominios de simulación anidados del modelo WRF, de diferente resolución horizontal: D1 (27 km), D2 (9 km) y D3 (3 km).

En el caso del modelo WRF, la Figura 5.1 muestra las tres mallas anidadas de 27, 9 y 3 km de resolución horizontal que se aplican, siendo evaluados también los resultados de la malla de 3 km junto con los del modelo CALMET.

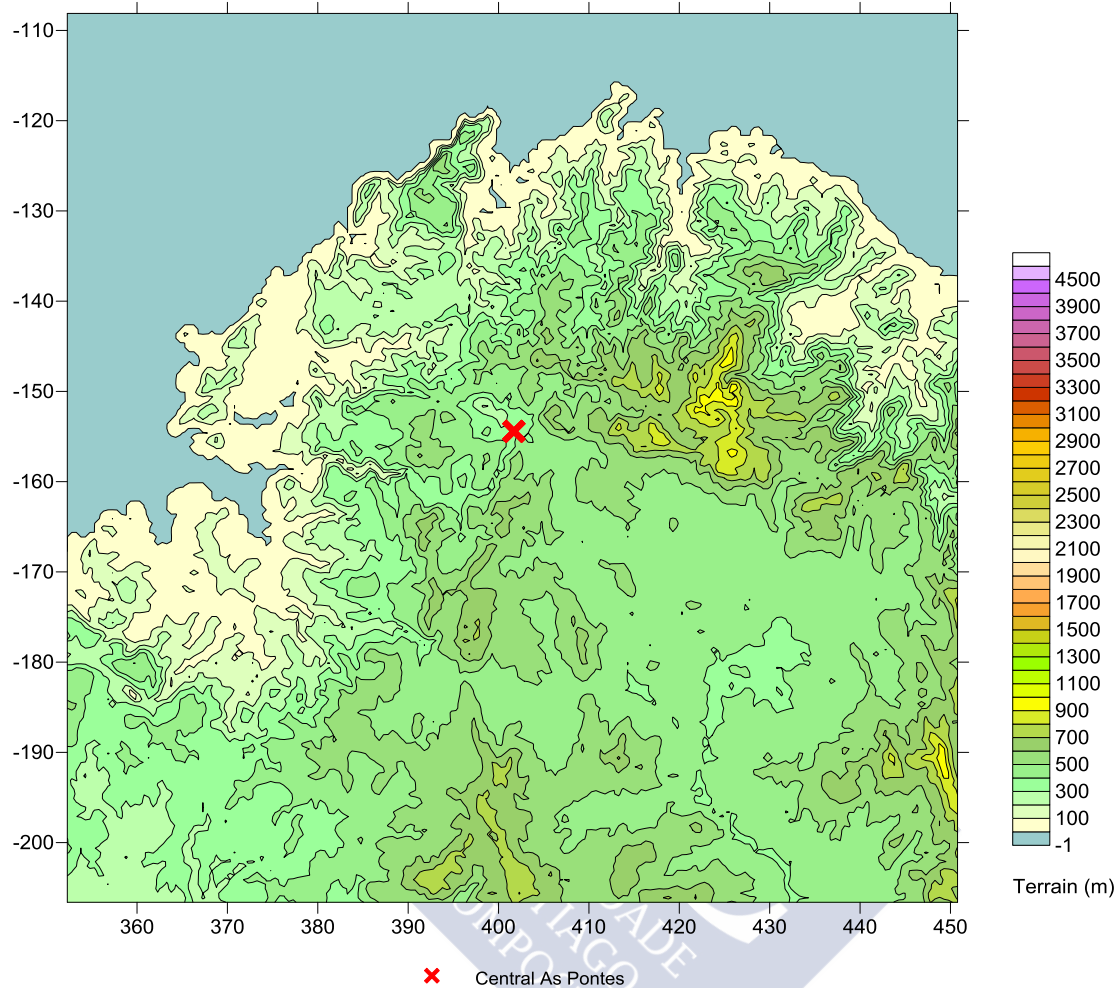


Figura 5.2 Dominio de simulación de los modelos CALMET y CALPUFF, mostrando su topografía y la ubicación del foco emisor considerado, la C.T. As Pontes.

Los modelos CALMET y CALPUFF abarcan un dominio más reducido, de 99x99 km² de extensión, prácticamente centrado en la C.T. As Pontes, según se muestra en la Figura 5.2. Haciendo coincidir los nodos de la malla de 3 km del dominio WRF con nodos de las mallas CALMET y CALPUFF. El hecho de que ambos dominios coincidan puede suponer un problema en los bordes del dominio CALPUFF, si bien la validación de este modelo se ceñirá a un radio de 30 km alrededor de la C.T. As Pontes, por lo que sus resultados más allá de dicha distancia no resultan de interés. Sobre este dominio se han ensayado distintas resoluciones horizontales del modelo CALMET, como se describe en el apartado 5.4.

5.3 Configuración de modelos

El ensayo y validación del sistema CALMET/CALPUFF en el entorno de la C.T. As Pontes y en relación con sus emisiones de SO₂ se ha llevado a cabo mediante la aplicación de diferentes configuraciones en los modelos CALMET y CALPUFF. Estas configuraciones se han basado no tanto en la selección de diferentes métodos de ajuste y parametrizaciones empíricas opcionales en ambos modelos, como en la adopción de soluciones adaptadas a los datos disponibles, las características del foco emisor y de su entorno. Teniendo en cuenta que se trata de ensayar el sistema CALMET/CALPUFF sobre un foco industrial real, a fin de aprovechar los resultados alcanzados en aplicaciones a escala real.

Así, para los métodos de ajuste y parametrizaciones empíricas se adoptaron por defecto aquellas recomendadas por sus desarrolladores, atendiendo también a las características físicas del entorno de simulación, ya descritas. Por otra parte, se dio más importancia a la selección y uso de datos meteorológicos que permitiesen obtener los mejores resultados con el modelo CALMET, y a la mejor representación del foco emisor en el modelo CALPUFF. Estas configuraciones se describen en el apartado correspondiente de cada modelo.

5.4 Modelo CALMET para validación

Para llevar a cabo la validación se han tenido en cuenta los parámetros más importantes que determinan a los modelos (velocidad de viento, dirección de viento, temperatura, altura de capa de mezcla, etc). Posteriormente, se ha aplicado una metodología de validación, aplicable también a la intercomparación de modelos (Souto et al., 2000), adaptada al estado del arte en la validación de modelos meteorológicos y de dispersión (Chang y Hanna, 2005).

Para obtener el modelo meteorológico, se utilizó CALMET Versión 5.8 y se tomaron datos topográficos del sistema SRTM3 (Shuttle Radar Topography Mission, (≈90 m, 3 arc-sec), datos de usos de suelo de la proyección Eurasia, normalizada para Europa, de la base de datos GLCC Database (V2.0) (Global Land Cover Characterization, ≈1000 m, 30 arc-sec). Aun cuando la evaluación de la dispersión calculada con el modelo CALPUFF abarcará 30 km de radio desde la C.T. As Pontes, se definió un dominio de simulación meteorológica más extenso, abarcando 99x99 km² y centrado en la C.T. As Pontes, con un doble objetivo:

- a) Mejorar la validación de los resultados del modelo CALMET, al disponer sobre ese dominio de las medidas meteorológicas en superficie y, también en altura.
- b) Eliminar cualquier efecto de borde en la simulación de la dispersión del penacho con el modelo CALPUFF, al situar el contorno del dominio de simulación suficientemente alejado del radio de 30 km señalado.

Como se ha indicado, se siguieron las opciones de parametrizaciones y ajuste del modelo CALMET habitualmente recomendadas por la EPA y los desarrolladores (Fox, T. 2009; Lakes Environmental, 2011), y que se resumen en la Tabla 5.1.

Tabla 5.1 Opciones aplicadas en la configuración del modelo CALMET sobre el entorno de la C.T. As Pontes.

Efectos aplicados	Modulo de diagnostico de viento Ajuste del número de Froude Efecto de los flujos en pendiente Extrapolación de valores de calma Promedio espacial de altura de capa de mezcla Promedio espacial de temperatura
Extrapolación de medidas a las capas superiores	Teoría de la similitud excepto en la capa 1.
Máximo radio de influencia en superficie	1 km
Máximo radio de influencia en altura	1 km
Máximo radio de influencia sobre el agua	1 km
Mínimo radio de influencia para la interpolación	0.1 km
Radio de influencia de los efectos del terreno	6 km
Distancia de ponderación de las medidas de superficie	1 km
Distancia de ponderación de las medidas en altura	1 km
Máxima divergencia aceptable	$5 \cdot 10^{-6}$
Numero de iteraciones en la minimización de la divergencia	50
Número crítico de Froude	1
Profundidad para el cálculo del gradiente	200 m
Constante de la ecuación mecánica neutra	1.41
Constante de la ecuación de altura de capa de mezcla convectiva	0.15
Constante de la ecuación de altura de capa de mezcla estable	2400
Constante de la ecuación de altura de capa de mezcla sobre el agua	0.16
Valor absoluto del parámetro de Coriolis	$1 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$
Radio de búsqueda máximo promedio	1 celda
Angulo medio del cono a barlovento.	30 °
Método de cálculo de la mezcla convectiva	Batchvarova y Gryning
Umbral del flujo de sobreelevación requerido para mantener el crecimiento de la altura de mezcla convectiva sobre agua	0.05 Wm^{-3}
Método para el cálculo de tasa de disminución sobre el agua	Pronóstico de tasa de disminución y ΔT
Tasa de disminución de la temperatura mínima potencial	0.001 Km^{-1}
Espesor de la capa convectiva sobre la altura de mezcla	200 m
Altura de mezcla mínima terrestre	50 m
Altura de mezcla máxima terrestre	3000 m
Altura de mezcla mínima sobre el agua	50 m
Altura de mezcla máxima sobre el agua	3000 m
Método empleado para los flujos superficiales sobre agua	Parámetro COARE sin parametrización de la onda
Tipo de interpolación	R^{-1}
Radio de influencia	500 m
Número máximo de estaciones para la interpolación	5
Tasa del gradiente de la temperatura debajo de la capa de mezcla sobre el agua	$-0.0098 \text{ K}\cdot\text{m}^{-1}$
Tasa del gradiente de la temperatura sobre la capa de mezcla sobre el agua	$-0.0045 \text{ K}\cdot\text{m}^{-1}$

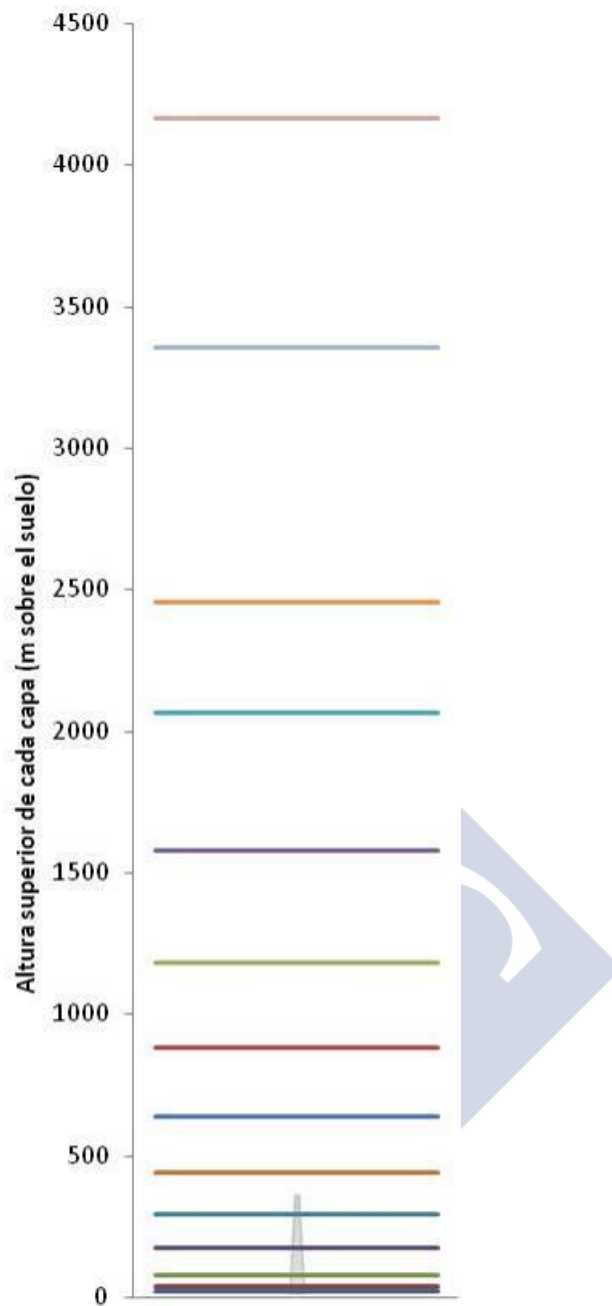


Figura 5.3 Representación de las alturas superiores de los niveles verticales aplicados en la malla meteorológica del modelo CALMET. A escala y en color gris se representa la chimenea.

Como configuración de niveles verticales en el modelo CALMET se seleccionaron 14 niveles en altura Tabla 5.2, para estar en correspondencia con los niveles sigma del fichero WRF con que se ingestaría y que se muestra en la Figura 5.3 donde se aprecia que la chimenea emite en la sexta capa. Puede observarse el mayor número de niveles en superficie, si bien se consideran también varios niveles abarcando el rango vertical (500-2000 m) que se prevé alcance la emisión desde una chimenea de gran altura en su entorno local (Souto, 1993). Se destaca que la chimenea de As Pontes emite en la sexta capa. Si a ello se le suma la sobreelevación del penacho entonces este alcanzaría alturas superiores.

Como objetivo de este trabajo, con el fin de evaluar la mejor opción de aplicación del modelo CALMET en este entorno, se ensayaron 10 configuraciones distintas de datos de entrada al mismo, basadas en:

a) Simulaciones meteorológicas (Saavedra et al., 2012) proporcionadas por el modelo de predicción meteorológica WRF (Skamarock et al., 2008) con distintas resoluciones espaciales. La configuración del modelo WRF empleado fue la misma que la que se aplica en el sistema operacional de predicción de la calidad del aire PRESAXIO (Souto et al., 2014), si bien se sustituyeron las predicciones del modelo GFS (Geophysical Forecast System) suministradas por el US NCEP (Centro Nacional de Predicción Ambiental, EEUU) por los reanálisis del mismo modelo, que incorporan las medidas disponibles sobre el hemisferio Norte.

b) Medidas meteorológicas disponibles en el dominio de simulación, en superficie y en altura.

En primer lugar, se alimentó al modelo CALMET solo con resultados del modelo WRF a 9 km y 3 km de resolución (Sección 5.4.1), y empleando distintas resoluciones horizontales en CALMET (3 km, 1 km, 0,5 km y 0,2 km). Una vez confrontados sus resultados frente a las medidas en superficie disponibles, se seleccionó la resolución de 0,5 km para CALMET como la idónea para su aplicación y se ensayaron distintas combinaciones de datos de entrada, basadas en las medidas meteorológicas y los resultados del modelo WRF a distintas resoluciones.

En la Tabla 5.2 se resumen las 9 configuraciones diferentes resultantes y aplicadas, clasificadas en dos grupos:

Tabla 5.2 Configuraciones aplicadas del modelo CALMET combinando resultados del modelo WRF y/o medidas como datos de entrada.

Nombre	Configuraciones	
Grupo 1		
Cm-3/9km	Solo WRF 9 km, resolución 3 km	
Cm-3/3km	Solo WRF 3 km	resolución 3 km
Cm-1/3km		resolución 1 km
Cm-0,5/3km		resolución 0,5 km
Cm-0,2/3km		resolución 0,2 km
Grupo 2		
Cm(W)	Igual a Cm-0,5/3km	
Cm(S+U)	Medidas de 11 estaciones meteorológicas de superficie y 1 en altura (radiosondeos).	
Cm(W+S6)	WRF 3 km y 6 estaciones meteorológicas de superficie	
Cm(W+S)	WRF 3 km y 11 estaciones meteorológicas de superficie. Utilizada solo para la validación del modelo CALPUFF	
Cm(Sw+Uw)	WRF3 km reformateado como medidas virtuales de 6 estaciones meteorológicas de superficie y 1 en altura.	
Cm(S6+U)	Medidas de 6 estaciones meteorológicas de superficie y 1 en altura (radiosondeos)	

Grupo 1: 5 configuraciones en las que se emplearon como datos de entrada solo resultados del modelo WRF, incluyendo la configuración CALMET 0,5 km alimentada con el modelo WRF 3 km y elegida como base CALMET en los ensayos del Grupo 2.

Grupo 2: 4 configuraciones en las que se emplearon medidas meteorológicas, repitiendo en este Grupo la configuración CALMET 0,5 km alimentada solo con el modelo WRF 3 km.

Una descripción más detallada de las opciones elegidas en la configuración del modelo CALMET se recoge en el Anexo 1.

5.4.1 Simulaciones meteorológicas con el modelo WRF

Como parte de los datos de entrada del modelo CALMET en las simulaciones del Grupo 1 y del Grupo 2 (excepto las simulaciones Cm(S+U) y Cm(S6+U)) se emplearon los resultados de simulación del modelo WRF ejecutado de acuerdo con la configuración que se describe a continuación.

El modelo WRF v.3.2 (Skamarock et al., 2008) se ha configurado con 30 niveles verticales y 3 niveles de anidamiento (one-way) (Figura 5.1) de 27, 9 y 3 km, el último de los cuales se utiliza para suministrar los datos meteorológicos de entrada al modelo CALMET. El espaciado entre niveles verticales se incrementa gradualmente con la altura, con el nivel más bajo a 10 m sobre el suelo y el nivel superior a 100 hPa. De los ensayos de Saavedra et al. (2012) con el modelo WRF sobre la región se dedujo la mejor configuración del modelo aplicada en este trabajo, que incluye: el esquema Kain-Fritsch para la parametrización de cúmulos (sobre los dominios de 27 y 9 km, únicamente), el esquema WSM3 para la microfísica de nubes, los modelos de radiación RRTM para onda larga y de Dudhia para onda corta, y el modelo de suelo con 5 capas.

Particular atención se puso en el ensayo de diferentes parametrizaciones de capa límite atmosférica del WRF sobre la región de estudio, en los trabajos de Saavedra et al. (2012) y Souto et al. (2013). En dichos trabajos se ensayaron y evaluaron los siguientes esquemas: Yong Sei University-Pleim-Chang (YSU), Mellor-Yamada-Janjic (MYJ), and Asymmetric Convention Model 2 (ACM2). De acuerdo con dichos trabajos los esquemas YSU y ACM2 son los que ofrecen mejores resultados de altura de capa de mezcla, si bien un análisis más detallado de los perfiles verticales de velocidad de viento y temperatura, comparados con datos de radiosondeos en la región, permite concluir que el esquema YSU (Hong and Lim, 2006) es el más realista en la modelización de la estructura vertical de la capa límite. Por ello, son los resultados del modelo WRF obtenidos con este esquema los aplicados como datos de entrada al modelo CALMET.

Como datos meteorológicos de entrada al modelo WRF, condiciones iniciales y de contorno, se emplearon los reanálisis elaborados con el modelo GFS (Geophysical Forecast System) por el

NCEP (National Centre for Environmental Prediction, EEUU) de 1° de resolución, a intervalos de 3 horas. No se emplearon medidas meteorológicas en superficie y en altura adicionales, aparte de las ingestadas por el NCEP en la elaboración de dichos reanálisis. Los datos topográficos y de usos de suelo proceden del United States Geological Survey (USGS, 2008).

Para la realización de las simulaciones en cada período seleccionado se inicializó el modelo WRF como un “cold start” o arranque en frío a las 0000 UTC del primer día de cada período, ejecutándose durante 72 horas de simulación. En consecuencia, se consideró spin-up alguno, teniendo en cuenta que los datos meteorológicos de entrada ya procedían de los reanálisis generados por el modelo GFS. Las condiciones de contorno se actualizaron cada 6 horas, y los resultados se almacenaron cada hora con el fin de proporcionar datos representativos de períodos horarios para alimentar el modelo CALMET con esa cadencia.

5.4.2 Medidas meteorológicas

Como parte de los datos de entrada para las simulaciones con el modelo CALMET del Grupo 2 (excepto Cm(W) y Cm(Sw+Uw)) se utilizaron datos de 11 estaciones meteorológicas de superficie y 1 en altura (radiosondeo) localizadas dentro del dominio de simulación (Tabla 5.3 y Figura 5.4). En su elección se tuvo en cuenta que tuvieran datos válidos en los períodos elegidos y que estuvieran comprendidas en el dominio de validación.

Tabla 5.3 Estaciones meteorológicas en superficie y en altura que proporcionaron datos para la aplicación y validación del modelo CALMET: Velocidad del viento horizontal, dirección del viento y temperatura.

Estación	Latitud (°N)	Longitud (°W)
MeteoGalicia		
Mabegondo (Abegondo)	43,24	8,26
CIS Ferrol (Ferrol)	43,49	8,25
Marco da Curra (Monfero)	43,35	7,89
Fragavella (Abadín)	43,32	7,45
Guitiriz (Guitiriz)	43,23	7,78
EOAS-Santiago (Radiosondeo)	42,88	8,56
C.T. As Pontes		
B1 (A Magdalena)	43,45	7,85
D1 (A Mourela)	43,43	7,85
B2 (Louseiras)	43,54	7,74
C9 (Mourence)	43,31	7,69
F2 (Fraga Redonda)	43,41	7,99
G2 (Vilanova)	43,55	8,03
AEMET		
A Coruña (Radiosondeo)	43,36	8,41

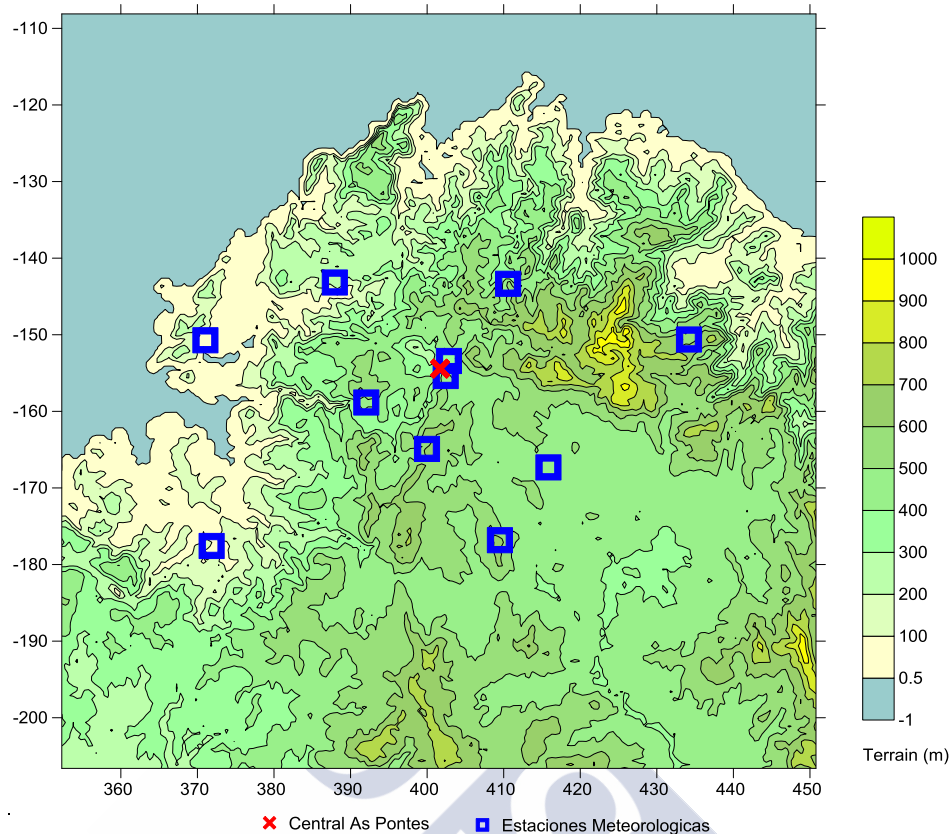


Figura 5.4 Topografía del dominio de simulación CALMET/CALPUFF, con la ubicación de la C.T. As Pontes y de las estaciones meteorológicas en superficie existentes para la aplicación y validación del sistema CALMET/CALPUFF en el dominio de simulación.

5.5 Modelo CALPUFF para validación

Como modelo de dispersión del sistema CALMET/CALPUFF se empleó CALPUFF Versión 6.42. Como se ha justificado previamente, tratándose el contaminante SO_2 elegido como trazador pasivo, se consideró el efecto de su deposición seca, pero no el de la deposición húmeda ni las transformaciones químicas. Bajo estas premisas, se ensayaron diferentes configuraciones en la aplicación del modelo CALPUFF, teniendo en cuenta:

- a) La representación del foco emisor, chimenea de la C.T. As Pontes.
- b) Los campos meteorológicos resultantes del modelo CALMET, en función de los resultados de la validación de distintas configuraciones de este modelo meteorológico.

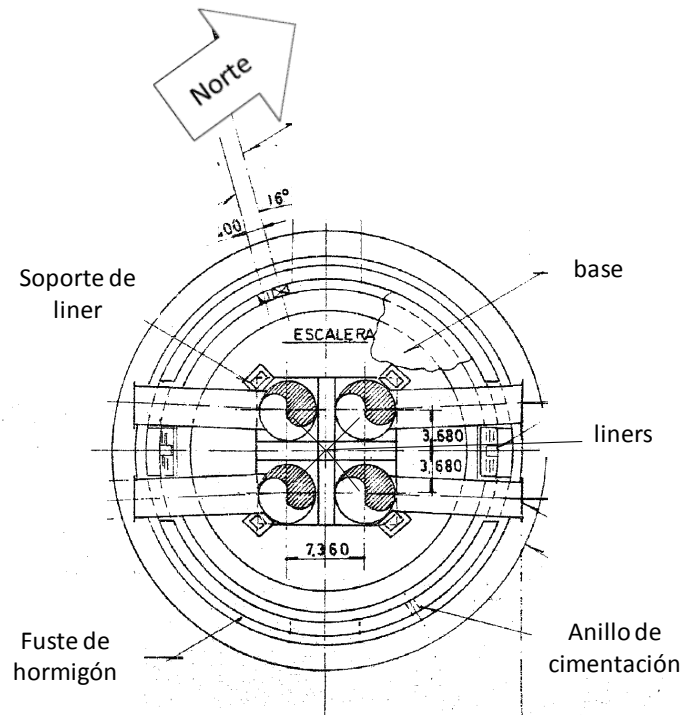


Figura 5.5 Vista en planta de la chimenea de la C.T. As Pontes, con los cuatro liners insertados dentro de ella. Medidas en mm y grados ($^{\circ}$).

En particular, en lo que se refiere a la representación del foco emisor, la chimenea que evacúa los gases de combustión de la C.T. As Pontes consta en realidad de 4 conductos o liners independientes (Figura 5.5), cada uno de ellos conectado a una caldera de carbón distinta, encastrados en la misma estructura constructiva. Así, en realidad esta chimenea está compuesta por cuatro chimeneas independientes, de igual altura y diámetro, ubicadas prácticamente en la misma coordenada geográfica. Esto podría permitir su consideración como una única chimenea virtual, cuyos parámetros geométricos deben resultar acordes con la influencia que la geometría de cada liner real tiene sobre la dispersión de los contaminantes.

Así, se definieron dos alternativas para describir en el modelo CALPUFF los cuatro liners que componen la chimenea real. La alternativa A consistió en considerarla como cuatro fuentes puntuales independientes y la alternativa B, como una sola fuente puntual virtual, cuya emisión será la suma de la de los cuatro liners y cuya sección circular de salida es también la suma de las secciones circulares de los cuatro liners.

En la consideración de una sola fuente puntual equivalente se realizaron diversas precisiones. Para obtener la temperatura y la concentración de emisión equivalentes, se promediaron en todo el período los promedios horarios de los cuatro liners, dado que apenas experimentaron variaciones en cada período. En cuanto a la velocidad de emisión equivalente, se calculó la

velocidad horaria promedio a partir de las temperaturas y los caudales normalizados horarios promedio, y considerando un diámetro equivalente al del área resultante de la suma de las áreas de la sección transversal de los cuatro liners y, dada su reducida variación, se promedió a cada periodo.

Una descripción más detallada de las opciones elegidas en la configuración del modelo CALPUFF se recoge en el Anexo 2.





6 Períodos de validación de los modelos CALMET y CALPUFF

Un paso previo imprescindible, para el estudio es la correcta elección de los periodos sobre los cuales los análisis y cálculos serán realizados. En el caso de la C.T. As Pontes, para la estimación a partir de las medidas de inmisión, fue necesario establecer una serie de criterios que hiciesen esta estimación representativa.

Solo se consideraron aquellos períodos para los que hubiese promedios horarios de inmisión, lo suficientemente alejados, por encima del nivel de detección de SO_2 en las estaciones de As Pontes, que es de $3 \mu\text{g}/\text{m}^3$, dado que apenas hay otros focos significativos que puedan afectar a dichas estaciones. En caso contrario, se consideró que el impacto del penacho no era significativo.

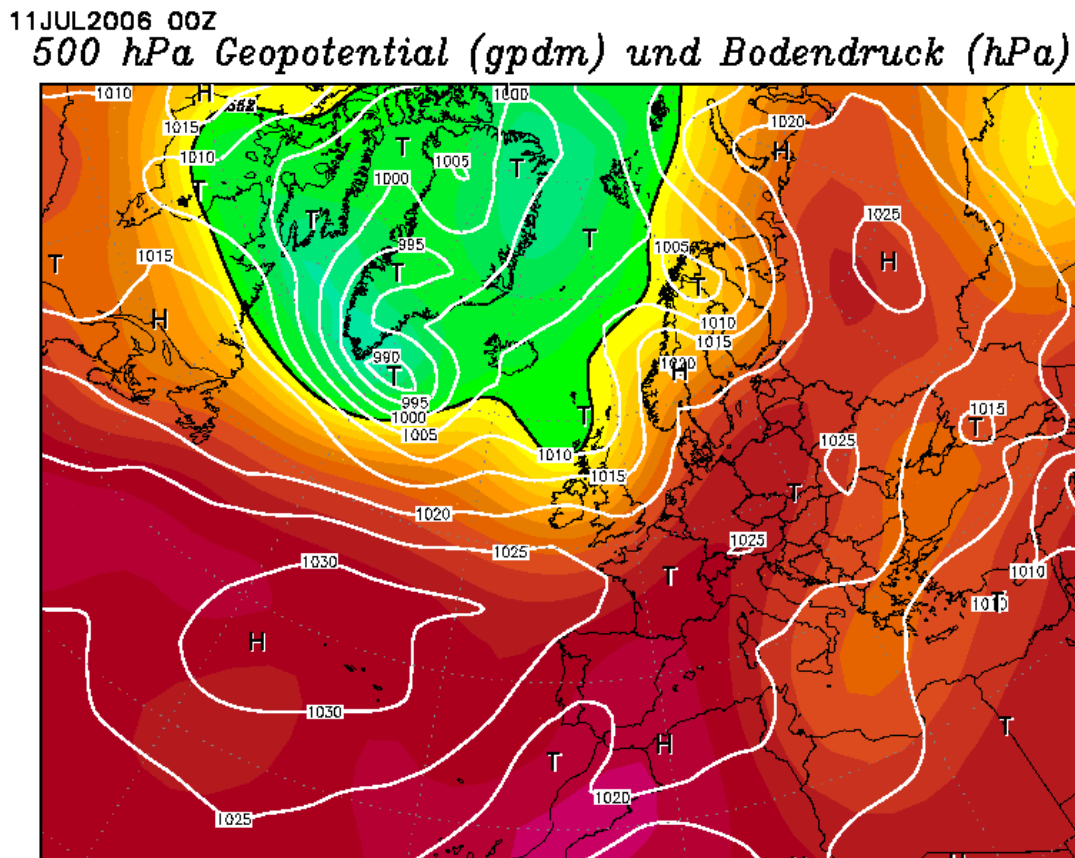


Figura 6.1 Mapa de presión en superficie (hPa) y geopotencial a 500 hPa (Dm) correspondientes al 11/7/2006, como un día característico de período de validación P3 (Wetterzentrale, 2010).

Se eligieron tres episodios de SO_2 con las premisas de que las emisiones tuvieran un posible origen inicial en la UPT As Pontes, que hubiera un máximo en una estación rural (B2 o F2), que tuviera una duración de tres días: día del máximo y los dos días previos al máximo; y que el viento predominante fuera procedente de la central. Por ejemplo, máximo en F2 con viento del NE. Como

resultado, los periodos elegidos fueron: P1: del 13 al 15 de julio de 2005; P2: del 1º al 3 de junio de 2006; y P3: del 9 al 11 de julio de 2006.

El patrón sinóptico predominante en la región durante los tres períodos es claramente estable y anticiclónico, con muy leves diferencias entre ellos. A modo de ejemplo, en la Figura 6.1 se muestra el mapa sinóptico del día 11/7/2006, característico del período P3. Los tres períodos se caracterizan por el Anticiclón de las Azores extendiendo su influencia sobre la Península Ibérica y provocando un flujo sinóptico E-NE sobre el Noroeste de la misma (Figura 6.1). Como consecuencia, las condiciones meteorológicas en las que se observan los niveles de inmisión de SO₂ más altos durante los episodios se corresponden con altas temperaturas y vientos flojos a moderados, soplando del Este o del Nordeste.



7 Local-scale meteorological model validation: WRF and CALMET

In 1981, Willmott (1981) pointed out the advantages of using the RMSE to assess meteorological models; discriminate other parameters motivated by the overestimation of small mistakes or the masking of large errors.

Many authors that use CALMET with different purposes validate the obtained wind fields. Truhetz et al. (2007) validated the outputs of a MM5-CALMET coupling in the Alpine region. Lee et al. (2003) conducted a study of sensitivity of the R1 parameter for many configurations of MM5-CALMET and used for this the mean error, the test of t-Student, the standard deviation of main error and a significance test F; Radonjic et al. (2005) proposed and validated a new methodology for the treatment of surface measurements and CALMET interpolation in an area near Lake Ontario; while in Hong Kong, Yim et al. (2009) validated a MM5-CALMET coupling to study the wind potential.

Furthermore, experience in the application of these statistical methodologies has resulted in typical ranges validity or recommended for their parameters applicable to atmospheric models, which will be the methodology adopted in this work.

7.1 Validation methodology of the CALMET and WRF meteorological models

Because there is a large number of possible configurations to choose from, each meteorological model must be validated before its implementation, verifying it with measures to determine the degree of accuracy of the prediction proposal and obtain a suitable model configuration.

Once considered the parameters of many configurations, estimation problem arises of how representative it can be every coupling, their respective configurations and the error associated with each. For this purposes, a graphical comparison of the time series models for wind speed, wind direction and temperature, contrasting with the measures (Annex 3) and the result of WRF (Sección 5.4.1) was performed; and the error is estimated by various statistics parameters shown in Table 7.1, in addition to the classic linear regression coefficient R^2 (Jimenez et al., 2006; Hogrefe et al., 2001).

A perfect model would show zero values for each of the first eight parameters while for R^2 would be one.

Table 7.1 Definition of statistic parameters used for meteorological model evaluation.

Parameter	Definition
$MB = \frac{1}{N} \sum_1^N (M - O)$	Mean bias
$MAGE = \frac{1}{N} \sum_1^N M - O $	Mean absolute gross error
$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_1^N (M - O)^2}$	Root mean square error
$MNBE = \frac{1}{N} \sum_1^N \left(\frac{M - O}{O} \right) \cdot 100\%$	Mean normalized bias error
$MFB = \frac{1}{N} \sum_1^N \left(\frac{M - O}{M + O/2} \right) \cdot 100\%$	Mean fractionalized bias
$MNGE = \frac{1}{N} \sum_1^N \left(\frac{ M - O }{O} \right) \cdot 100\%$	Mean normalized gross error
$NME = \frac{\sum_1^N M - O }{\sum_1^N O} \cdot 100\%$	Normalized mean error
$NMB = \frac{\sum_1^N (M - O)}{\sum_1^N O} \cdot 100\%$	Normalized mean bias

where N is the number of observations,
 M is the modeled (data obtained from simulations), and
 O is the observations.

Most of the meteorological models are validated against surface measurements, due to the limited availability of measures in upper air. However, this work dispose of some upper air measurements from routine rawinsonde, which have served to complete this validation; given the great importance of weather conditions in upper air in the plume dispersion of atmospheric pollutants (Figure 7.1).

For upper air validation two graphic comparisons were made: one with upper air profiles at different times of the results of the WRF and CALMET models for wind speed, wind direction and temperature, checking them against the measures. The other verification consists in comparing time series of the planetary boundary layer (PBL) depth, calculated by the model and estimated from upper air measurements available.

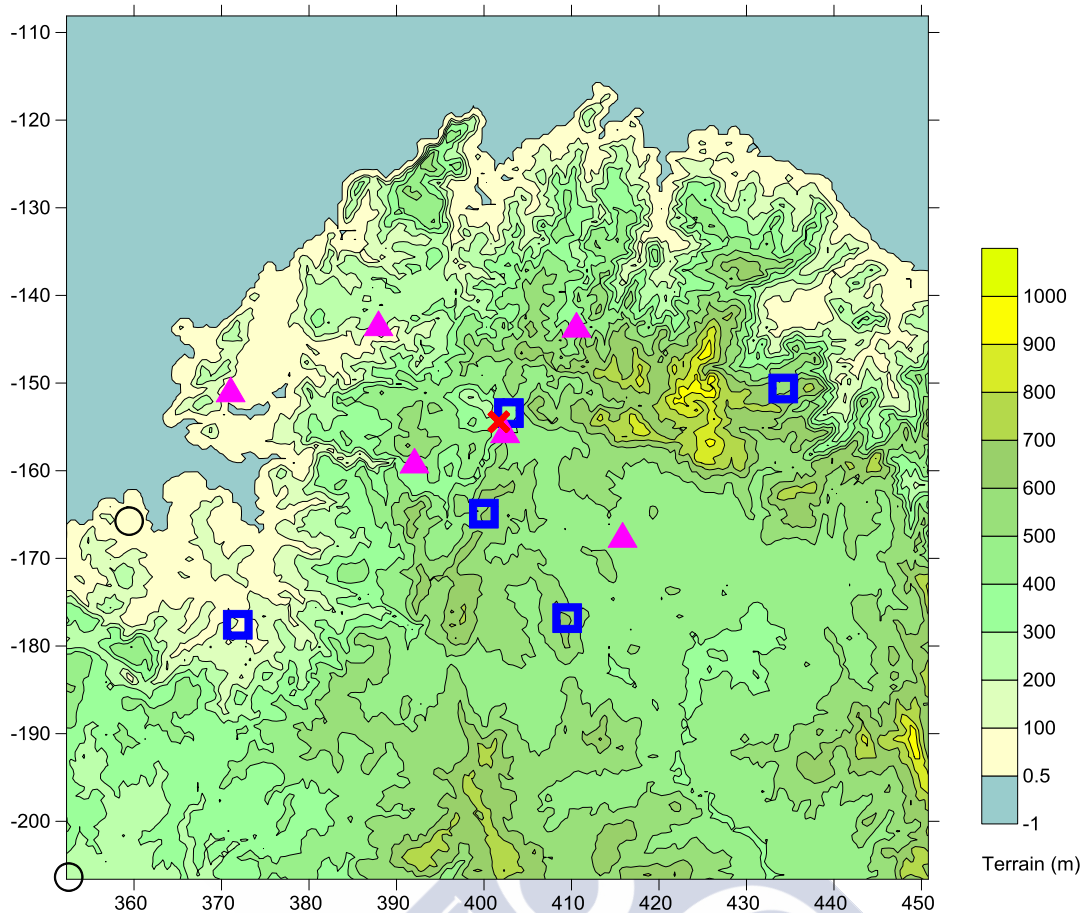


Figure 7.1 Location (UTM coordinates) and physical geography of the CALMET simulation domain with the location of meteorological surface and upper-air sites. (▲):CALMET model input data in some Group 2 simulations. (■): Surface data used in model CALMET Group 2 validation and (○) Rawinsonde release points used in model validation. EOAS-Santiago rawinsonde represented in the SW domain corner is actually released at South of the domain, although their movement during ascent provides upper air data representative of conditions in the simulation domain. Additionally, As Pontes power plant location is observed (X) in the center of the domain.

7.2 Meteorological measurements

Set of meteorological measurements for models implementation and validation includes hourly averages of 11 surface stations, and data of two rawinsondes releases located in the Northwest of the Iberian Peninsula (Figure 7.1). When only 6 of the 11 surface weather stations provided input to the model CALMET, the other five stations were used in the validation of the model simulations. Upper air measurements were collected from two rawinsondes (Figure 7.1), EOAS-Santiago (MeteoGalicia) and A Coruña (AEMET), who study periods that were available alternately throwing every 6 hours. From this datasets temperature, surface wind and PBL depth were derived meteorological parameters used for meteorological models validation.

7.3 Results

7.3.1 Surface validation

For surface evaluation, Table 7.2 shows the root mean square error (RMSE) modelled vs. measured for the different WRF and CALMET simulations. Group 1 and Cm(S+U) simulations are evaluated for 11 (all) sites; Group 2 simulations are evaluated for the 5 sites not applied in those simulations. With respect to surface wind speed, Group 1 simulations provide similar surface performance, showing that CALMET cannot improve WRF results without measurements. Of course, the lowest RMSE values are obtained for the Cm(S+U) simulation, as it is tested against the surface sites which are used as input data. About the other Group 2 simulations, a significant improvement with respect to WRF results is obtained using WRF results and 6 surface sites data (Cm(WRF+S6)), even better than using surface and upper-air measurements (Cm(S6+U)); also, for the P3 period, the use of surface measurements as CALMET input produce worse results, showing that the available surface sites are very different, and their measurements are locally affected.

Comparing validations between Groups 1 and 2 simulations (except Cm(S+U)) the use of measurements as input to CALMET model not seem to reduce substantially the RMSE; except in the case of Cm(WRF+6S) simulation, which combines WRF model output with data of 6 sites not used in the validation; even better than using Cm(S6+U) data of 6 sites in the same area and upper air measurements (2 rawinsondes launched each 6 hours), indicating that the WRF model accordingly adapted provides better results at local scale than those provided by routine meteorological rawinsondes. Even the combined Cm(Sw+Uw) test that use WRF model outputs transformed into synthetic measurements on specific sites, with actual surface data and rawinsonde does not provide a significant improvement.

From these results, it also finding that the Cm(S6+U) simulation provides good results for surface wind speed (Emery et al., 2001), for use as input to a atmospheric dispersion model. The results of surface temperature are, however, disparate; and although in the case of simulation of air quality for passive species, temperature has no a significant influence, the possible causes of this deviation are considered important to analyze.

Table 7.2 RMSE from CALMET simulations from surface meteorological sites data, wind speed and temperature during 3 validation periods.

Simulations		RMSE, wind speed (m-s-1)			RMSE, temperature (°C)		
		P1	P2	P3	P1	P2	P3
	CALMET meteorological inputs and grids						
Group 1 (from 11 sites)							
WRF (3 km)	-	1.574	2.582	1.968	3.635	1.879	2.522
Cm-1/3km	WRF results only, 1 km grid resolution	1.495	2.550	1.946	3.753	2.305	3.092
Cm-0,5/3km = Cm(W)	WRF results only, 0.5 km grid resolution	1.498	2.510	1.919	3.755	2.293	3.083
Cm-0,2/3km	WRF results only, 0.2 km grid resolution	1.499	2.527	1.914	3.763	2.285	3.081
Group 2 (from 5 sites)							
Cm(S+U)	Data from 11 (all) surface and 2 upper-air sites	0.048	0.061	0.054	0.650	0.050	0.732
Cm(W+S6)	WRF results and 6 surface sites	0.493	2.018	1.982	3.480	2.005	2.736
Cm(Sw+Uw)	WRF results (as measurements), 6 surface and two upper-air sites	1.463	2.245	2.250	3.577	3.374	2.825
Cm(S6+U)	Data from 6 surface and 2 upper-air sites	1.412	2.491	2.622	1.416	2.870	2.369

Table 7.3 MB (mean bias) and RMSE of surface temperature results (°C) from different WRF and CALMET simulations against 5 different testing sites, along P2 period.

Site	WRF(3 km)		Cm(W)		Cm(W+S6)		Cm(S6+U)	
	MB	RMSE	MB	RMSE	MB	RMSE	MB	RMSE
Fragavella	1.040	2.369	1.386	1.937	1.386	1.937	3.500	4.314
Guitiriz	0.894	1.537	0.933	1.229	0.933	1.229	0.944	2.033
Mabegondo	-0.384	1.912	0.265	2.798	0.265	2.798	-2.401	3.632
Marco da Curra	0.374	1.133	0.327	0.914	0.327	0.914	0.249	1.374
B1 Magdalena	-0.205	1.334	-0.666	2.482	-0.666	2.483	-1.384	1.830

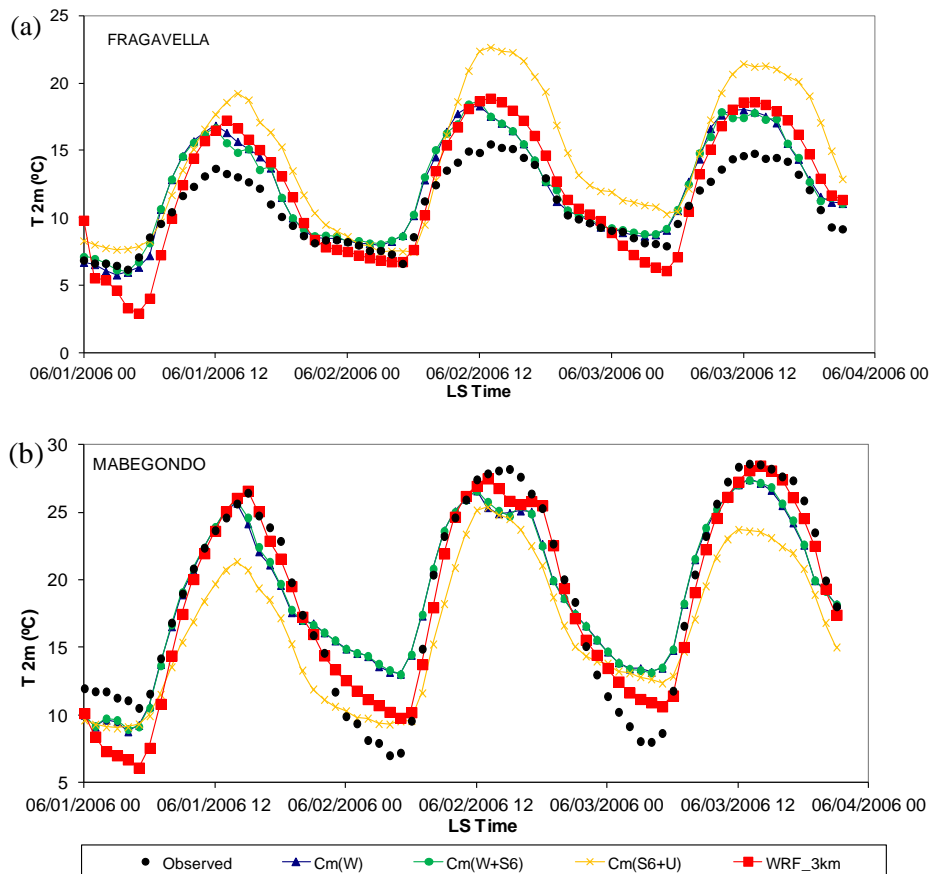


Figure 7.2 Surface temperature time series both simulated by WRF and CALMET (several simulations) and observed at (a) Fragavella and (b) Mabegondo sites, along P2 period.

When analyzing surface temperature, poor performance is achieved in all tests and periods, with RMSE values even above 3 °C; except, of course, in the reference test Cm(S+U). In fact, the use of surface measurements from the other 6 sites (different than testing sites) as CALMET input does not improve their surface temperature results. As an example, Table 7.3 shows RMSE values for the P2 period against the 5 testing sites. The worst statistics are usually achieved in Mabegondo (coastal), Fragavella and B1-Magdalena (inland) sites.

Figure 7.2 shows surface temperatures simulated by WRF and CALMET (several inputs) and observed at Mabegondo and Fragavella sites along P2 period. It can be observed the daily temperature oscillations typical in anticyclone conditions. However, at Fragavella the simulated temperature is usually higher than observed, with some improvement when measurements from other sites are combined to WRF results as CALMET input; only WRF results provide a bit lower nocturnal temperatures than observed, which are partially corrected by CALMET. On the other hand, at Mabegondo site all simulations provide lower daily temperature oscillations, even though it is a coastal site with softer temperature oscillations. Anyway, these differences cannot be corrected by using measurements from the other 6 sites as CALMET input. Again, the local

characteristics of the available surface sites in this complex terrain environment do not allow improving CALMET results.

A more detailed description of CALMET model validation results is showed in Annex 5.

7.3.2 Upper-air validation

About upper-air evaluation, PBL depth, both modelled (Group 1 simulations) and estimated from rawinsonde data are compared. CALMET PBL depth is modelled as follows: in land, using Holtslag and van Ulden (1983), and over water using a profile technique, considering air-sea temperature difference (Scire et al., 2000). PBL depth estimation follows the critical bulk Richardson number method (Vogelezang et al., 1996) in dry atmosphere (as a function of potential temperature). A critical Richardson number of 0.25 is applied.

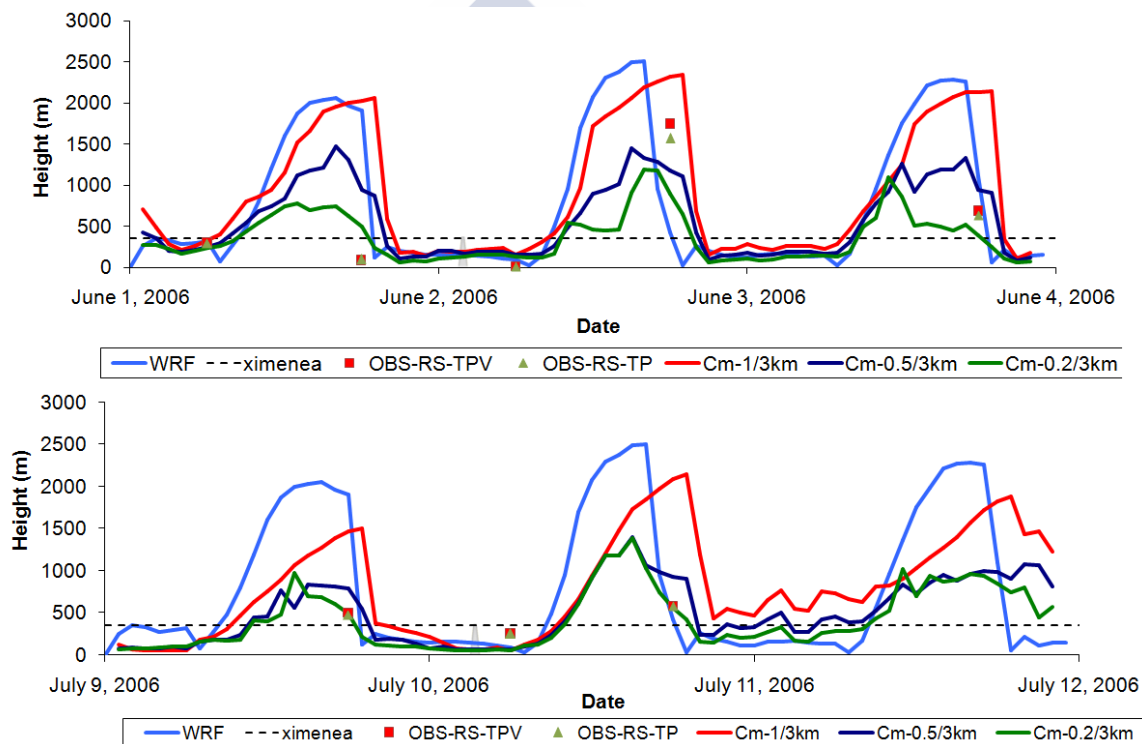


Figure 7.3 Estimated PBL depth (Vogelezang et al., 1996) during P2 and P3 validation periods from the virtual potential temperature data (OBS-RS-POS) and potential temperature (OBS-RS-TP) of EOAS-Santiago rawinsonde (at 06 UTC and 18 UTC every day), simulated by the WRF model (WRF) and simulated by different CALMET model configurations (Cm-1/3km, Cm-0.5/3km, Cm-0.2/3km) previously described. In gray color and scaled is represented the stack. With dashed lines its height is extending.

Figure 7.3 and Figure 7.4 show PBL depth time series estimated with data from the rawinsondes of EOAS-Santiago and A Coruña respectively in the validation periods. For EOAS-Santiago during the period P1 the rawinsonde was not operational. In both cases the evolution of the PBL depth calculated by WRF model (WRF) and calculated by the CALMET model fed by the WRF model

outputs with horizontal resolution of 1 km CALMET (Cm-1/3km) is also shown, 0.5 km (Cm-0.5/3 km) and 0.2 km (0.2-Cm/3km).

As shown in both locations, CALMET model provides PBL depth estimates closest to the estimated from rawinsondes than WRF model, being better CALMET model estimations as higher is its horizontal grid size. While in this case the differences between the resolutions of 0.5 and 0.2 km are not very significant. This indicates that the CALMET model improves calculation of the PBL depth respect WRF because of their greater number of vertical levels in the PBL; can also influence of the turbulent settings boundary layer selected in each model; even though the greatest horizontal grid size of CALMET model may slightly improve that estimation. It is emphasized that in night hours As Pontes stack emits over the PBL. If plume rise is added then this would reach greater heights and the mixture of contaminants would be much weaker.

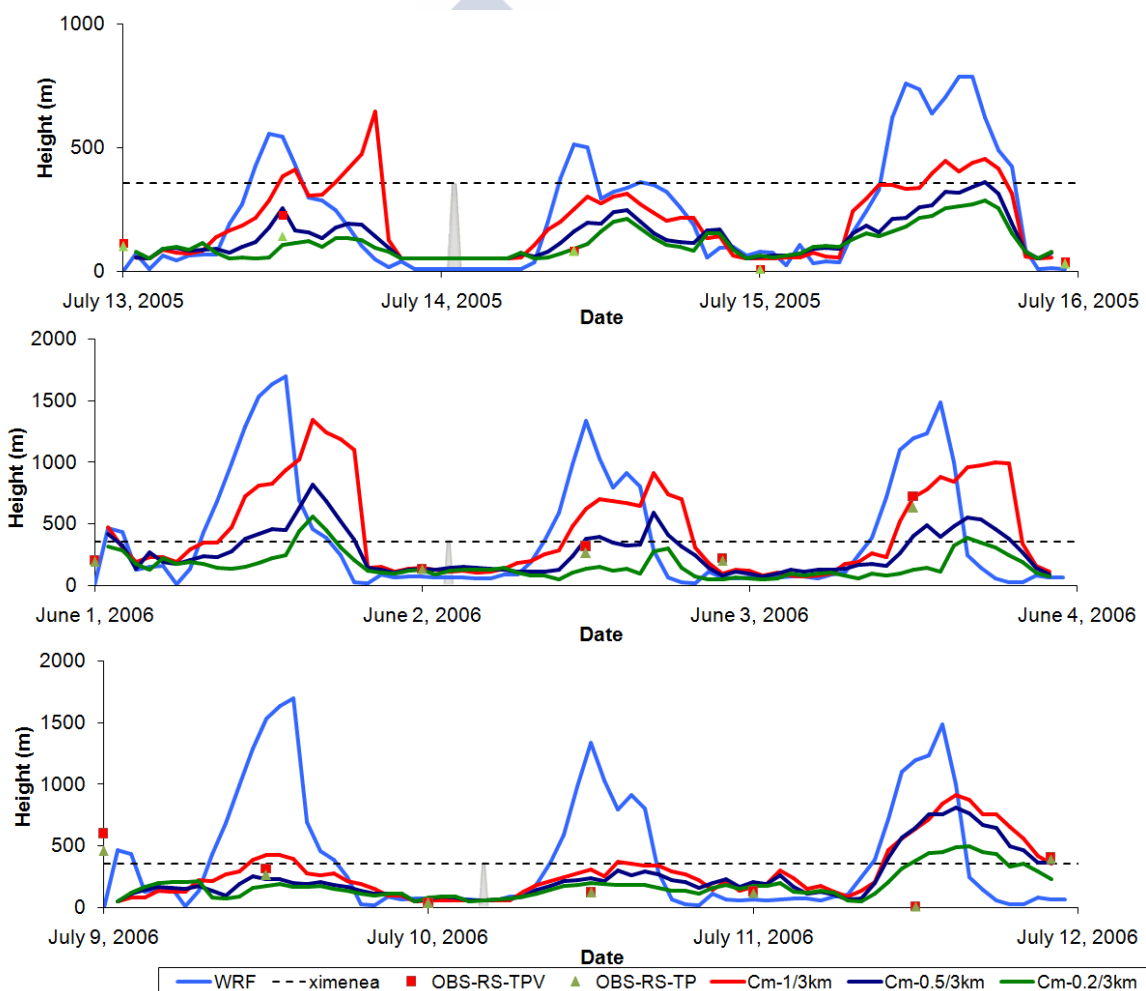


Figure 7.4 PBL depth time series over A Coruña (at 00Z and 12Z every date) modelled by WRF model (YSU PBL scheme) and different CALMET model resolutions (lines) and estimated from the A Coruña rawinsonde data (dots). PBL depth estimated using observed virtual potential temperature (OBS-RS-TPV), and using observed potential temperature (OBS-RS-TP) (Vogelezang et al., 1996). In gray color and scaled is represented the stack. With dashed lines its height is extending.

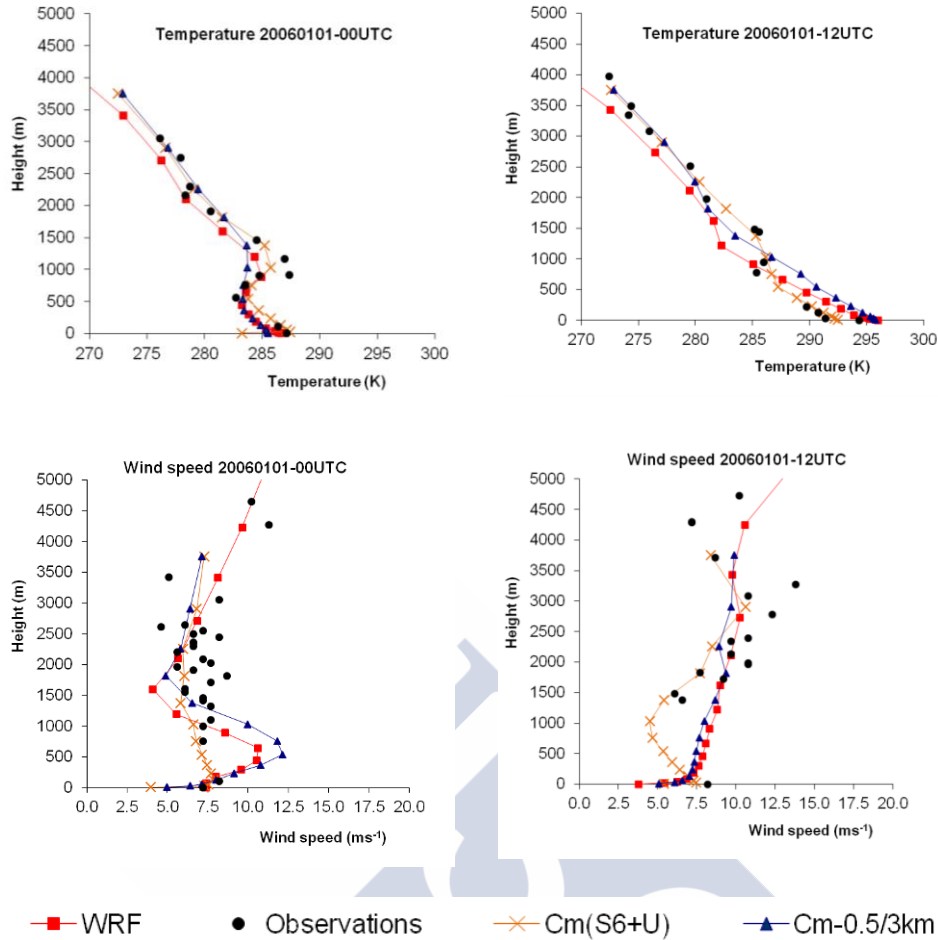


Figure 7.5 Temperature and wind speed profiles on June/01/2006 at 0Z and 12Z, both measured by A Coruña rawinsonde and calculated by different models simulations: WRF output, Cm(S6+U), and Cm(0.5/3km).

As an example of PBL profiles, Figure 7.5 shows temperature and wind speed profiles on June/01/2006 at 0 UTC and 12 UTC, both measured by A Coruña rawinsonde and calculated by different models simulations: WRF output, Cm(S6+U), and Cm(0.5/3km); the rest of CALMET simulations results (also using surface measurements) are very similar to Cm(0.5/3km).

Modelled 0 UTC temperature profiles can reproduce upper air lapse rate and thermal inversion observed between 500-1000 m, but less stronger than observed. As expected, the best agreement is obtained by the Cm(S6+U) simulation. At 12 UTC, a light stability change is observed between 500-1500 m, which is only reproduced by Cm(S6+U); also, the WRF model produces a small change between 1000-2000 m.

Observed wind speed at 0 UTC is very sparse, with values between 5-12 $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ and the lowest values around 2000 m; as a consequence, Cm(S6+U) produces a quite flat wind speed profile, around 6 $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, with the highest value close to surface level. The other simulations provide a wind speed peak at 500 m, which is not observed. Better simulations results are achieved at 12 UTC,

with an upper-air wind speed increment both observed and modelled, although the small number of measurements shows a more sparse profile.

A more detailed description of upper air CALMET model validation results is showed in Annex 6.



8 Atmospheric dispersion model validation: CALPUFF

There are many CALPUFF model validation tests (O'Neill et al, 2001; Levy et al, 2003; Protonotariou et al, 2004; Cohen et al, 2005; Yau et al, 2010; Dresser et al, 2011; Fishwick et al, 2011; Ghannam et al, 2013). Most of them are based on experiments with passive specific tracers and a lot of surface and upper air measurements during the experiments, in order to achieve the best performance evaluation model. However, with the real sources and the limited measures, uncertainties arise (both in measurements and model results) and a worse performance of the models is expected.

As a reverse application, Cohen et al. (2005) validated CALPUFF using R^2 in a regression model built with estimated emissions of mobile sources of benzene, 1,3-butadiene and diesel PM in Portland, Oregon.

Meanwhile, Dresser et al. (2011) compare CALPUFF against AERMOD and validate their results in Martins Creek, Pennsylvania, using sulfur dioxide as a tracer. To validate using four methods: the first calculated the relationship between the measures and the model output. In the second calculated and the plotted Robust High Concentration (RHC). The third method uses statistics Fractional Bias (FB) and Composite performance measure (CPM). For the last stage used the statistical package for models evaluation, BOOT (Chang and Hanna, 2005).

Fishwick et al. (2011) validate the dispersion model for PM₁₀, in the mining region of Queensland, Australia, using Index of Agreement (IOA), RHC, root mean square error (RMSE) and the Maximum Concentration Ratio (Max_R).

Meanwhile, Ghannam et al. (2013) validate the dispersion model results for CO, NO_x, and PM₁₀ emissions from an industrial complex in Beirut (Lebanon); and use the FB, the Geometric Mean Bias (MG), the normalized mean square error (NMSE), the fraction of the predictions within a factor of 2 of observations (FAC2) and linear regression.

In Illinois, Levy et al. (2003) evaluated the sensitivity for various CALPUFF configurations of 9 power plants, to assess the impact of, primary and secondary particulate material.

Furthermore, Protonotariou et al. (2004), validated and compare CALPUFF, REMSAD and UAM in the metropolitan area of Athens, Greece. For them compare glc plots and site values.

In turn, Yau et al. (2010) compare and validate CALPUFF and AUSTAL2000 results comparing the predicted glc values with measures, through statistics (NMSE, linear correlation coefficient (COR), FAC2, FB, fractional standard derivation (FS) and quartiles and dispersion plots.

Meanwhile, Chang (2003) compare CALPUFF and two models (HPAC, and VLSTRACK) contrasting the model results with measurements and using the FB, MG, NMSE, geometric variance (VG) and FAC2 parameters.

At present also newest methods are tested to validate meteorological models: for example Snyder et al. (2007) used the Bayesian statistical method to validate RegCM3; Cao (2010) uses neural networks. But most of the authors contrast the results of the meteorological and air quality models with measurements of meteorological stations and calculates many statistics such as RMSE, BIAS, etc. (Carvalho, 2002b; Chang, 2004; Soriano et al., 2006). Meanwhile, Jimenez et al. (2013), used in addition to the RMSE and BIAS the relative error and compare the model with wind patterns acquired during a 13 year period.

8.1 Validation methodology of the CALPUFF model

Because of the limited air quality monitoring sites available in the domain (Figure 8.1), the typical statistical comparison between hourly model results and measurements (site by site) was changed by an integrated plume impact evaluation, based in the maximum SO₂ glc, C_{max}, over a 0.5x0.5 km² resolution simulation grid. Also, the travel distance to the maximum glc, X_{max}, was calculated. In order to estimate both parameters from the glc measurements, an interpolated glc grid was obtained, hour by hour, using the Vila-Guerau de Arellano (1993) modified equation recommended for to take into account the representativeness of data around each station (De Castro, 2001):

$$c(i, j) = \frac{\sum_{n=1}^N c_n \cdot e^{-\frac{1}{r_n(i,j)}}}{\sum_{n=1}^N e^{-\frac{1}{r_n(i,j)}}} \quad (\text{Ec 8.1})$$

where c_n is the measured glc in site n , and, $r_n(i,j)$ is the distance between the site n and the (i,j) grid point where glc is calculated.

The spatial distribution of the measured concentration for each simulation period is obtained from the interpolation measures results (Annex 4), which allows the derivation of:

- a. The travel distance to the maximum glc, X_{max}, relative to the source preponderant, the As Pontes power plant.
- b. The value of this maximum glc, C_{max}, which may be greater than any of the measured values in the stations.

For better determination of these two parameters, hourly glc isopleth, stimulated by CALPUFF model and interpolated by Kriging method (Morphet, 2009) using SURFER 9 (Golden Software, 2009), were developed.

Thus, it is possible to evaluate the goodness of the results, both qualitatively and quantitatively, as the travel distance to the maximum glc reports the direction and the extent of the plume and the maximum glc value indicates its expansion.

Defined maximum Glc and travel distance to the maximum glc as the two dispersion parameters to validate, for maximum glc above described statistics for meteorological models were applied, and other specific focused in atmospheric dispersion models validation, recommended in ASTM (2000) and incorporated by Chang and Hanna (2005) in its BOOT software. While travel distance to the maximum glc interpolated and simulated with CALPUFF were compared using maps.

8.2 Air quality sites for validation

To validate CALPUFF model results, average hourly SO₂ glc from 10 air quality stations available around the As Pontes power plant during the three validation periods, were compared and listed in Table 8.1; whose geographic location is shown in Figure 8.1.

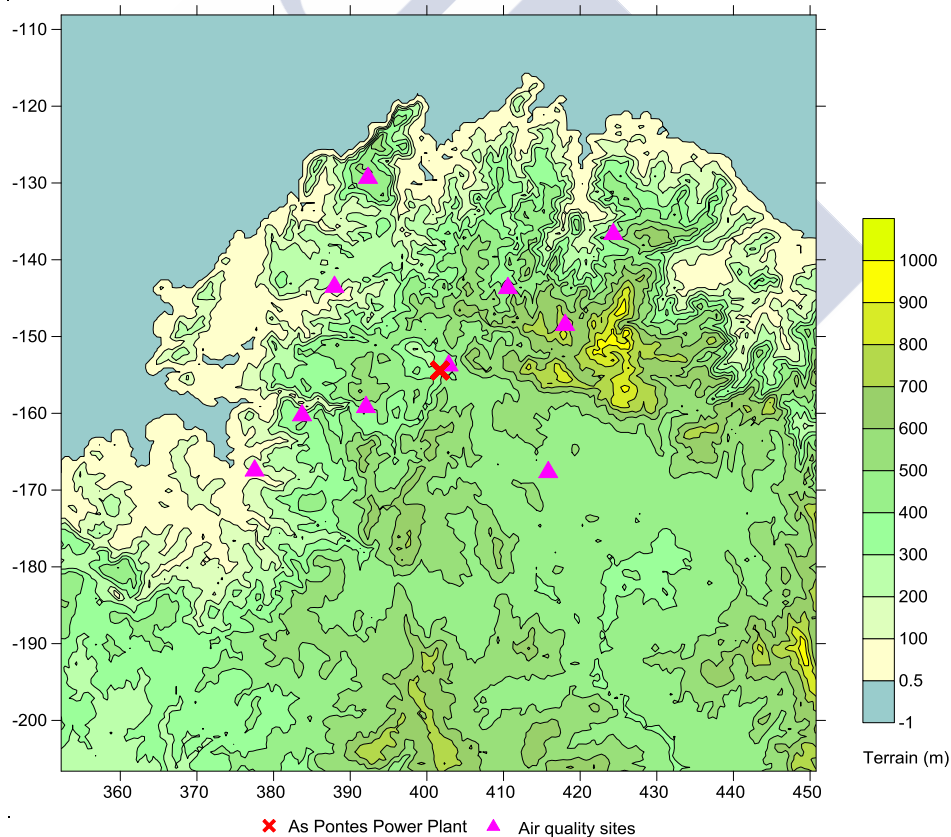


Figure 8.1 Geographical location of air quality sites whose data were used to validate CALPUFF dispersion model in the vicinity of As Pontes power plant.

Table 8.1 Air quality sites for CALPUFF model validation around As Pontes.

Site	Latitude (°N)	Longitude (°W)	Parameter
B1 Magdalena	43.45	7.85	SO ₂ glc
B2 Louseiras	43.54	7.74	
C9 Mourence	43.31	7.69	
F2 Fraga Redonda	43.41	7.99	
G2 Vilanova	43.55	8.03	
A6 Capelada	43.68	7.96	
B6 Curuxeiras	43.49	7.65	
B7 Condomiñas	43.60	7.55	
F4 Taboada	43.40	8.10	
F5 Bemantes	43.34	8.18	

8.3 Results

Keeping CALPUFF model settings and spatial resolution previously described, three different CALMET/CALPUFF configurations were validated:

Calpuff.1: 4 point sources (one per liner) and CALMET Cm-0.5/3km meteorological data (without meteorological measurements).

Calpuff.2: 4 point sources (one per liner) and CALMET Cm (S11+U2) output as meteorological data (all meteorological measurements in surface and upper air).

Calpuff.3: 1 virtual point source equivalent to the sum of the four liners and CALMET Cm-0.5 / 3km output as meteorological data (without meteorological measurements).

Different statistics (Chang and Hanna, 2005) calculated for the maximum glc simulated is seen in Table 8.2, for each validation periods. In all three periods, best statistics is obtained with Calpuff.1 simulation (CALMET results driven by WRF and 4 liners). Calpuff.2 simulation (CALMET fed measures and 4 liners) get considerably worse, and similar to those reached with simulation Calpuff.3 (CALMET results driven by WRF and 1 virtual source). In fact, Calpuff.3 Calpuff.2 and have different results depending on the validation period, improving Calpuff.2 in the period P1, and offering significantly worse statistics in the periods P2 and P3: showing the great influence that adequate weather simulation exercises on the model results CALPUFF above modeling emitting source.

A better understanding of these results is derived from the comparative analysis of the travel distance of maximum glc, X_{max}, simulated with CALPUFF estimated by interpolating and glc measurements. Figure 8.2 shows the results of X_{max} over P2 validation period (June 1-3, 2006). Apparently CALPUFF overestimates the X_{max} value, although it should be appreciated that the interpolated value X_{max} rarely exceeds 20 km, because the distance between air quality stations and the source rarely exceeds this value.

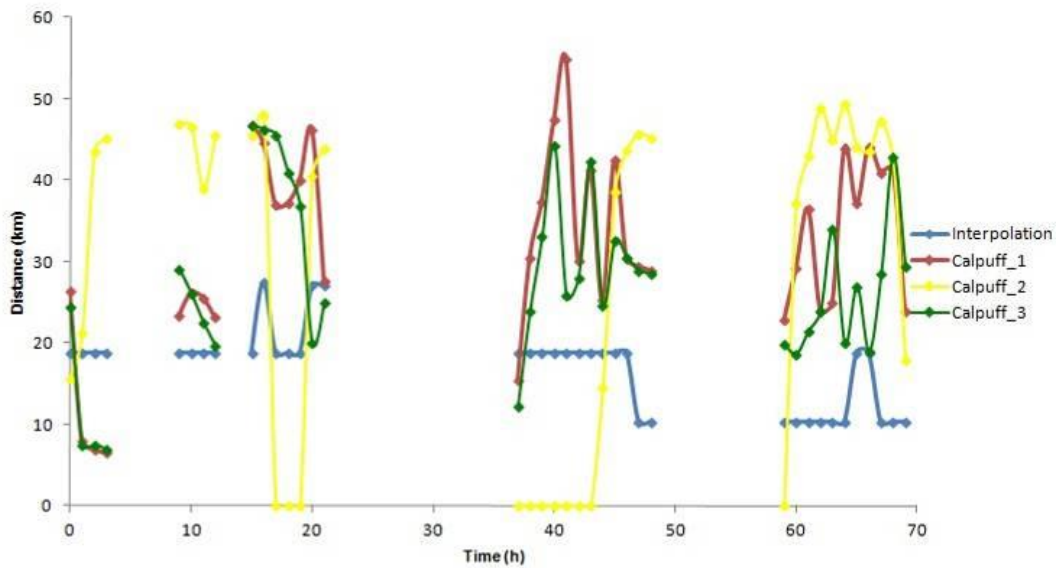


Figure 8.2 Hourly maximum maximum glc travel distance, both calculated (CALPUFF) and interpolated (from measurements) along the testing period June 1st-3rd, 2006.

Thus, whenever CALPUFF Xmax values exceed the interpolated values are significant only in Xmax below 20 km. It can be seen that Calpuff.1 simulation provides travel distances slightly larger than Calpuff.2 simulation, which is understood by consideration of 4 independent liners allowing greater outlet speed of gases when any of them goes lower flow. More relevant is the high Xmax values oscillation obtained with Calpuff.2 simulation, due to the great heterogeneity of the meteorological measurements available and applied as CALMET input in this simulation; values usually away from the interpolated, so this errors simulation are significantly higher.

Table 8.2 Cmax statistics (Chang y Hanna, 2005) for the three simulation periods, using Calpuff.1 (WRF data with 4 liners), Calpuff.2 (meteorological measurements with 4 liners) and Calpuff.3 (WRF data with 1 virtual liner), CALMET/CALPUFF configurations. Best statistics in bold.

	Calpuff.1	Calpuff.2	Calpuff.3	Calpuff.1	Calpuff.2	Calpuff.3	Calpuff.1	Calpuff.2	Calpuff.3
	P1: 13-15 julio 2005			P2: 01-03 junio 2006			P3: 09-11 julio 2006		
FB	-0.14	-1.08	-1.31	-0.30	1.58	0.76	0.04	-1.71	1.02
MG	0.98	0.50	0.24	0.63	29.63	1.88	1.26	0.16	3.86
NMSE	3.37	22.41	12.80	0.93	12.27	2.49	1.39	46.48	3.92
VG	4.60	14.94	36.64	2.51	241050.58	3.52	13.13	592.47	99.13
FAC2	0.50	0.33	0.25	0.47	0.16	0.37	0.44	0.32	0.28
FBFN	0.48	0.15	0.04	0.43	1.70	1.03	0.45	0.02	1.08
FBFP	0.62	1.23	1.35	0.44	0.01	0.13	0.41	1.73	0.06
MAE	11.02	166.55	269.71	40.63	99.93	62.24	3.77	1084.55	62.90
MGFN	1.60	1.29	1.07	1.32	30.18	2.36	1.89	1.13	4.20
MGFP	1.63	2.59	4.50	2.10	1.02	1.26	1.50	6.84	1.09
MOEFN	0.49	0.67	0.87	0.67	0.08	0.30	0.56	0.87	0.29
MOEFP	1.49	1.23	1.11	1.14	-0.01	7.80	2,10	1,08	-0,50

9 Aplicación del sistema CALMET/CALPUFF en el Caribe

Desde el punto de vista de su fundamento teórico, los modelos atmosféricos basados en las ecuaciones de conservación en la atmósfera pueden ser aplicados en cualquier entorno y atmósfera, adaptando las propiedades de ambos a cada localización. Sin embargo, el uso de parametrizaciones empíricas para la resolución de multitud de fenómenos de microescala que requieren este tipo de modelos puede hacer que su extensión a otros entornos resulte limitada.

En este apartado se describe la aplicación del sistema CALMET/CALPUFF a un entorno del Caribe, la bahía de Jagua en Cuba, incluyendo la validación del modelo CALMET frente a las medidas disponibles. A fin de evaluar la capacidad del sistema para la simulación de la dispersión de contaminantes atmosféricos de origen industrial en dicho entorno.

9.1 Dominio y período de estudio

La Bahía de Jagua (Figura 9.1) es una bahía semicerrada situada en la parte central de la costa sur de la Isla de Cuba, abarcando un área de 90 km². Sobre ella se prevé la instalación de un complejo petrolífero, próximo a la ciudad de Cienfuegos y a la región turística de Rancho Luna. Actualmente ya cuenta con dos focos industriales principales, una refinería de petróleo y una central térmica.

Cienfuegos tiene un clima tropical estacional húmedo, modificado por la influencia marina, su latitud y su altitud. Las condiciones meteorológicas en el área de estudio pueden dividirse en dos estaciones: seca (noviembre-abril) y lluviosa (mayo-octubre). La temperatura media anual es de 24,7 °C, con la máxima mensual durante la estación húmeda (27,0 °C en junio) y la mínima durante la estación seca (21,6 °C en enero). De las series de precipitación acumulada (1967-2006) se deduce una precipitación anual de 1507,5 mm; con el 81% de lluvia acumulada en la estación húmeda, y el 19% en la estación seca. Los vientos predominantes son del noreste, aunque existe una fuerte influencia de los vientos del sur y las brisas marinas (Barcia et al., 2009).

Con el objetivo de evaluar la capacidad del modelo meteorológico CALMET para proporcionar datos meteorológicos de entrada al modelo de dispersión atmosférica CALPUFF en el entorno de la Bahía de Jagua se desarrollaron distintas simulaciones meteorológicas a lo largo de un período de 15 días durante la estación seca, como la de mayor riesgo en términos de episodios de contaminación debido a la ausencia de lluvia. Este período abarca del 2 al 16 de enero de 2010, comenzando a las 5 UTC del primer día. Durante dicho período los vientos fueron flojos (media de 2,6 m·s⁻¹) y las temperaturas moderadas (valor medio de 17,0 °C).

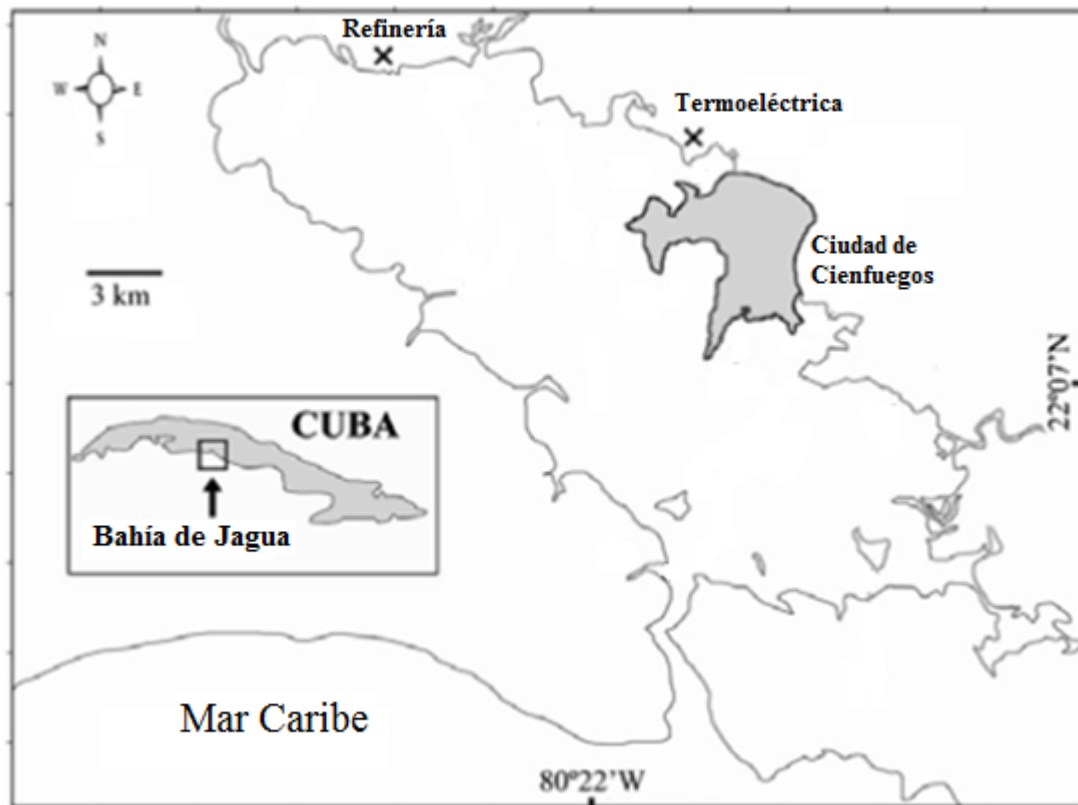


Figura 9.1 Localización y geográfica del área de estudio (Díaz-Asencio et al., 2009).

9.2 Modelización meteorológica

En esta aplicación el modelo CALMET se alimentó inicialmente con los resultados del modelo meteorológico WRF (Skamarock et al., 2008) sobre un área de $90 \times 90 \text{ km}^2$ abarcando la Bahía de Jagua, con la refinería existente en el centro (Figura 9.2). La resolución horizontal del dominio interior es de 3 km.

El modelo meteorológico de mesoescala WRF posee diversas opciones de modelización de la física y la dinámica atmosférica, cuya elección depende de la experiencia previa en el uso de esquemas más probados (generalmente, de uso operacional) frente a otros más novedosos; y del coste computacional de cada una de las opciones elegidas.

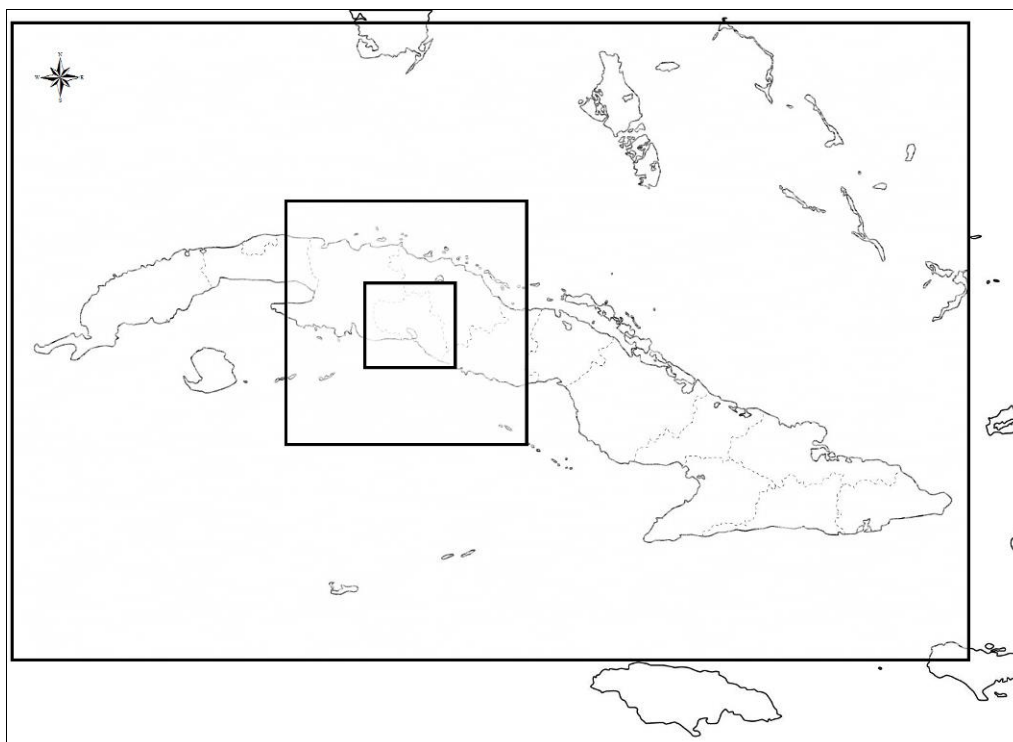


Figura 9.2 Los tres dominios anidados aplicados en la simulación con el modelo WRF sobre la Isla de Cuba, cuyo dominio interior alimenta al modelo CALMET.

En este trabajo se eligieron las opciones que resultarían más adecuadas para el objetivo de suministrar datos meteorológicos de entrada para la simulación de la calidad del aire, para lo que se consideró la singularidad del entorno caribeño de estudio. Así, se eligieron opciones equivalentes previamente probadas sobre la Isla de Cuba con el modelo MM5 (Mitrani et al., 2003) y configuraciones del modelo WRF aplicadas en países caribeños, como Venezuela (CvM, 2009). La configuración finalmente aplicada es la siguiente:

- a) Microfísica: WSM5, esquema WRF Single-Moment 5-class. Es una versión más sofisticada del esquema, que permite considera procesos multifase y agua superenfriada.
- b) Parametrización de nube: Esquema de conjuntos Grell-Devenyi para las dos mallas más externas, de menor resolución; sobre el dominio más interior no se aplicó ninguna parametrización de nubes, al ser las celdas de la malla inferiores a 4 km.
- c) Radiación de onda corta: Sobre el dominio más externo se seleccionó el modelo RRTMG, un esquema de radiación con el método de superposición aleatoria de nubes resuelta mediante la aproximación Montecarlo para la integración de la trayectoria de la radiación a través de la columna atmosférica (MCICA). Sobre los otros dos dominios se aplicó el esquema de Dudhia, consistente en una integración simple hacia abajo, que resulta eficiente en el cálculo de la reducción de la radiación descendente por la absorción con cielo despejado, nubes y dispersión.

- d) Radiación de onda larga: Nuevamente, se aplicó el modelo RRTMG sobre el dominio externo, ahora para onda larga. Sobre los otros dos dominios internos se seleccionó el modelo RRTM (Rapid Radiative Transfer Model), que resuelve de manera eficiente (mediante tablas look-up) la alteración de la radiación de onda larga debido a los gases traza y partículas atmosféricas considerando distintas bandas de frecuencia.
- e) Capa superficial: Analogía MM5, basado en Monin-Obukhov con subcapa viscosa de Carlson-Boland y funciones de analogía estándar incorporadas como tablas look-up.
- f) Superficie terrestre: Difusión térmica en 5 capas, considerando la temperatura del suelo.
- g) Capa límite atmosférica: Esquema Yonsei University (YSU). Esquema no local con tratamiento explícito del estrato de intrusión y perfil parabólico de K para la capa de mezcla inestable.

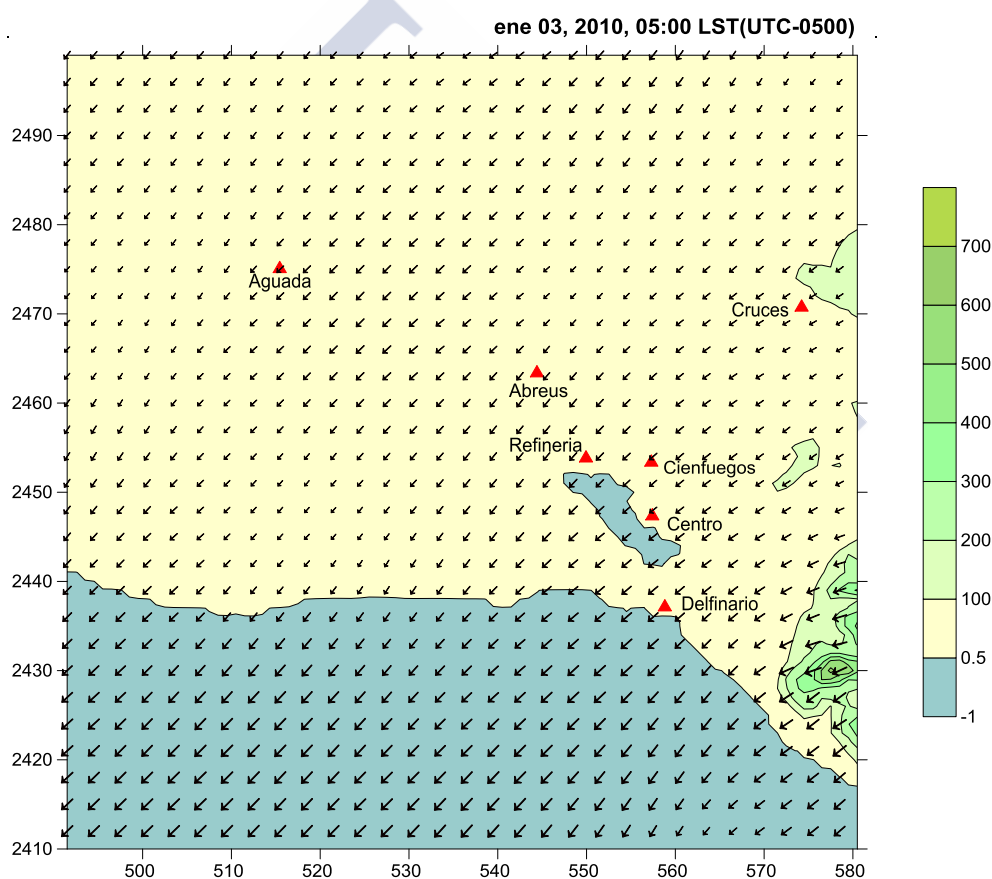


Figura 9.3 Dominio de simulación del modelo CALMET sobre la Bahía de Jagua, en el que se muestran: Línea de costa y principales accidentes geográficos y localización de las 7 estaciones meteorológicas en superficie existentes. Además se muestra el campo de vientos en superficie obtenido mediante la simulación CALMET Met_1 (solo con resultados WRF como datos de entrada) el 3/01/2010 a las 5:00 hora local.

En el caso del modelo CALMET, se empleó una resolución horizontal de $1 \times 1 \text{ km}^2$ sobre el dominio de $90 \times 90 \text{ km}^2$, (Figura 9.3) y los mismos niveles verticales empleados en el entorno de la C.T. As

Pontes (Figura 5.3). Se activó el módulo de diagnóstico de viento, adoptando para el resto de opciones del modelo los valores por defecto (Fox, 2009).

Tabla 9.1 Simulaciones y validaciones del modelo CALMET realizadas con diferentes datos de entrada y conjuntos de datos de validación, procedentes de las 7 estaciones meteorológicas en superficie existentes.

Simulación CALMET	Datos de entrada para CALMET	Estaciones meteorológicas para datos de entrada	Estaciones meteorológicas para validación
Met_1	Resultados WRF	-	7 (Todas)
Met_2	Resultados WRF y 2 estaciones meteorológicas	Cienfuegos, Aguada	Centro, Delfinario, Refinería, Cruces, Abreus
Met_3	Resultados WRF y 4 estaciones meteorológicas	Cienfuegos, Aguada, Delfinario, Cruces	Centro, Refinería, Abreus
Met_4	Resultados WRF y 5 estaciones meteorológicas	Cienfuegos, Aguada, Delfinario, Cruces, Abreus	Centro, Refinería

9.3 Validación meteorológica

En el dominio de simulación se disponía de 7 estaciones meteorológicas en superficie (Figura 9.3), capaces de suministrar promedios horarios de los parámetros meteorológicos estándar. Como datos de entrada al modelo CALMET, a los resultados de la simulación con el modelo WRF se añadieron en algunos casos medidas meteorológicas en superficie, para evaluar la capacidad de éstas para mejorar los resultados del modelo CALMET.

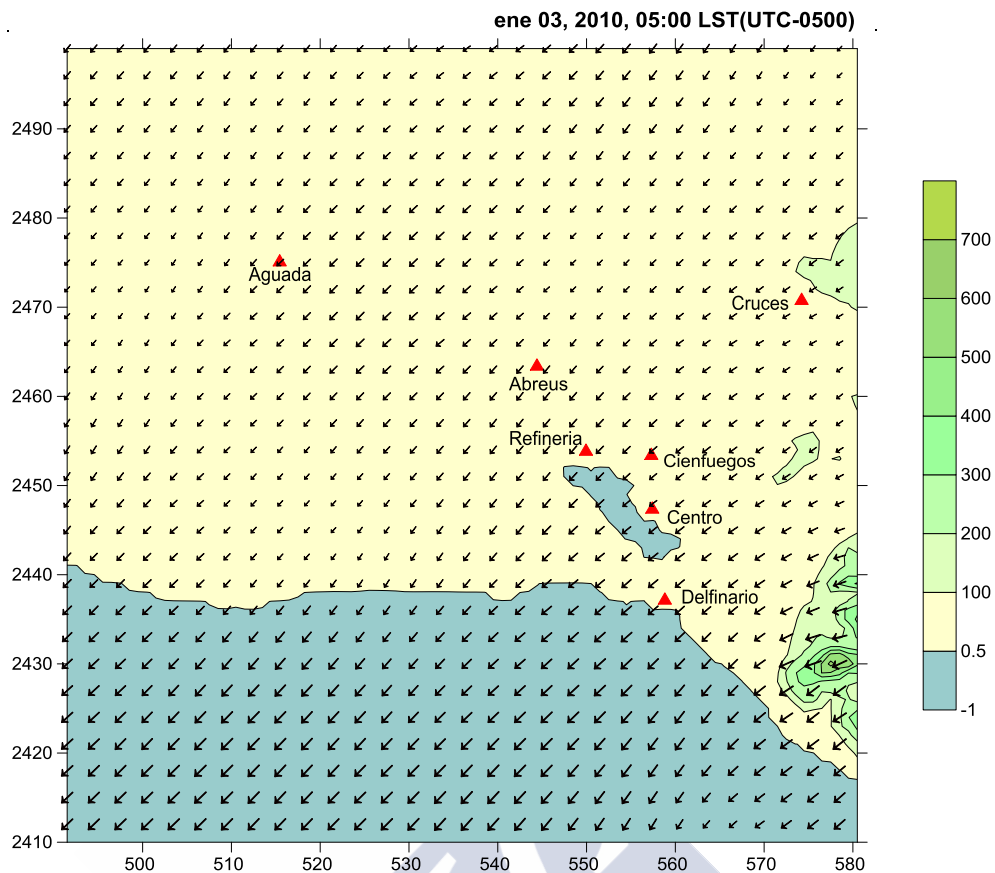


Figura 9.3 Dominio de simulación del modelo CALMET sobre la Bahía de Jagua, en el que se muestran: Línea de costa y principales accidentes geográficos y localización de las 7 estaciones meteorológicas en superficie existentes. Además se muestra el campo de vientos en superficie obtenido mediante la simulación CALMET Met_1 (solo con resultados WRF como datos de entrada) el 3/01/2010 a las 5:00 hora local.

En el caso del modelo CALMET, se empleó una resolución horizontal de $1 \times 1 \text{ km}^2$ sobre el dominio de $90 \times 90 \text{ km}^2$, (Figura 9.3) y los mismos niveles verticales empleados en el entorno de la C.T. As Pontes (Figura 5.3). Se activó el módulo de diagnóstico de viento, adoptando para el resto de opciones del modelo los valores por defecto (Fox, 2009).

Tabla 9.1 En el caso del modelo CALMET, se empleó una resolución horizontal de $1 \times 1 \text{ km}^2$ sobre el dominio de $90 \times 90 \text{ km}^2$, (Figura 9.3) y los mismos niveles verticales empleados en el entorno de la C.T. As Pontes (Figura 5.3). Se activó el módulo de diagnóstico de viento, adoptando para el resto de opciones del modelo los valores por defecto (Fox, 2009).

Se establecieron así cuatro configuraciones diferentes WRF/Medidas como datos de entrada al modelo CALMET (Tabla 9.1), dependiendo de las estaciones meteorológicas elegidas en cada configuración. Y empleando las estaciones cuyos datos no fueron utilizados como entrada a CALMET para la validación de la simulación del modelo CALMET.

Como resultado de las simulaciones con el modelo CALMET, incluso empleando solo los resultados del modelo WRF como datos de entrada, los flujos superficiales obtenidos (Figura 9.3)

son representativos de los patrones típicos en el dominio durante la estación seca (Barcia et al., 2009). Dado que el dominio es esencialmente llano las alteraciones del flujo se deben fundamentalmente a la influencia marina de la línea de costa.

Para la validación de cada simulación con el modelo CALMET se emplearon los estadísticos descritos en la Tabla 7.1 (Jiménez et al., 2006).

En relación con los resultados de velocidad de viento (Tabla 9.2), los estadísticos relativos presentan valores elevados, aunque hay que tener en cuenta que la velocidad media durante el período de simulación fue muy baja ($2,6 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$), aunque lógicamente los estadísticos disminuyen a medida que se incrementa el número de estaciones meteorológicas cuyos datos se emplean en el modelo CALMET (siempre distintas de las empleadas para la validación). Atendiendo a los estadísticos absolutos, las diferencias no son tan significativas, pero también se observan mejoras a medida que se emplean más estaciones meteorológicas para proporcionar datos de entrada al modelo.

Los estadísticos de temperatura en superficie (Tabla 9.3) muestran una dependencia mayor del conjunto de datos de entrada empleado en la simulación CALMET, con una mejora continua a medida que más estaciones meteorológicas suministran datos de entrada al modelo. Esto se debe a que los resultados de viento del modelo CALMET no están solamente basados en sus datos de entrada, sino también en las restricciones físicas aplicadas; sin embargo, los resultados de temperatura del modelo CALMET se derivan de interpolaciones espaciales de los datos de entrada empleados. En consecuencia, las temperaturas superficiales obtenidas con el modelo CALMET están esencialmente basadas en las medidas y sus mejores resultados se alcanzan incluyendo en sus datos de entrada las medidas de 5 estaciones meteorológicas (Met_4), como se esperaba. Incluso aunque las medidas en las estaciones de validación no se emplean como datos de entrada al modelo, lo que indica que la distribución de temperatura en el dominio es bastante homogénea.

Tabla 9.2 Resultados de los estadísticos de velocidad de viento superficial horaria (los absolutos, en $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) para las diferentes simulaciones con el modelo CALMET realizadas en el período de 15 días de validación sobre la Bahía de Jagua (Cuba).

Simulación CALMET	MB	MNBE (%)	MFB (%)	MAGE	MNGE (%)	NME (%)	NMB (%)	RMSE
Met_1	2,516	2554,485	84,383	2,674	2558,273	123,818	116,523	3,039
Met_2	1,203	770,687	47,395	1,835	788,922	79,462	52,101	2,214
Met_3	0,577	746,365	31,332	1,514	772,896	62,775	23,941	1,851
Met_4	-0,345	9,791	-9,369	1,082	50,123	36,114	-11,499	1,353

Tabla 9.3 Resultados de los estadísticos de temperatura superficial horaria (los absolutos, en °C) para las diferentes simulaciones con el modelo CALMET realizadas en el período de 15 días de validación sobre la Bahía de Jagua (Cuba).

Simulación CALMET	MB	MNBE (%)	MFB (%)	MAGE	MNGE (%)	NME (%)	NMB (%)	RMSE
Met_1	1,391	12,412	9,880	2,267	16,631	13,351	8,194	2,932
Met_2	-0,511	-2,647	-3,620	1,710	10,653	9,939	-2,971	2,137
Met_3	0,094	1,562	0,827	1,334	8,610	7,849	0,553	1,804
Met_4	-0,139	-0,301	-0,866	1,288	8,033	7,486	-0,806	1,650

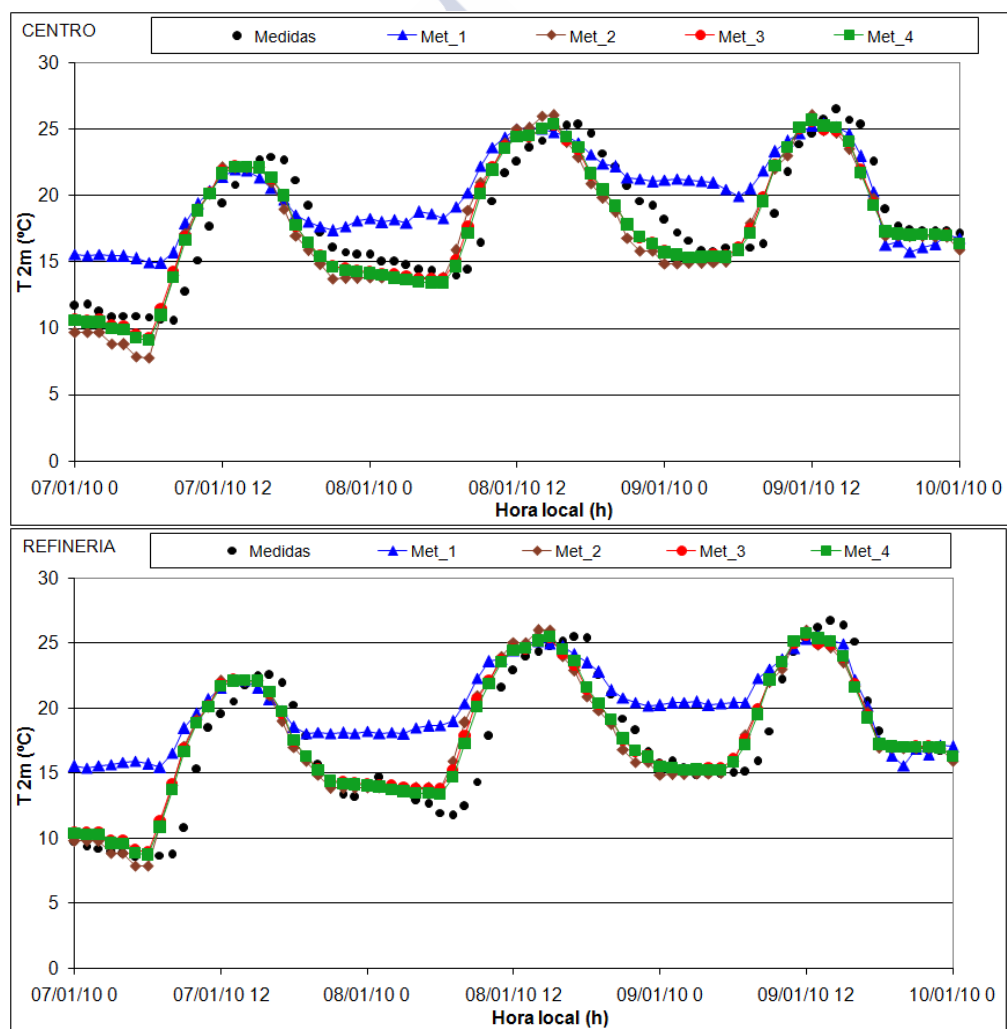


Figura 9.4 Temperatura superficial medida y simulada mediante el modelo CALMET (diferentes simulaciones) en las dos estaciones meteorológicas empleadas en la validación de todas las simulaciones: Centro y Refinería.

Como ejemplo de esta distribución homogénea, la Figura 9.4 muestra las series de temperatura a lo largo del período 8-10/01/2010, simuladas y medidas en las dos estaciones de validación que se emplean frente a todas las simulaciones: Centro y Refinería. La simulación Met_1 (solo con resultados WRF) sobreestima claramente las temperaturas nocturnas; añadiendo medidas de temperatura de otras estaciones como datos de entrada a CALMET (simulaciones Met_2, Met_3 y Met_4) se reducen notablemente las temperaturas nocturnas simuladas, aproximándolas a las medidas en ambas estaciones.

9.4 Modelización de la calidad del aire: Emisiones industriales

Aun cuando no se dispone de medidas de inmisión en el dominio de estudio sobre la bahía de Jagua, que permitiría la validación del modelo de dispersión atmosférica CALPUFF, dado el carácter regulatorio del mismo y los resultados alcanzados sobre el entorno de As Pontes se ha planteado la aplicación del modelo CALPUFF en el análisis de la dispersión de emisiones industriales en el período de estudio sobre Jagua, del 2 al 15 de Enero de 2010. Con especial interés en las emisiones de SO₂, por su magnitud significativa.

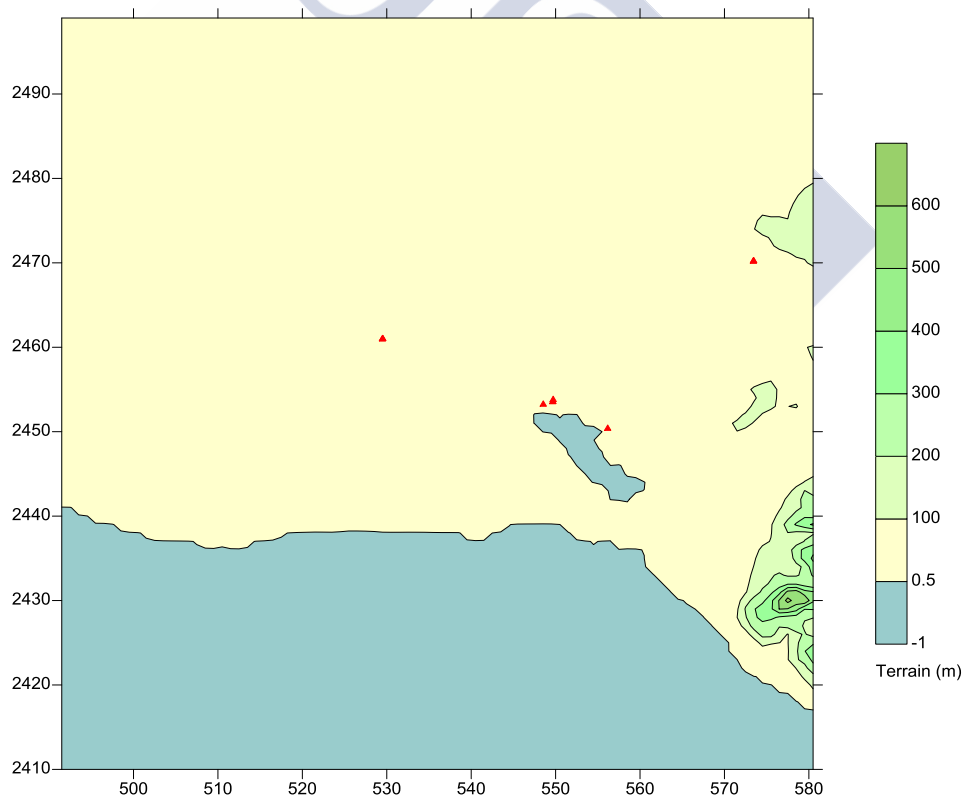


Figura 9.5 Mapa topográfico del dominio de simulación sobre la bahía de Jagua, con la ubicación de los focos industriales seleccionados (▲).

Para ello, se han considerado los focos emisores industriales cuya ubicación se muestra en la Figura 9.5.

La Refinería de Petróleo “Camilo Cienfuegos” mantiene la tecnología soviética original de la década de los 80 (Figura 9.6) y se encuentra ubicada al noroeste de la bahía de Jagua entre los ríos Damují y Salado. Actualmente la planta refina a su capacidad máxima un total de 61 000 m³/día. La cantidad de petróleo del tipo “Mesa 30” que entra al proceso es de 56 989 BPD (Barriles de Petróleo Diario) y del tipo “Merrey 6” 6 011 BPD, lo que equivale a un consumo diario de 65 000 barriles.



Figura 9.6 Vista general de la refinería de Petróleo “Camilo Cienfuegos”.



Figura 9.7 Vista general de la termoeléctrica “Carlos Manuel de Céspedes”.

Mientras, la termoeléctrica Carlos Manuel de Céspedes, de Cienfuegos está ubicada en el lóbulo Noreste de la bahía de Jagua, de cuyas aguas se sirve para su sistema de enfriamiento (Figura 9.7). Cuenta con dos bloques japoneses de 158 MW y se alimenta de fuel-oil suministrado desde la refinería de Cienfuegos a través de un oleoducto.

Por otro lado, los grupos electrógenos son máquinas que mueven un generador de electricidad mediante un motor de combustión interna. Los emplazamientos cercanos a los pueblos Cruces y Yaguaramas están conformados por tres baterías de cuatro motores, que expulsan los gases por una chimenea común para cada batería, cada uno de los 12 motores genera 1 700 kW. Las baterías de generación eléctrica, para su trabajo, se conectan en paralelo al Sistema Nacional y están diseñadas para trabajar con fuel oil como combustible.

Tabla 9.4 Datos de los focos emisores industriales seleccionados sobre la bahía de Jagua. Incluyendo los valores medios de sus emisiones atmosféricas durante el período de estudio.

Fuente	Altura (m)	Diámetro (m)	Velocidad de salida (m/s)	Temperatura de salida (K)	Tasa de emisión SO ₂ (g/s)
Refinería, chimenea principal	190	10	3,9	557	45,94
Refinería, caldera 1	30	1,25	2,11	447	2,46
Refinería, caldera 2-3	30	1,25	7,38	470	4,37
Refinería, antorcha	42	4,20	0,34	1273	168,53
Termoeléctrica	100	6	11,03	395	2254,5
Grupo electrógeno Yaguaramas	18	1,2	18,1	477	16,28
Grupo electrógeno Cruces	18	1,2	18,1	477	16,28

En la Tabla 9.4 se indica para cada foco emisor la altura de cada chimenea, su diámetro, el caudal total de gases de emisión, su temperatura y la concentración de SO₂ en emisión. Los datos de emisión, considerados estacionarios durante el período de simulación, se han obtenido a través de factores de emisión propuestos para Cuba (Meneses et al., 2015).

Tabla 9.5 Simulación del modelo CALMET realizada para alimentar el modelo CALPUFF.

Simulación CALMET	Datos de entrada para CALMET	Estaciones meteorológicas para datos de entrada
Met_5	Resultados WRF	7 (Todas)

9.5 Análisis de la dispersión de emisiones industriales

Se han analizado los mapas de inmisión de SO₂ horaria obtenidos con el modelo CALPUFF acoplado al modelo CALMET validado, con las mismas opciones CALPUFF aplicadas sobre el entorno de As Pontes. Además, en el caso del modelo CALMET se han empleado como datos de

entrada una nueva simulación Met_5 alimentada con WRF y medidas de todas las estaciones (Tabla 9.5) con el único propósito de alimentar el modelo de dispersión.

A modo de Anexo, en el CD-ROM adjunto se incluyen animaciones gráficas de la inmisión calculada con frecuencia horaria, para cada día de simulación. En general, existe una alta variabilidad temporal en la dirección que adoptan los penachos de contaminantes, debido a los continuos rolamientos del viento, lo que provoca una gran variabilidad en la dispersión de los contaminantes, además de la dispersión adicional generada por dicho rolamiento (Figura 9.8). Solo en algunos días del período (especialmente, 11 y 12 de Enero) se observan penachos con direcciones casi constantes y poco dispersos (Figura 9.9).

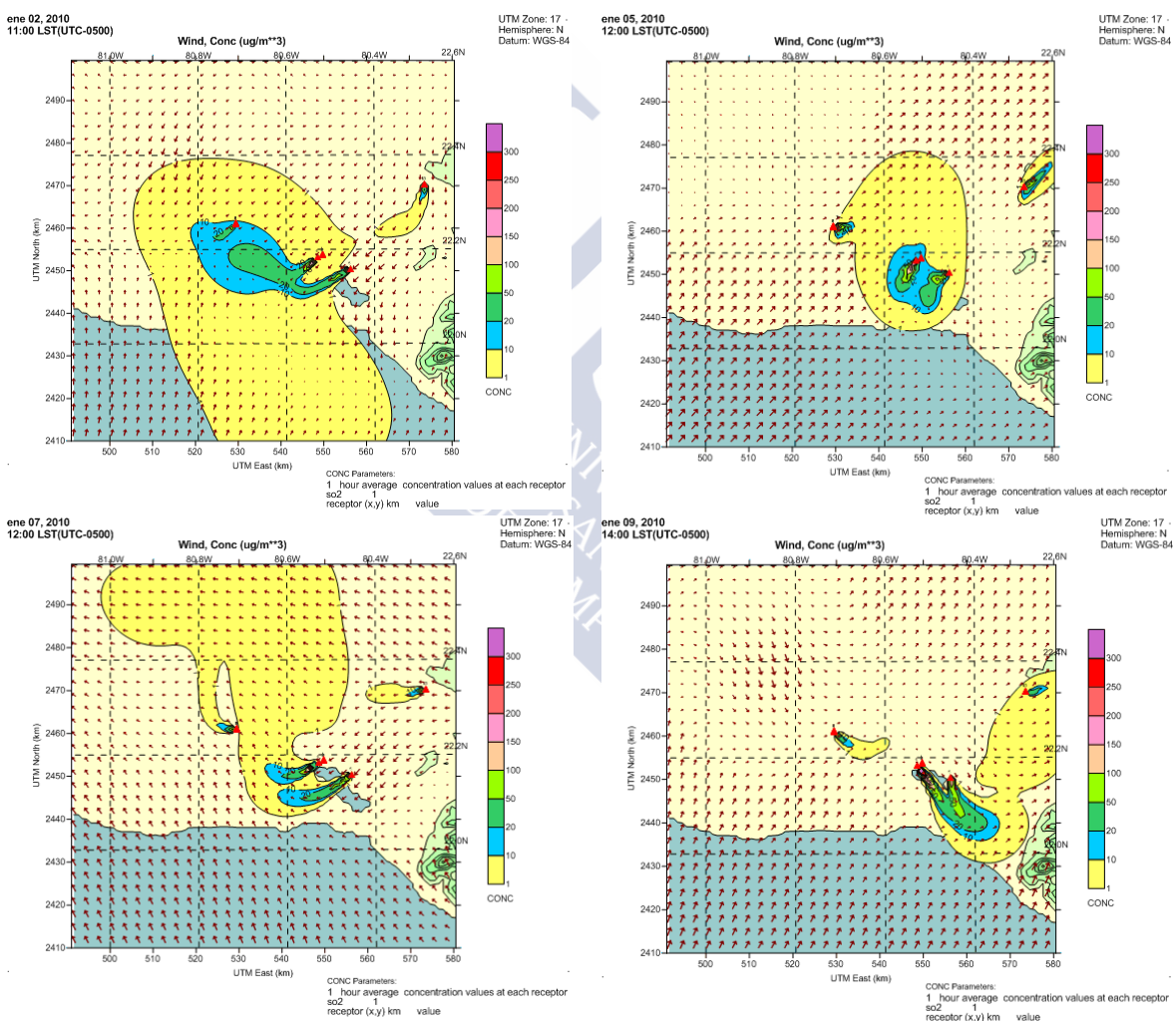


Figura 9.8 Mapas calculados por el modelo CALPUFF de inmisión horaria de SO₂ en algunos períodos afectados por el rolamiento del viento sobre la dispersión. Se muestra la dirección del viento calculada por CALMET a 10 m de altura.

Considerando los períodos alrededor de las horas para las que se calculan mayores valores de inmisión de SO₂, que se producen tanto durante el día como al anochecer, se analizan a

continuación las variaciones que experimenta la distribución de inmisión como consecuencia de la alta variabilidad meteorológica del período de estudio.

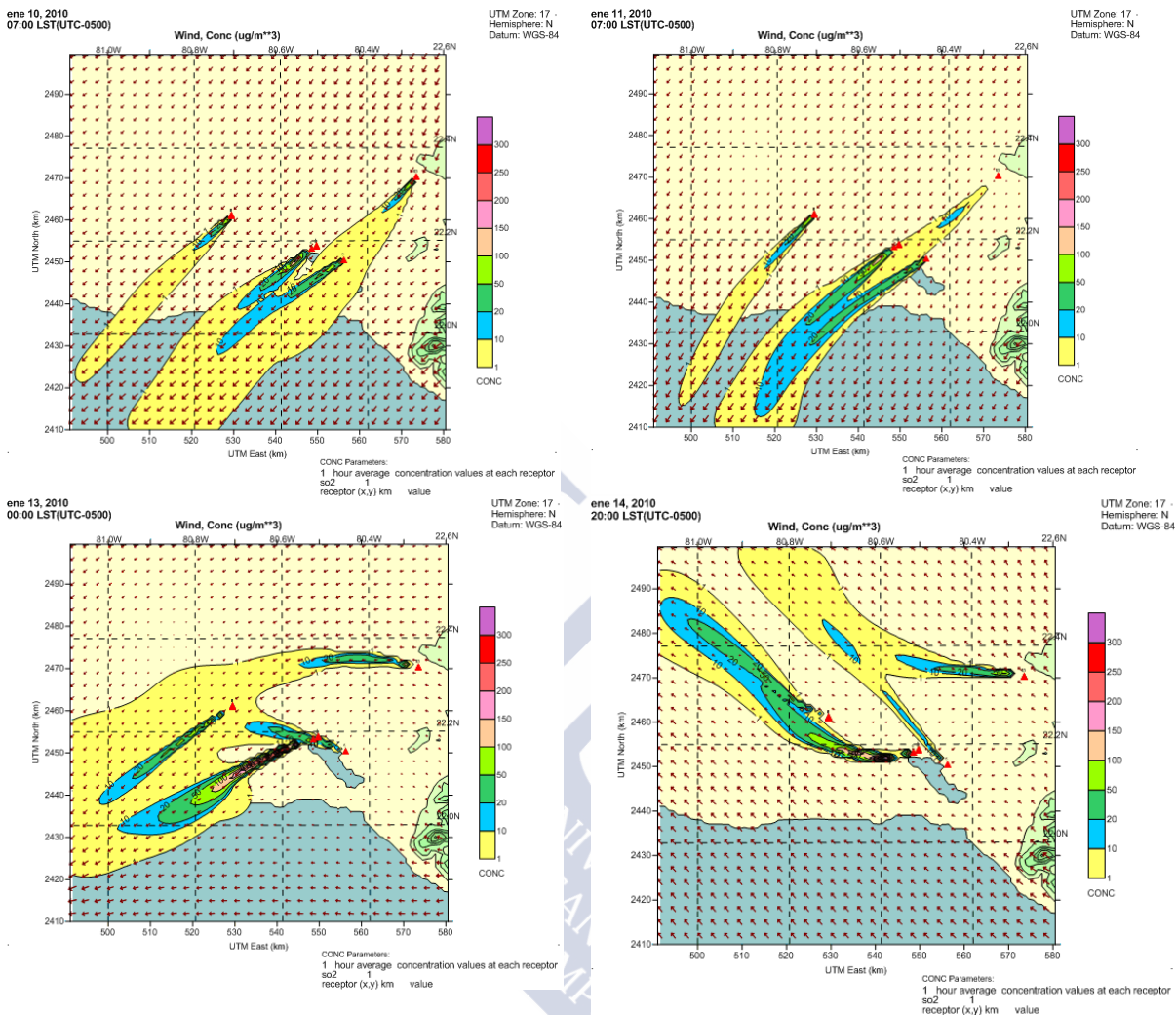


Figura 9.9 Mapas calculados por el modelo CALPUFF de inmisión horaria de SO₂ en algunos períodos con el transporte rectilíneo de los penachos emitidos. Se muestra la dirección del viento calculada por CALMET a 10 m de altura.

La Figura 9.10 muestra los mapas de inmisión obtenidos para el 4/Ene/2010 en tres instantes diferentes. Puede observarse que, partiendo a las 06:00 de penachos que generan inmisión moderada (menor de 150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) en dirección Sur, a las 18:00 dichos penachos siguen una dirección Norte, alcanzándose valores de inmisión superiores a los 200 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, que se incrementan por encima de los 300 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ a las 22:00. De una parte, el rolamiento del viento debido a la aparición de la brisa marina durante el día parece ir llevando las emisiones hacia el interior de la isla, al tiempo que se incrementa la inmisión a la caída de la tarde, lo que se explicaría por el descenso paulatino de la altura de la capa de mezcla durante la tarde y hasta la puesta de sol.

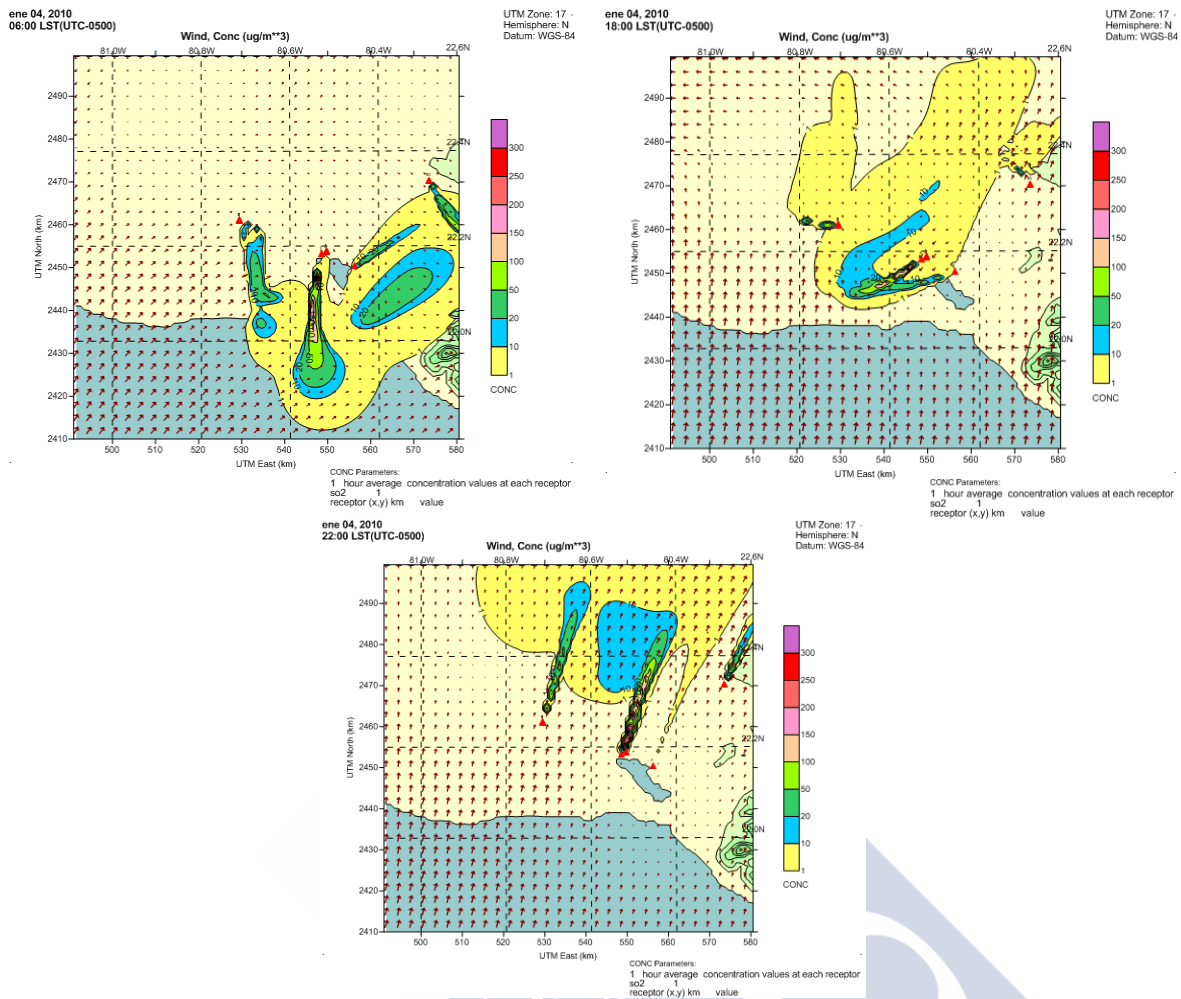


Figura 9.10 Mapas calculados por el modelo CALPUFF de inmisión horaria de SO₂ Día: 4/Ene/2010. Horas: 06:00, 18:00, 22:00. Se muestra la dirección del viento calculada por CALMET a 10 m de altura.

Un fenómeno totalmente opuesto se obtiene el 9/Ene/2010, un día en el que partiendo de penachos que se transportan en dirección Norte y a baja altura a las 00:00 (Figura 9.11), lo que genera valores de inmisión superiores a los 150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$; a partir del amanecer (09:00) se produce un período de aparente calma, con un incremento significativo de la inmisión que supera los 250 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, pasando por un rolamiento al Este y disminución de la inmisión a las 14:00 (probablemente, también por el aumento de la altura de capa de mezcla) y posterior rolamiento en dirección Sudeste, para continuar con los penachos en dirección Sur también y valores de inmisión similares; disminuyendo la inmisión a partir de las 21:00, ya en dirección Suroeste. En este caso no parece existir una influencia marina significativa, o bien ésta resulta apantallada por las continuas alteraciones de la dirección del viento que se observan durante ese día.

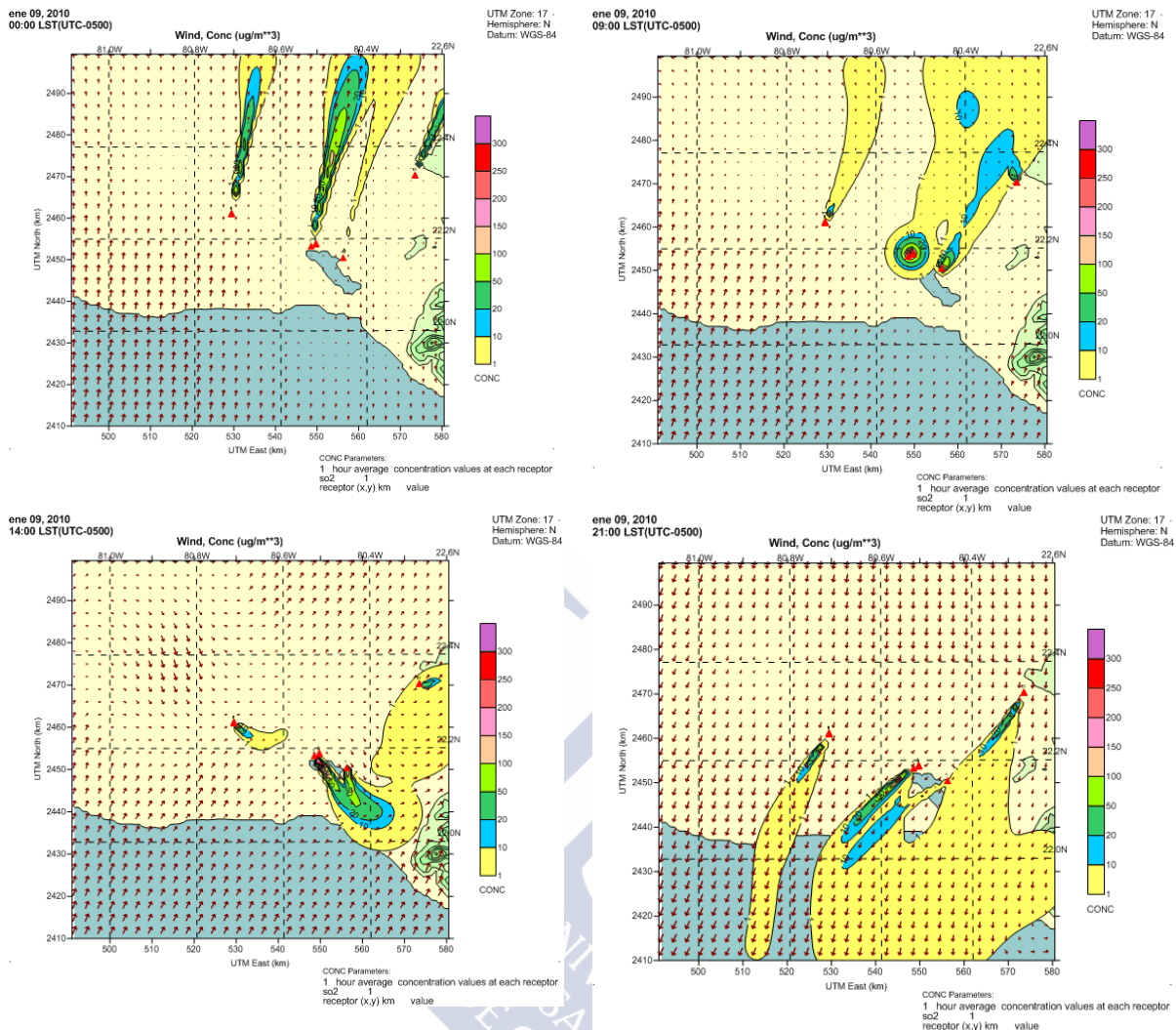


Figura 9.11 Mapas calculados por el modelo CALPUFF de inmisión horaria de SO₂ Día: 9/Ene/2010. Horas: 00:00, 09:00, 14:00, 21:00. Se muestra la dirección del viento calculada por CALMET a 10 m de altura.

Si bien los días con rolamientos significativos del viento son mayoría durante el período, favoreciendo en algunos casos el incremento de la inmisión, también se producen valores significativos de ésta en períodos con dirección constante del viento. Así, como se observa en la Figura 9.12, el 13/Enero/2010 comienza (00:00) con valores de inmisión superiores a 200 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, en dirección Oeste, rolando los penachos en dirección Suroeste a las 05:00, con lo que se produce una disminución de la inmisión que es aún mayor hacia las 12:00, de nuevo en dirección Oeste (ahora probablemente debido al aumento de la altura de capa de mezcla); para volver, sin embargo, a valores de inmisión superiores a 200 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ a las 19:00 en la misma dirección Oeste, por la previsible disminución de la capa de mezcla durante la tarde.

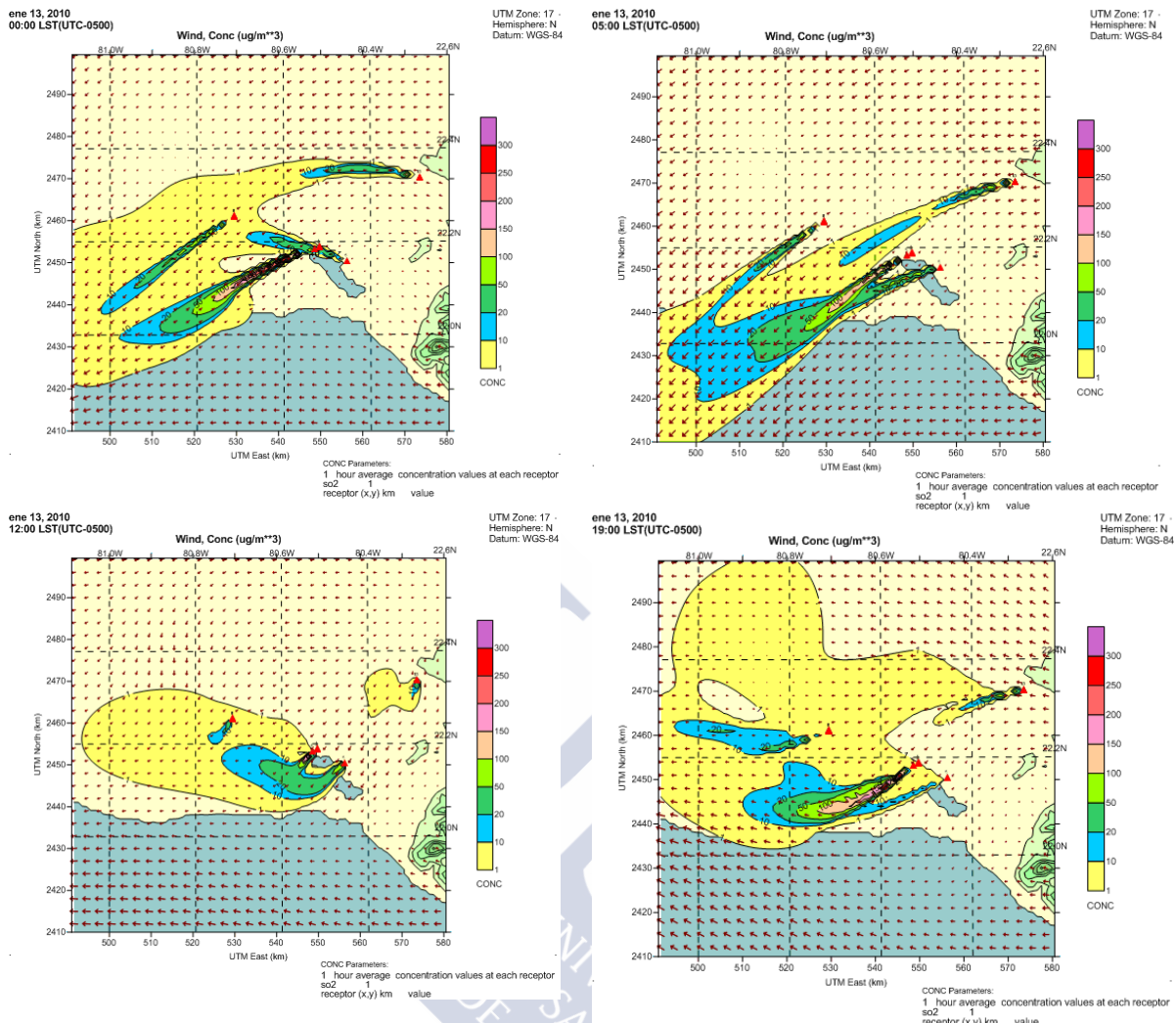


Figura 9.12 Mapas calculados por el modelo CALPUFF de inmisión horaria de SO₂ Día: 13/Ene/2010. Horas: 00:00, 05:00, 12:00, 19:00. Se muestra la dirección del viento calculada por CALMET a 10 m de altura.

En resumen, aún a falta de datos de inmisión que permitan validar los resultados del modelo CALPUFF, del análisis de los mismos se deduce la alta variabilidad de la inmisión de SO₂ que producen las emisiones industriales seleccionadas durante el período de estudio, tanto en cuanto a su magnitud como a su distribución espacial y temporal. Con especial incidencia de los rolamientos de viento, la altura de la capa de mezcla y, en ocasiones, la brisa marina.

CONCLUSIONES

Este trabajo de investigación se ha dirigido al estudio y aplicación de modelos meteorológicos y de dispersión atmosférica, de extensa aplicación en el estudio, prevención y control de la contaminación atmosférica primaria. En concreto, se ha llevado a cabo el estudio e implementación del sistema de modelos atmosféricos WRF/CALMET/CALPUFF en dos entornos diferentes (As Pontes, España; Jagua, Cuba), con focos emisores industriales reales (alguno con chimenea de gran altura), y se han validado cada uno de los modelos frente a las medidas de campo disponibles en cada entorno.

Como resultado de este trabajo, se han establecido las siguientes conclusiones:

1. En lo que se refiere a los modelos meteorológicos WRF (pronóstico) y CALMET (diagnóstico) ambos han mostrado un buen comportamiento en la estimación de la magnitud y dirección del viento en superficie, en los dos entornos de validación, As Pontes y Jagua.
2. Aún alimentado solo con los resultados del modelo WRF, en general el modelo CALMET (0,5 km de resolución horizontal) ha ofrecido mejores resultados que WRF (3 km de resolución horizontal) comparado con las medidas de campo disponibles.
3. A partir del ensayo de distintas combinaciones de datos de entrada al modelo CALMET (resultados WRF y/o medidas de campo en superficie y en altura) los mejores resultados se han alcanzado combinando los resultados WRF con las medidas meteorológicas en superficie disponibles. Incluso el uso de todas las medidas de campo disponibles como datos de entrada, excluyendo los resultados WRF, ha ofrecido peores resultados.
4. En cuanto a la temperatura en superficie, ha presentado mayores diferencias respecto a las medidas que el viento, mejorando progresivamente sus resultados con CALMET al añadir a los resultados WRF como datos de entrada medidas meteorológicas de estaciones no empleadas en la validación.
5. Los resultados del modelo CALMET en superficie han mejorado sensiblemente al usar como datos de entrada a CALMET los resultados del modelo WRF con las medidas en superficie disponibles.
6. Comparadas con las estimaciones de altura de capa de mezcla basadas en el gradiente de R_i calculado a partir de los datos de los radiosondeos disponibles, las estimaciones de altura de capa de mezcla obtenidas por el modelo CALMET (0.5 km de resolución) han sido muy similares a las de los radiosondeos, y algo mejores que las obtenidas por el modelo WRF (3 km de resolución); aun cuando en ambos modelos se empleasen el mismo número de niveles de cálculo dentro de la capa límite atmosférica.

7. Esto se ha observado también mediante la comparación gráfica de algunos perfiles de temperatura, en los que se observó la presencia de inversiones térmicas muy similares en los resultados de ambos modelos y también en las medidas de radiosondeos disponibles.
8. Comparado con los radiosondeos próximos al entorno de As Pontes (AEMET, MeteoGalicia) el viento en altura ha mostrado bastantes concordancias, si bien la baja intensidad de viento a algunas horas y el escaso número de datos disponibles (niveles en altura) en el radiosondeo de A Coruña (AEMET) hizo difícil la comparación.
9. En lo que se refiere a la estimación de la inmisión del contaminante primario más detectado en el entorno de As Pontes, el modelo CALPUFF alimentado con los mejores resultados del modelo CALMET y la mejor descripción del foco emisor ha ofrecido buenas estimaciones de la magnitud y ubicación de los valores máximos de inmisión (impacto máximo), comparados con los deducidos a partir de la interpolación de medidas experimentales. Con algunas desviaciones en la distancia desde el foco emisor hasta el impacto máximo, que apuntan a una sobreestimación ocasional de la altura de transporte del penacho.
10. La estimación de la dispersión de penachos de contaminantes atmosféricos primarios de origen industrial sobre el entorno de Jagua ha mostrado una alta variabilidad de la misma, muy afectada también por los continuos rolamientos del viento.

Como resumen de estas conclusiones, es de destacar que el modelo CALMET ha demostrado su capacidad para obtener buenos y mejores resultados que el modelo WRF en los parámetros de la capa límite atmosférica que afectan a la dispersión de contaminantes; aun alimentándose exclusivamente con resultados del modelo WRF. Al tiempo que el modelo CALPUFF, alimentado con los mejores resultados del modelo CALMET, ofrece buenos resultados en la estimación de la inmisión de contaminantes primarios generada por focos emisores industriales, con chimeneas de gran altura. Ambos modelos, CALMET y CALPUFF, han ofrecido resultados en tiempos de cálculo reducidos sobre una plataforma PC convencional. Lo que demuestra su capacidad de aplicación operacional en el control de la contaminación atmosférica primaria procedente de focos industriales reales.

Estas conclusiones derivan también en la posibilidad de desarrollar nuevos trabajos, como pueden ser:

- A. La aplicación operativa del sistema de modelos WRF/CALMET/CALPUFF en distintos entornos industriales, como complemento/sustitución parcial de las redes de calidad del aire.
- B. La mejora de los resultados obtenidos por el modelo CALMET, mediante el ajuste fino de algunos parámetros empíricos incluidos en el mismo. El parámetro TERRAD, relacionado con la complejidad topográfica de cada entorno, es un buen candidato para ello.

- C. La mejora de los resultados obtenidos por el modelo CALPUFF, mediante la incorporación de procesos de transformación química de los contaminantes primarios. Teniendo en cuenta que este modelo solo permite aplicar cinéticas de primer orden.
- D. El uso de otras diferentes condiciones iniciales y contorno en el modelo WRF, que definen el flujo sinóptico, lo que condiciona los flujos predominantes en la capa límite atmosférica.





CONCLUSIONS

This work has been directed to the study and application of meteorological and atmospheric dispersion models, of extensive application in the study, for the prevention and control of primary air pollution. Specifically, it has carried out the study and implementation of the system of atmospheric models WRF/CALMET/CALPUFF in two different environments (As Pontes, Spain; Jagua, Cuba), with real industrial emission sources (with high stacks) and each model has been validated with field measurements in the corresponding surroundings.

As a result of this work, we have established the following conclusions,

1. Regarding the WRF (forecast) and CALMET (diagnosis) weather models both have shown good performance when estimating the magnitude and direction of surface wind in the two validation environments, As Pontes and Jagua.
2. Even fed only with WRF model results, CALMET in general ($0.5 \times 0.5 \text{ km}^2$ horizontal resolution) offered better results than WRF ($3 \times 3 \text{ km}^2$ horizontal resolution) compared to the field measurements available.
3. From testing different combinations of input data to CALMET (WRF results and/or field measurements in surface and height) the best results are achieved by combining the results of WRF with surface meteorological measurements available. CALMET has offered worse results even using all available field measurements as input data and excluding WRF results.
4. Surface temperature has presented major differences than wind; gradually improving its results with CALMET adding to WRF results as input data, meteorological surface measurements not used in the validation.
5. The results of CALMET at surface level have significantly improved by using as input the WRF model results with available surface measurements.
6. The comparison of mixing layer height estimations based on Ri gradient calculated from rawinsonde data available against estimations of CALMET mixing layer height obtained by this model ($0.5 \times 0.5 \text{ km}^2$ resolution) shows values very similar to those of the rawinsonde, and somehow better than those obtained by WRF ($3 \times 3 \text{ km}^2$ resolution); although in both models the same number of levels of calculation in the atmospheric boundary layer were used.
7. This is also observed by visual comparison of some temperature profiles, in which the presence of very similar inversions was observed in the results of both models and also in the rawinsonde measurements available.
8. Compared the rawinsondes data near to As Pontes environment (AEMET, MeteoGalicia), aloft wind has shown enough matches, while the low intensity of wind to a few hours and

the small number of data (at planetary boundary layer levels) in the rawinsonde Coruña (AEMET) made difficult the comparisons.

9. Respect to the glc estimation of the primary pollutant detected in the vicinity of As Pontes, CALPUFF fed with the best CALMET results and the best description of the emitting source has provided good estimates of the magnitude and location of the maximum of glc values (maximum impact) compared with those deduced from experimental measurements interpolation. With some variations in the distance from the source to the location of maximum impact, pointing to an occasional overestimation of the transport height of the plume.
10. Estimation of the dispersion of plumes of primary air pollutants from industrial sources on the Jagua environment has shown a high variability, also heavily affected by the continuing wind shear.

To summarize these findings, it is noteworthy that the CALMET has demonstrated its capacity to obtain good and better results than WRF in the parameters such as the planetary boundary layer depth that affects pollutants dispersion; even feeding it exclusively with WRF results. While CALPUFF, fed with the best CALMET results provides good results in the estimation of the emission of primary pollutants generated by industrial emission sources, with high stacks. Both models, CALMET and CALPUFF, offer results in reduced-time-calculation on a conventional PC platform; and showing their ability to operational application in controlling primary air pollution from real industrial sources.

These findings also result in the possibility of developing new work, such as,

- A. The operating system application WRF/CALMET/CALPUFF models in various industrial environments, as complementing/partial substitution of air quality networks.
- B. The improvement of the results obtained by CALMET by fine fixing of some empirical parameters included therein. TERRAD related to the topographic complexity of the environment, is a good candidate for it.
- C. The improvement of the results obtained by CALPUFF, incorporating chemical transformation processes of primary pollutants. As right now this Lagrangian model only allows applying first-order kinetics.
- D. The use of other different initial conditions and boundary as WRF input, defining the synoptic flow, and usually determine the prevailing flow in the planetary boundary layer.

BIBLIOGRAFIA

- Abdul-Wahab, S., Sappurd, A., Al-Damkhi, A. (2011). Application of California Puff (CALPUFF) model: a case study for Oman. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 13(1), 177-189.
- Ackermann, I.J., Hass, H., Memmesheimer, M., Ebel, A., Binkowski, F.S., Shankar, U., (1998). MADE: Modal Aerosol Dynamics Model for Europe; development and first applications. *Atmospheric Environment* 32, 2981-2999.
- Adame, J. A., Hernandez-Ceballos, M. A., Bolívar, J. P., De la Morena, B. (2012). Assessment of an air pollution event in the southwestern Iberian Peninsula. *Atmospheric Environment*, 55, 245-256.
- Allwine, K. J., & Whiteman, C. D. (1985). MELSAR: a mesoscale air quality model for complex terrain. Volume 1. Overview, technical description and user's guide (No. PNL-5460-Vol. 1). Pacific Northwest Labs., Richland, WA (USA).
- Allwine, K. J., Dabberdt, W. F., Simmons, L. L. (1998). Peer review of the CALMET/CALPUFF modeling system. Contract, (68-D), 98-092.
- Ames, M.R., Zemba, S.G., Yamartino, R.J., Valberg, P.A. and Green, L.C. (2002). Comments on: Using CALPUFF to evaluate the impacts of power plant emissions in Illinois: model sensitivity and implications. *Atmospheric Environment* 36, 2263–2265.
- Andersson, C., Langner, J., Bergström, R. (2007). Interannual variation and trends in air pollution over Europe due to climate variability during 1958–2001 simulated with a regional CTM coupled to the ERA40 reanalysis. *Tellus B*, 59(1), 77-98.
- Andronopoulos, S., Davakis, E., Bartzis, J.G., Kovalets, I. (2010). RODOS meteorological pre-processor and atmospheric dispersion model DIPCOT: a model suite for radionuclides dispersion in complex terrain. *Radioprotection*, 45(05), S77-S84.
- Anfossi, D., Desiato, F., Tinarelli, G., Brusasca, G., Ferrero, E., Sacchetti, D. (1998). TRANSALP 1989 experimental campaign—II. Simulation of a tracer experiment with Lagrangian particle models. *Atmospheric Environment* 32(7), 1157–1166.
- Anthes, R. A., Hsie, E. Y., Kuo, Y. H. (1987). Description of the Penn State/NCAR mesoscale model version 4 (MM4) (p. 66). Boulder, CO.: NCAR.
- Aria Technologies (2007). Recuperado de: [<http://www.aria.fr/english/>].

- Arya, S. P. S. (1984). Parametric relations for the atmospheric boundary layer. In *Boundary Layer Structure* (pp. 57-73). Springer Netherlands.
- Astitha, M., Kallos, G., Spyrou, C., O'Hirok, W., Lelieveld, J., Denier van der Gon, H. A. C. (2010). Modelling the chemically aged and mixed aerosols over the eastern central Atlantic Ocean—potential impacts. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(13), 5797-5822.
- ASTM (2000). Standard guide for statistical evaluation of atmospheric dispersion model performance. American Society for Testing and Materials, Designation D 6589-00. ASTM, 100 Barr Harbor Drive, West Conshohocken, PA 19428-2959.
- Bærentsen, J. H., & Berkowicz, R. (1984). Monte Carlo simulation of plume dispersion in the convective boundary layer. *Atmospheric Environment* (1967), 18(4), 701-712.
- Bara, B. M., Wilson, D. J., Zelt, B. W. (1992). Concentration fluctuation profiles from a water channel simulation of a ground-level release. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 26(6), 1053-1062.
- Barcia, S.; Orbe, G.; Regueira, V.; Sánchez, R.; Núñez, E.; Rodríguez, C.; Hernández, A.L.; Angulo, R.; Ceballo, R.; Millán, J. (2009) - Guía Climática de la Provincia Cienfuegos. 58p., Centro Meteorológico Provincial de Cienfuegos, INSMET, Cienfuegos, Cuba.
- Baxter, P.J., (2000). Gases. In: P.J. Baxter, P.H. Adams, T.-C. Aw, A. Cockcroft and J.M. Harrington (Editors), *Hunter's Diseases of Occupations*. Arnold, London, pp. 123-178.
- Bei, N., Li, G., Zavala, M., Barrera, H., Torres, R., Grutter, M., Gutiérrez, W., García, M., Ruiz-Suarez, L. G., Ortinez, A., Guitierrez, Y., Alvarado, C., Flores, I. and Molina, L. T. (2013). Meteorological overview and plume transport patterns during Cal-Mex 2010. *Atmospheric Environment*, 70, 477-489.
- Bellasio, R., Maffei, G., Scire, J. S., Longoni, M. G., Bianconi, R., Quaranta, N. (2005). Algorithms to account for topographic shading effects and surface temperature dependence on terrain elevation in diagnostic meteorological models. *Boundary-layer meteorology*, 114(3), 595-614.
- Benkley, C. W., & Bass, A. (1979). Development of Mesoscale Air Quality Simulation Model: Vol. 3. User's Guide to MESOPUFF. EPA-600/7-80-058. US Environmental Protection Agency, Atmospheric Research and Exposure Assessment Laboratory, Research Triangle Park, NC.
- Bermúdez Cela, J.L., Fernández de Castro, B.M., Souto González, J.A. (2002). Sistemas de control ambiental suplementario da contaminación atmosférica. *Revista Galega de Economía*. 11, 77 – 88.

Blackadar, A. K., & Tennekes, H. (1968). Asymptotic similarity in neutral barotropic planetary boundary layers. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 25(6), 1015-1020.

BOE (2008). Real Decreto 186/2008 de 8 de febrero de 2008.

Boise State University [BSU] (2010). Forecasting for Wind Energy Grid Integration.

Borge, R., López, J., Lumbreras, J., Narros, A., Rodríguez, E. (2010). Influence of boundary conditions on CMAQ simulations over the Iberian Peninsula. *Atmospheric Environment*, 44(23), 2681-2695.

Borrego, C., Monteiro, A., Ferreira, J., Moraes, M. R., Carvalho, A., Ribeiro, I., Miranda, A. I., Moreira, D. M. (2010). Modelling the photochemical pollution over the metropolitan area of Porto Alegre, Brazil. *Atmospheric Environment*, 44(3), 370-380.

Borrego, C., Souto, J. A., Monteiro, A., Dios, M., Rodríguez, A., Ferreira, J., Saavedra, S., Casares, J. J., Miranda, A. I. (2012). The role of transboundary air pollution over Galicia and North Portugal area. *Environmental Science and Pollution Research*, 20(5), 2924-2936.

Bowers, J. F., & Anderson, A. J. (1981). An evaluation study for the Industrial Source Complex (ISC) dispersion model. US Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards.

Briggs, G. A. (1969). Plume Rise, US Atomic Energy Commission, Oak Ridge, Tennessee. Available as TID-25075 from Clearinghouse for Federal Scientific and Technical Information, NBS, Springfield, Va.

Briggs, G. A. (1973). Diffusion estimates for small emissions (Draft). Air Resources Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory. ATOL, (79).

Briggs, G. A. (1975). Plume rise predictions, Lectures on Air Pollution and Environment Impact Analysis. Am. Meteorol. Soc., Boston, USA, 10.

Briggs, G. A. (1979). Analytic Modeling of drainage flows. Draft document, Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory, NOAA.

Briggs GA (1981). Canopy effects on predicted drainage flow characteristics and comparison with observations. In: Proc. fifth AMS symposium on turbulence and diffusion, Atlanta, GA. American Meteorological Society, Boston

Briggs, G. A. (1985). Analytical parameterizations of diffusion: The convective boundary layer. *Journal of climate and applied meteorology*, 24(11), 1167-1186.

- Brighton, P. W. M. (1978). Strongly stratified flow past three-dimensional obstacles. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 104(440), 289-307.
- Byun, D. W., & Ching, J. K. S. (Eds.). (1999). Science algorithms of the EPA Models-3 community multiscale air quality (CMAQ) modeling system.
- Britter, R. E., Hunt, J. C. R., Richards, K. J. (1981). Air flow over a two-dimensional hill: Studies of velocity speed-up, roughness effects and turbulence. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 107(451), 91-110.
- Brost, R. A., & Wyngaard, J. C. (1978). A model study of the stably stratified planetary boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 35(8), 1427-1440.
- Cao, X., Roy, G., Andrews, W. S. (2010). Modelling the concentration distributions of aerosol puffs using artificial neural networks. *Boundary-layer meteorology*, 136(1), 83-103.
- Carmichael, G. R., & Peters, L. K. (1986). A second generation model for regional-scale transport/chemistry/deposition. *Atmospheric Environment* (1967), 20(1), 173-188.
- Carmichael, G. R., Peters, L. K., Saylor, R. D. (1991). The STEM-II regional scale acid deposition and photochemical oxidant model—I. An overview of model development and applications. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 25(10), 2077-2090.
- Carnevale, C., Gabusi, V., Volta, M., (2006). POEMPM: an emission model for secondary pollution control scenarios. *Environmental Modelling and Software* 21, 320–329.
- Carnevale, C., Decanini, E., Volta, M., (2008). Design and validation of a multiphase 3D model to simulate tropospheric pollution. *Science of the Total Environment* 390(1), 166–176.
- Carson, D. J. (1973). The development of a dry inversion-capped convectively unstable boundary layer. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 99(421), 450-467.
- Carvalho, J. D. C., Degrazia, G. A., Anfossi, D., De Campos, C. R. J., Roberti, D. R., & Kerr, A. S. (2002a). Lagrangian stochastic dispersion modelling for the simulation of the release of contaminants from tall and low sources. *Meteorologische Zeitschrift*, 11(2), 89-97.
- Carvalho, A., Ferreira, J., Arreola, J. L., Carvalho, A. C., Miranda, A. I., Alonso, S., Borrego, C. (2002b). Sensitivity tests of MM5 modelling system over a coastal region in Portugal. In *Air Pollution-International Conference- (Vol. 10, pp. 503-512)*. WIT PRESS.

- Carvalho, A., Monteiro, A., Ribeiro, I., Tchepel, O., Miranda, A. I., Borrego, C., Saavedra, S., Souto, J.A., Casares, J. J. (2010). High ozone levels in the northeast of Portugal: Analysis and characterization. *Atmospheric Environment*, 44(8), 1020-1031.
- Caughey, S. J. (1982). Observed characteristics of the atmospheric boundary layer. In *Atmospheric turbulence and air pollution modelling* (pp. 107-158). Springer Netherlands.
- Chandrasekar, A., Philbrick, C. R., Clark, R., Doddridge, B., and Georgopoulos, P. (2003). Evaluating the performance of a computationally efficient MM5/CALMET system for developing wind field inputs to air quality models. *Atmospheric Environment* 37(23), 3267-3276.
- Chang, J. C., Franzese, P., Chayantrakom, K., Hanna, S. R. (2003). Evaluations of CALPUFF, HPAC, and VLSTRACK with two mesoscale field datasets. *Journal of Applied Meteorology*, 42(4), 453-466.
- Chang, J. C., & Hanna, S. R. (2004). Air quality model performance evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 87(1-3), 167-196.
- Chang, J. C., & Hanna, S. R. (2005). Technical descriptions and user's guide for the BOOT statistical model evaluation software package.
- Chemel, C., Sokhi, R. S., Yu, Y., Hayman, G. D., Vincent, K. J., Dore, A. J., Tang, Y. S., Prain, H. D., Fisher, B. E. A. (2010). Evaluation of a CMAQ simulation at high resolution over the UK for the calendar year 2003. *Atmospheric Environment*, 44(24), 2927-2939.
- Ching, J. K. S. (1985). Urban-scale variations of turbulence parameters and fluxes. *Boundary-Layer Meteorology*, 33(4), 335-361.
- Cohan, D. S., Koo, B., Yarwood, G. (2010). Influence of uncertain reaction rates on ozone sensitivity to emissions. *Atmospheric Environment*, 44(26), 3101-3109.
- Cohen, J., Cook, R., Bailey, C. R., Carr, E. (2005). Relationship between motor vehicle emissions of hazardous pollutants, roadway proximity, and ambient concentrations in Portland, Oregon. *Environmental Modelling & Software*, 20(1), 7-12.
- Collazo Aranda, A. E. (2011). Análisis de la contaminación transfronteriza y local de contaminantes gaseosos precursores de la deposición ácida húmeda y formación de ozono en Cuba. Tesis de Magíster en gestión y planificación ambiental. Universidad de Chile. 2011
- Costa, A., Macedonio, G., Folch, A., (2006). A three-dimensional Eulerian model for transport and deposition of volcanic ashes. *Earth and Planetary Science Letters* 241 (3-4), 634-647.

Cui, H., Yao, R., Xu, X., Xin, C. (2011). A tracer experiment study to evaluate the CALPUFF real time application in a near-field complex terrain setting. *Atmospheric Environment*, 45(39), 7525-7532.

Curci, G., Cinque, G., Tuccella, P., Visconti, G., Verdecchia, M., Iarlori, M., Rizi, V. (2012). Modelling air quality impact of a biomass energy power plant in a mountain valley in Central Italy. *Atmospheric Environment*, 62, 248-255.

CvM (Centro virtual de Meteorología), 2009. Recuperado de: [<http://met.ivic.gob.ve/cvm>].

D'Amours, R., Malo, A., Servranckx, R., Bensimon, D., Trudel, S., Gauthier-Bilodeau, J. P. (2010). Application of the atmospheric Lagrangian particle dispersion model MLDP0 to the 2008 eruptions of Okmok and Kasatochi volcanoes. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* (1984–2012), 115 (D2).

Davakis, E., Deligiannis, P., Souto, J.A. (1998). Dispersion Modelling Intercomparison Exercise. Proceedings of 5th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Rhodes, Greece.

Davis, R. E., Normile, C. P., Sitka, L., Hondula, D. M., Knight, D. B., Gawtry, S. P., Stenger, P. J. (2010). A comparison of trajectory and air mass approaches to examine ozone variability. *Atmospheric Environment*, 44(1), 64-74.

De Baas, A. F., Van Dop, H., Nieuwstadt, F. (1986). An application of the Langevin equation for inhomogeneous conditions to dispersion in a convective boundary layer. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 112(471), 165-180.

De Castro, Miguel (2001). Calibración de modelos de dispersión atmosférica: Aplicación a un modelo de estructuras adaptables. Tesis doctoral. Universidad de Santiago de Compostela.

Deardorff, J. W. (1974). Three-dimensional numerical study of the height and mean structure of a heated planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 7(1), 81-106.

Deardorff, J. W., & Willis, G. E. (1975). A parameterization of diffusion into the mixed layer. *Journal of Applied Meteorology*, 14(8), 1451-1458.

Deardorff, J. W., & Willis, G. E. (1982). Ground-level concentrations due to fumigation into an entraining mixed layer. *Atmospheric Environment* (1967), 16(5), 1159-1170.

Díaz-Asencio, L., Armenteros, M., Díaz-Asencio, M., Fernández-Garcés, R., Gómez-Batista, M. and Alonso-Hernández, C. (2009) 'Spatial and temporal variations of meiofaunal communities in Cienfuegos Bay, Cuba', *Revista de biología marina y oceanografía*, 44(1), 13-22.

Dios, M., Souto, J. A., Casares, J. J. (2013). Experimental development of CO₂, SO₂ and NO_x emission factors for mixed lignite and subbituminous coal-fired power plant. *Energy*, 53, 40-51.

Djalalova, I., Wilczak, J., McKeen, S., Grell, G., Peckham, S., Pagowski, M., DelleMonache, L., McQueen, J., Tang, Y., Lee, P., McHenry, J., Gong, W., Bouchet, V., Mathur, R. (2010). Ensemble and bias-correction techniques for air quality model forecasts of surface O₃ and PM_{2.5} during the TEXAQS-II experiment of 2006. *Atmospheric Environment*, 44(4), 455-467.

Douglas, S., & Kessler, R. (1988). User's guide to the diagnostic wind field model (Version 1.0). Systems Applications. Inc., San Rafael, CA, 48.

Draxler, R. R. (1976). Determination of atmospheric diffusion parameters. *Atmospheric Environment* (1967), 10(2), 99-105.

Draxler, R. R., & Hess, G. D. (1998). An overview of the HYSPLIT_4 modelling system for trajectories. *Australian Meteorological Magazine*, 47(4).

Drazin, P. G. (1961). On the steady flow of a fluid of variable density past an obstacle. *Tellus*, 13(2), 239-251.

Dresser, A. L., & Huizer, R. D. (2011). CALPUFF and AERMOD model validation study in the near field: Martins Creek revisited. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 61(6), 647-659.

Du, S. M., (2001). A heuristic Lagrangian stochastic particle model of relative diffusion: model formulation and preliminary results. *Atmospheric Environment* 35 (9), 1597–1607.

Dyer, A. J., & Hicks, B. B. (1970). Flux-gradient relationships in the constant flux layer. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 96(410), 715-721.

Elbern, H., Strunk, A., Schmidt, H., Talagrand, O., (2007). Emission rate and chemical State estimation by 4-Dimensional variational Inversion. *Atmospheric Chemistry and Physics* 7, 3749-3769.

Emery, C., Tai, E., & Yarwood, G. (2001). Enhanced meteorological modeling and performance evaluation for two Texas ozone episodes. prepared for the Texas Near Non-Attainment Areas through the Alamo Area Council of Governments", by ENVIRON International Corp, Novato, CA.

ENDESA (2011). Informes anuales de sostenibilidad 2005 a 2009. U.P.T. As Pontes. Recuperado de: [<http://www.endesa.com/>]

EnviroModeling Ltda (2005). modelación de la calidad de aire en el área de influencia del complejo termoeléctrico San Isidro. Apéndice D. Implementación del sistema de modelación CALMET/CALPUFF/CALGRID, en el valle de Quillota.

EPA (1987). Industrial Source Complex (ISC) Dispersion Model User's Guide - Second Edition (Revised). EPA-450/4-88-002a.

EPA (1988). User's guide to SDM -- A Shoreline Dispersion Model (EPA-450/4-88-017). U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC.

EPA (1993). User's guide to the Building Profile Input Program (BPIP). U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC.

EPA (1995). User's Guide for the Industrial Source Complex (ISC3) Dispersion Models, Volume I- User Instructions. EPA-454/B-95-003a. Office of Air Quality Planning and Standards, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC 27711.

EPA (1998). Interagency Workgroup on Air Quality Modeling (IWAQM) Phase 2 Summary Report and Recommendations for Modeling Long Range Transport Impacts.

Ferreira, J., Rodriguez, A., Monteiro, A., Miranda, A. I., Dios, M., Souto, J. A., Yarwood, G., Nopmongcol, U., & Borrego, C. (2012). Air quality simulations for North America-MM5-CAMx modelling performance for main gaseous pollutants. *Atmospheric Environment*, 53, 212-224.

Fishwick, S., & Scorgie, Y. (2011). Performance of CALPUFF in predicting time-resolved particulate matter concentrations from a large scale surface mining operation. In *Proceedings of CASANZ Conference*.

Folch, A., Costa, A., Basart, S. (2012). Validation of the FALL3D ash dispersion model using observations of the 2010 Eyjafjallajökull volcanic ash clouds. *Atmospheric Environment*, 48, 165-183.

Fonseca, M. (2013). Estudio del impacto en la calidad del aire de las fuentes puntuales en la ciudad de Pinar del Río. *Revista Brasileira de Meteorologia*, 28(1), 01-12.

Fowler, D., & Unsworth, M. H. (1979). Turbulent transfer of sulphur dioxide to a wheat crop. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 105(446), 767-783.

- Fox, T. (2009). Memorandum: Clarification on EPA-FLM Recommended Settings for CALMET. August, 31, 2009.
- Gangolli, S. (Ed.), (1999). The Dictionary of Substances and their Effects, 2nd edn. The Royal Society of Chemistry. Cambridge.
- Gariazzo, C., Pelliccioni, A., Bogliolo, M. P., & Scalisi, G. (2004). Evaluation of a Lagrangian particle model (SPRAY) to assess environmental impact of an industrial facility in complex terrain. *Water, air, and soil pollution*, 155(1-4), 137-158.
- Garratt, J. R. (1977). Review of drag coefficients over oceans and continents. *Monthly weather review*, 105(7), 915-929.
- Garratt, J. R. (1994). The atmospheric boundary layer. Cambridge university press.
- Geller, M., & Ng, E. W. (1971). A table of integrals of the error function. II. Additions and corrections. *J. Res. Natl. Bur. Stand*, 75, 149-163.
- Ghannam, K. and El-Fadel, M. (2013). Emissions characterization and regulatory compliance at an industrial complex: an integrated MM5/CALPUFF approach. *Atmospheric Environment* 69, 156-169.
- Gifford, F. A. (1976). Turbulent Diffusion--Typing schemes: A Review. *Nuclear Safety* 17, 68-86.
- Gifford, F. (1982). Horizontal diffusion in the atmosphere: a Lagrangian-dynamical theory. *Atmospheric Environment* (1967), 16(3), 505-512.
- Godden, D., & Lurmann, F. (1983). Development of the PLMSTAR model and its application to ozone episode conditions in the South Coast Air Basin. Environmental Research and Technology, Inc., Westlake Village, CA.
- Golden Software, (2009). Surfer getting started guide. Contouring and 3D surface mapping for scientists and Engineers. 56 p.
- Gómez, M. C., & Tchijov, V. (2010). The FEOM technique applied to a three-dimensional model of diffusion/advection of pollutants. *Environmental Modelling & Software*, 25 (4), 602-606.
- Goodin, W. R., McRae, G. J., Seinfeld, J. H. (1980). An objective analysis technique for constructing three-dimensional urban-scale wind fields. *Journal of Applied Meteorology*, 19(1), 98-108.
- Grell, G. A., Dudhia, J., Stauffer, D. R. (1994). A description of the fifth-generation Penn State/NCAR mesoscale model (MM5).

Grell, G. A., Peckham, S. E., Schmitz, R., McKeen, S. A., Frost, G., Skamarock, W. C., Eder, B. (2005). Fully coupled "online" chemistry within the WRF model. *Atmospheric Environment*, 39(37), 6957-6975.

Gross, A., Amstrup, B., Baklanov, A., Lorenzen, T., Sorensen, J. H. (2007). CAC: An Air Pollution Model from Regional to Urban Scale Modelling. In *COST-728/NetFAM Workshop on Integrated Systems of Meso-meteorological and Chemical Transport Models*, edited by: Baklanov, A., Mahura, A., and Sokhi, R., Copenhagen (pp. 128-134).

Gualtieri, G. (2010). Implementing an operational ozone forecasting system based on WRF/CALMET/CALGRID models: a 5-month case study over Tuscany, Italy. *Water, Air, & Soil Pollution*, 209(1-4), 269-293.

Hales, J. M., Fox, T. D., Powell, D. C. (1977). STRAM: An Air Pollution Model Incorporating Nonlinear Chemistry, Variable Trajectories, and Plume Segment Diffusion. Environmental Protection Agency, Office of Air Waste Management, Office of Air Quality Planning and Standards.

Hall, C. D. (1975). The simulation of particle motion in the atmosphere by a numerical random walk model. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 101(428), 235-244.

Halse, A. K., Eckhardt, S., Schlabach, M., Stohl, A., Breivik, K. (2013). Forecasting long-range atmospheric transport episodes of polychlorinated biphenyls using FLEXPART. *Atmospheric Environment*, 71, 335-339.

Hanna, S. R., Briggs, G. A., Deardorff, J., Egan, B. A., Gifford, F. A., Pasquill, F. (1977). Summary of recommendations made by the AMS workshop on stability classification schemes and sigma curves. *Bulletin of American Meteorological Society*, 58, 1305-9.

Hanna, S. R., Briggs, G. A., Hosker Jr, R. P. (1982). Handbook on atmospheric diffusion (No. DOE/TIC-11223). National Oceanic and Atmospheric Administration, Oak Ridge, TN (USA). Atmospheric Turbulence and Diffusion Lab.

Hanna, S. R., Schulman, L. L., Paine, R. J., Pleim, J. E., Baer, M. (1985). Development and evaluation of the Offshore and Coastal Dispersion Model. *Journal of the Air Pollution Control Association*, 35(10), 1039-1047.

Hanna, S. R., Weil, J. C., Paine, R. J. (1986). Plume model development and evaluation-hybrid approach. EPRI Contract No. RP-1616-27, Electric Power Research Institute, Palo Alto, California.

Hanna, S. R., & Chang, J. C. (1991). Modification of the Hybrid Plume Dispersion Model (HPDM) for urban conditions and its evaluation using the Indianapolis data set. Vol. I. User's Guide for HPDM-Urban. Sigma Research Corporation, Concord, MA, 1742.

Hastings, C., Hayward, J. T., Wong, J. P. (1955). Approximations for digital computers (Vol. 170). Princeton, NJ: Princeton University Press.

Hauglustaine, D. A., Hourdin, F., Jourdain, L., Filiberti, M. A., Walters, S., Lamarque, J. F., Holland, E. A. (2004). Interactive chemistry in the Laboratoire de Météorologie Dynamique general circulation model: Description and background tropospheric chemistry evaluation. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* (1984–2012), 109(D4).

Heffter, J. L. (1965). The variation of horizontal diffusion parameters with time for travel periods of one hour or longer. *Journal of Applied Meteorology*, 4(1), 153-156.

Hernández-Ceballos, M. A., Adame, J. A., Bolívar, J. P. and De la Morena, B .A., (2010). La modelización meteorológica como herramienta necesaria para los estudios de calidad del aire: caso del valle del Guadalquivir. 10º Congreso Nacional de Medio Ambiente (CONAMA), Madrid, Spain.

Hicks, B. B. (1982). Critical assessment document on acid deposition. ATDL Contrib. File, (81/24).

Hicks, B. B. (1985). Behavior of turbulence statistics in the convective boundary layer. *Journal of climate and applied meteorology*, 24(6), 607-614.

Hockney, RW., and J.W. Eastwood (1981). *Computer Simulation Using Particles*. New York: McGraw-Hill, Inc.

Hogrefe, C., Rao, S. T., Kasibhatla, P., Kallos, G., Tremback, C. J., Hao, W., Olerud, D., Xiu, A., McHenry, J., Alapaty, K. (2001). Evaluating the performance of regional-scale photochemical modeling systems: Part I—Meteorological predictions. *Atmospheric Environment*, 35(24), 4159-4174.

Holmes, N. S., & Morawska, L. (2006). A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles: an overview of different dispersion models available. *Atmospheric Environment*, 40(30), 5902-5928.

Holtslag, A. A. M. and A. P. van Ulden (1982). Simple estimates of nighttime surface fluxes from routine weather data. KNMI Scientific Report, W.R. 82-4, 11 pp.

- Holtslag, A. A. M., & Van Ulden, A. P. (1983). A simple scheme for daytime estimates of the surface fluxes from routine weather data. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, 22(4), 517-529.
- Hong, S. Y., & Lim, J. O. J. (2006). The WRF single-moment 6-class microphysics scheme (WSM6). *J. Korean Meteor. Soc.*, 42(2), 129-151.
- Horst, T.W. and J.C. Doran (1986). Nocturnal drainage flow on simple slopes. *Bound. Layer Meteor.*, 34, 263-286.
- Hosker Jr, R. P. (1975). A comparison of estimation procedures for overwater plume dispersion. *Environmental Research Laboratories*, 154.
- Hosker, R. P. (1984). Flow and diffusion near obstacles. *Atmospheric science and power production*, (3), 241-326.
- Hosker Jr, R. P., & Lindberg, S. E. (1982). Review: atmospheric deposition and plant assimilation of gases and particles. *Atmospheric Environment*, 16(5), 889-910.
- Huber, A. H., & Snyder, W. H. (1976). Building wake effects on short stack effluents. In *Bulletin of the American Meteorological Society* (Vol. 57, No. 5, pp. 640-640).
- Huber, A. H. (1977). Incorporating building/terrain wake effects on stack effluents. Preprint volume for the Joint Conference on Applications of Air Pollution Meteorology, American Meteorological Society, Boston, MA.
- Huber, A. H., & Snyder, W. H. (1982). Wind tunnel investigation of the effects of a rectangular-shaped building on dispersion of effluents from short adjacent stacks. *Atmospheric Environment*, 16(12), 2837-2848.
- Huijnen, V., Eskes, H. J., Poupkou, A., Elbern, H., Boersma, K. F., Foret, G., Sofiev, M., Valdebenito, A., Flemming, J., Stein, O., Gross, A., Robertson, L., D'Isidoro, M., Kioutsioukis, I., Friese, E., Amstrup, B., Bergstrom, R., Strunk, A., Vira, J., Zyryanov, D., Maurizi, A., Melas, D., Peuch, V.-H., Zerefos, C. (2010). Comparison of OMI NO₂ tropospheric columns with an ensemble of global and European regional air quality models. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(7), 3273-3296.
- Hunt, J. C. R., & Mulhearn, P. J. (1973). Turbulent dispersion from sources near two-dimensional obstacles. *Journal of Fluid Mechanics*, 61(02), 245-274.

- Hunt, J. C. R., Puttock, J. S., Snyder, W. H. (1979). Turbulent diffusion from a point source in stratified and neutral flows around a three-dimensional hill—Part I. Diffusion equation analysis. *Atmospheric Environment* (1967), 13(9), 1227-1239.
- Hunt, J. C. R., & Snyder, W. H. (1980). Experiments on stably and neutrally stratified flow over a model three-dimensional hill. *Journal of Fluid Mechanics*, 96(04), 671-704.
- Hunt, J. C. R. (1982). Diffusion in the stable boundary layer. In *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling* (pp. 231-274). Springer Netherlands.
- Hurley, P., Manins, P., Lee, S., Boyle, R., Ng, Y. L., & Dewundege, P. (2003). Year-long, high-resolution, urban airshed modelling: verification of TAPM predictions of smog and particles in Melbourne, Australia. *Atmospheric Environment*, 37(14), 1899-1910.
- Ievdin, I., Trybushny, D., Zheleznyak, M., Raskob, W. (2010). RODOS re-engineering: aims and implementation details. *Radioprotection*, 45(05), S181-S189.
- Im, U., Markakis, K., Unal, A., Kindap, T., Poupkou, A., Incecik, S., Yenigun, O., Melas, D., Theodosi, C., Mihalopoulos, N. (2010). Study of a winter PM episode in Istanbul using the high resolution WRF/CMAQ modeling system. *Atmospheric Environment*, 44(26), 3085-3094.
- Indumati, S., Oza, R. B., Mayya, Y. S., Puranik, V. D., Kushwaha, H. S. (2009). Dispersion of pollutants over land–water–land interface: Study using CALPUFF model. *Atmospheric Environment*, 43(2), 473-478.
- Irwin, J. S. (1979). Scheme for estimating dispersion parameters as a function of release height. Environmental Sciences Research Laboratory, Office of Research and Development, US Environmental Protection Agency.
- Irwin, J. S. (1983). Estimating plume dispersion—a comparison of several sigma schemes. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, 22(1), 92-114.
- Jackson, B., Chau, D., Gurer, K., Kaduwela, A. (2006). Comparison of ozone simulations using MM5 and CALMET/MM5 hybrid meteorological fields for the July/August 2000 CCOS episode. *Atmospheric Environment*, 40(16), 2812-2822.
- Jiménez, P., Jorba, O., Parra, R., Baldasano, J. M. (2006). Evaluation of MM5-EMICAT2000-CMAQ performance and sensitivity in complex terrain: high-resolution application to the northeastern Iberian Peninsula. *Atmospheric Environment*, 40(26), 5056-5072.
- Jiménez, P. A., Dudhia, J., González-Rouco, J. F., Montávez, J. P., García-Bustamante, E., Navarro, J., Montávez, J. P., Vila-Guerau de Arellano, J., Dudhia J., Muñoz-Roldán, A. (2013). An

evaluation of WRF's ability to reproduce the surface wind over complex terrain based on typical circulation patterns. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 118(14), 7651-7669.

Jung, Y. R., Park, W. G., & Park, O. H. (2003). Pollution dispersion analysis using the puff model with numerical flow field data. *Mechanics research communications*, 30(4), 277-286.

Kallos, G., Nickovic, S., Papadopoulos, A., Jovic, D., Kakaliagou, O., Misirlis, N., Boukas, L., Mimikou, N., Sakellaridis, G., Papageorgiou, J., Anadranistakis, E., Manousakis, M. (1997). The regional weather forecasting system SKIRON: An overview. In *Proceedings of the symposium on regional weather prediction on parallel computer environments* (Vol. 15, p. 17).

Kim, Y., Fu, J. S., Miller, T. L. (2010). Improving ozone modeling in complex terrain at a fine grid resolution: Part I—examination of analysis nudging and all PBL schemes associated with LSMs in meteorological model. *Atmospheric Environment*, 44(4), 523-532.

Kovalets, I. V., Korolevych, V. Y., Khalchenkov, A. V., Ievdin, I. A., Zheleznyak, M. J., Andronopoulos, S. (2013). Influence of the diagnostic wind field model on the results of calculation of the microscale atmospheric dispersion in moderately complex terrain. *Atmospheric Environment*, 79, 29-35.

Krol, M., Houweling, S., Bregman, B., Broek, M., Segers, A., Velthoven, P. V., Peters, W., Dentener, F., Bergamaschi, P. (2005). The two-way nested global chemistry-transport zoom model TM5: algorithm and applications. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5(2), 417-432.

Kukkonen, J., Klein, T., Karatzas, K., Torseth, K., Fahre Vik, A., San José, R., Balk, T., Sofiev, M. (2009). COST ES0602: towards a European network on chemical weather forecasting and information systems. *Advances in Science and Research*, 3(1), 27-33.

Lakes Environmental (2011). CALPUFF Air Dispersion Modeling Workshop, Course Slides. Barcelona - Oct 19-21, 2011.

Lamb, R. G. (1978). A numerical simulation of dispersion from an elevated point source in the convective planetary boundary layer. *Atmospheric Environment* (1967), 12(6), 1297-1304.

Lamb, R. G. (1982). Diffusion in the convective boundary layer. In *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling* (pp. 159-229). Springer Netherlands.

Landsberg, H. E., (1981). *The Urban Heat Island*. Academic Press, New York, NY.

Langmann, B., Varghese, S., Marmer, E., Vignati, E., Wilson, J., Stier, P., O'Dowd, C. (2008). Aerosol distribution over Europe: a model evaluation study with detailed aerosol microphysics. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 8(6), 1591-1607.

Langmann, B., Folch, A., Hensch, M., Matthias, V. (2012). Volcanic ash over Europe during the eruption of Eyjafjallajökull on Iceland, April–May 2010. *Atmospheric Environment*, 48, 1-8.

Lee, R.F. and J.L. Thé, (2003). The Effect of CALMET Surface Layer Weighting Parameter R1 on the Accuracy of CALMET at Other Nearby Sites: a Case Study. Paper number 03-A-32 presented at Guideline on Air Quality Models: The Path Forward, October 22-24, 2003, Mystic, CT. Air and Waste Management Association, Pittsburgh, PA.

LeMone, M. A. (1980). The marine boundary layer. In Workshop on the planetary boundary layer (pp. 182-231). American Meteorological Society.

Levy, J. I., Spengler, J. D., Hlinka, D., Sullivan, D., Moon, D. (2002). Using CALPUFF to evaluate the impacts of power plant emissions in Illinois: model sensitivity and implications. *Atmospheric Environment*, 36(6), 1063-1075.

Levy, J. I., Wilson, A. M., Evans, J. S., Spengler, J. D. (2003). Estimation of primary and secondary particulate matter intake fractions for power plants in Georgia. *Environmental science & technology*, 37(24), 5528-5536.

Lide, D.R. (Ed.), 2003. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 84th edn. CRC Press. Boca Raton, Florida.

Lin, J. C., Gerbig, C., Wofsy, S. C., Andrews, A. E., Daube, B. C., Davis, K. J. y Grainger, C. A. (2003). A near-field tool for simulating the upstream influence of atmospheric observations: the stochastic time-inverted Lagrangian transport (STILT) model. *Journal of Geophysical Research* 108 (D16), 4493.

Lim, C. Y., Stein, M., Ching, J., Tang, R. (2010). Statistical properties of differences between low and high resolution CMAQ runs with matched initial and boundary conditions. *Environmental Modelling & Software*, 25(1), 158-169.

Liu, M. K., & Yocke, M. A. (1980). Siting of wind turbine generators in complex terrain. *Journal of Energy*, 4(1), 10-16.

Lonati, G., Cernuschi, S. and Sidi, S. (2010). Air quality impact assessment of at-berth ship emissions: Case-study for the project of a new freight port. *Science of the Total Environment* 409(1), 192-200.

Lopez, M. T., Zuk, M., Garibay, V., Tzintzun, G., Iniestra, R., Fernandez, A. (2005). Health impacts from power plant emissions in Mexico. *Atmospheric Environment*, 39(7), 1199-1209.

- Lorimer, G. (1986). The AUSPLUME Gaussian plume dispersion model. Environmental Protection Authority of Victoria, Melbourne, Victoria, Australia.
- Ludwig, F. L., Gasiorek, L. S., Ruff, R. E. (1977). Simplification of a Gaussian puff model for real-time minicomputer use. *Atmospheric Environment* (1967), 11(5), 431-436.
- Ludwig, F. L. (1982). Effect of a change of atmospheric stability on the growth rate of puffs used in plume simulation models. *Journal of Applied Meteorology*, 21(9), 1371-1374.
- Ludwig, F. L., & Endlich, R. M. (1988). User's guide for the winds on critical streamline surfaces (WOCSS) code. Final report, US Army Contract DAAL-03-D-86-0001/680, SRI International, Menlo Park, CA.
- Ludwig, F. L., Salvador, R., Bornstein, R. (1989). An adaptive volume plume model. *Atmospheric Environment* (1967), 23(1), 127-138.
- Luhar, A. K., & Hurley, P. J. (2003). Evaluation of TAPM, a prognostic meteorological and air pollution model, using urban and rural point-source data. *Atmospheric Environment*, 37(20), 2795-2810.
- Lyons, W. A., & Cole, H. S. (1973). Fumigation and plume trapping on the shores of Lake Michigan during stable onshore flow. *Journal of Applied Meteorology*, 12(3), 494-510.
- MacIntosh, D. L., Stewart, J. H., Myatt, T. A., Sabato, J. E., Flowers, G. C., Brown, K. W., Hlinka, D. J., Sullivan, D. A. (2010). Use of CALPUFF for exposure assessment in a near-field, complex terrain setting. *Atmospheric Environment*, 44(2), 262-270.
- Mahrt, L. (1982). 'Momentum Balance of Gravity Flows', *J. Atmos. Sci.* 39, 2701–2711.
- Manins, P. C. (1979). Partial penetration of an elevated inversion layer by chimney plumes. *Atmospheric Environment*, 13(5), 733-741.
- Manins, P. C. (1984). Chimney plume penetration of the sea-breeze inversion. *Atmospheric Environment* (1967), 18(11), 2339-2344.
- Mao, H., Chen, M., Hegarty, J. D., Talbot, R. W., Koermer, J. P., Thompson, A. M., Avery, M. A. (2010). A comprehensive evaluation of seasonal simulations of ozone in the northeastern US during summers of 2001–2005. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(1), 9-27.
- Maul, P. R. Atmospheric transport of sulfur compound pollutants. 1980, Nottingham, England: Central Electricity Generating Bureau. Report MID/SSD/80/0026/R.

McElroy, J. L., & Pooler, F. (1968). St. Louis Dispersion Study, Volume II—Analysis. USDHEW PHS, NAPCA. Arlington, VA.

McHenry, J. N., Ryan, W. F., Seaman, N. L., Coats Jr, C. J., Pudykiewicz, J., Arunachalam, S., Vukovich, J. M. (2004). A real-time Eulerian photochemical model forecast system: Overview and initial ozone forecast performance in the northeast US corridor. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 85(4), 525-548.

Méndez, M. R., Souto, J. A., Casares, J. J., Lucas, T., Carmichael, G. R. (2003). The effect of the limited availability of H₂O₂ in the competitive deposition of sulfur and oxidized nitrogen. *Chemosphere*, 53(9), 1165-1178.

Meneses, E., Roig, A., Alonso, A., Martínez, A., Paz, E., Fonseca, Y., Rodríguez, J. A., Alvarado, J., Peraza, H. (2015) Estimación de factores de emisiones a partir de mediciones de gases en instalaciones de generadoras de electricidad. *Actas del Taller “Contaminación atmosférica vs desarrollo sostenible: emisiones, calidad del aire y cambio climático” 29 de Septiembre al 1 de Octubre de 2015. La Habana, Cuba.*

MeteoGalicia, (2010). Unidad de Observación y predicción meteorológica de Galicia [Recuperado de [http:// www.meteogalicia.es/](http://www.meteogalicia.es/)]. Acceso 12/10/2010.

Mircea, M., D'Isidoro, M., Maurizi, A., Vitali, L., Monforti, F., Zanini, G., Tampieri, F. (2008). A comprehensive performance evaluation of the air quality model BOLCHEM to reproduce the ozone concentrations over Italy. *Atmospheric Environment*, 42(6), 1169-1185.

Misenis, C., & Zhang, Y. (2010). An examination of sensitivity of WRF/Chem predictions to physical parameterizations, horizontal grid spacing, and nesting options. *Atmospheric Research*, 97(3), 315-334.

Misra, P. K. (1980). Dispersion from tall stacks into a shore line environment. *Atmospheric Environment* (1967), 14(4), 397-400.

Mitrani, I., Alvarez, L., Borrajeró, I. (2003). Aplicación optimizada del MM5V3 sobre el territorio Cubano mediante el uso de computadora personal. *Revista Cubana de Meteorología* 10(1), 84-94.

Monteiro, A., Strunk, A., Carvalho, A., Tchepel, O., Miranda, A. I., Borrego, C., Saavedra, S., Rodríguez, A., Souto, J., Casares, J., Friese, E., Elbern, H. (2012). Investigating a high ozone episode in a rural mountain site. *Environmental Pollution*, 162, 176-189.

Morphet, W. J. (2009). Simulation, kriging, and visualization of circular-spatial data. Utah State University.

- Nanni, A., Riva, G. M., Tinarelli, G., & Brusasca, G. (1996). Particle model simulation of pollutants dispersion from a line source in complex terrain. *Science of the total environment*, 189, 301-309.
- Naranjo, L., & Muñuzuri, V. P. (Eds.). (2006). *A variabilidade natural do clima en Galicia*. MeteoGalicia. Xunta de Galicia e fundación Caixa Galicia. Santiago de Compostela, Spain: Consellería de Medio Ambiente e Desenvolvemento Sostible.
- Nieuwstadt, F. T. M. (1977). The dispersion of pollutants over a water surface. In *Proceedings of the 8th International Technical Meeting on air pollution and its application*.
- Nieuwstadt, F. T. M. (1984). Some aspects of the turbulent stable boundary layer. In *Boundary Layer Structure* (pp. 31-55). Springer Netherlands.
- North Dakota Department of Health. Division of Air Quality [NDDH] (2003). *Calpuff Analysis of Current PSD Class I Increment Consumption in North Dakota and Eastern Montana Using Actual Annual Average SO₂ Emission Rates*.
- Núñez Crespí, S. (2004). *Altura de la capa de mezcla: caracterización experimental y aplicación de un modelo meteorológico para el estudio de su evolución diurna*. Universidad Complutense de Madrid, Servicio de Publicaciones.
- O'Brien, J. J. (1970). A note on the vertical structure of the eddy exchange coefficient in the planetary boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 27(8), 1213-1215.
- O'Dell, R. A., Taheri, M., Kabel, R. L. (1977). A model for uptake of pollutants by vegetation. *Journal of the Air Pollution Control Association*, 27(11), 1104-1109.
- Oettl, D., Kukkonen, J., Almbauer, R. A., Sturm, P. J., Pohjola, M., Härkönen, J. (2001). Evaluation of a Gaussian and a Lagrangian model against a roadside data set, with emphasis on low wind speed conditions. *Atmospheric Environment*, 35(12), 2123-2132.
- Oettl, D., Sturm, P., Almbauer, R., Okamoto, S. I., Horiuchi, K. (2003). Dispersion from road tunnel portals: comparison of two different modelling approaches. *Atmospheric Environment*, 37(37), 5165-5175.
- Oettl, D., Sturm, P., Almbauer, R. (2005). Evaluation of GRAL for the pollutant dispersion from a city street tunnel portal at depressed level. *Environmental Modelling & Software*, 20(5), 499-504.
- Ohba, R., Ukeguchi, N., Kakishima, S., Lamb, B. (1990). Wind tunnel experiment of gas diffusion in stably stratified flow over a complex terrain. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 24(8), 1987-2001.

Ohba, R., Kakishima, S., Ito, S. (1991). Water tank experiment of gas diffusion from a stack in stably and unstably stratified layers under calm conditions. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 25(10), 2063-2076.

Oke, T. R. (1978). *Boundary Layer Climates* John Wiley & Sons New York.

Oke, T. R. (1982). The energetic basis of the urban heat island. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 108(455), 1-24.

Olver, F. W. (Ed.). (2010). *NIST handbook of mathematical functions*. Cambridge University Press.

O'Neill, S. M., Lamb, B. K., Chen, J., Napelenok, S., Allwine, E. J., Stock, D., McManus, J. B., Shorter, J. H., Kolb, C. E. (2001). Correlating an upwind source-footprint with urban emissions data using the MM5/MCIP/CALPUFF modeling system. In *International Emission Inventory Conference "One Atmosphere, One Inventory, Many Challenges"*.

Padro, J., Den Hartog, G., Neumann, H. H. (1991). An investigation of the ADOM dry deposition module using summertime O₃ measurements above a deciduous forest. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 25(8), 1689-1704.

Pan, L., Lin, C. J., Carmichael, G. R., Streets, D. G., Tang, Y., Woo, J. H., Shetty, S. K., Chu, H. W., Ho, T. C., Friedli, H. R., Feng, X. (2010). Study of atmospheric mercury budget in East Asia using STEM-Hg modeling system. *Science of the Total Environment*, 408(16), 3277-3291.

Panofsky, H. A., Tennekes, H., Lenschow, D. H., Wyngaard, J. C. (1977). The characteristics of turbulent velocity components in the surface layer under convective conditions. *Boundary-Layer Meteorology*, 11(3), 355-361.

Parrish, D. D., Allen, D. T., Bates, T. S., Estes, M., Fehsenfeld, F. C., Feingold, G., Ferrare, R., Hardesty, R. M., Meagher, J. F., Nielsen-Gammon, J. W., Pierce, R. B., Ryerson, T. B., Seinfeld J. H. and Williams, E. J. (2009). Overview of the second Texas air quality study (TexAQS II) and the Gulf of Mexico atmospheric composition and climate study (GoMACCS). *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* (1984–2012), 114(D7).

Päsler-Sauer, J. (2000). Description of the atmospheric dispersion model ATSTEP. Report of project RODOS (WG2)-TN (99)-11.

Pasquill, F. (1976). Atmospheric dispersion parameters in Gaussian plume modeling: Part II. Possible requirements for change in the Turner workbook values. EPA-600/4-76-030b, U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC, 53 pp.

Pérez-Muñuzuri, V., Souto González, J.A. (2000). Desarrollo de una unidad de observación meteorológica y climatológica y de modelos numéricos de predicción meteorológica de Galicia. Convenio de colaboración entre la Consellería de Medio Ambiente (Xunta de Galicia) y la Universidad de Santiago de Compostela.

Perry, S. G., Burns, D. J., Adams, L. H., Paine, R. J., Strimaitis, D. G. (1989). User's guide to the Complex-Terrain Dispersion Model Plus Algorithms for Unstable Situations (CTDMPLUS): Volume 1. Model description and user instructions (No. PB-89-181424/XAB). Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC (USA). Atmospheric Research and Exposure Assessment Lab.

Perry, S. G., Cimorelli, A. J., Lee, R. F., Paine, R. J., Venkatram, A., Weil, J. C., Wilson, R. B. (1994). AERMOD: A dispersion model for industrial source applications.

Petersen, W. B. (1986). A demonstration of INPUFF with the MATS data base. *Atmospheric Environment* (1967), 20(7), 1341-1346.

Peuch, V. H., Amodei, M., Barthet, T., Cathala, M. L., Josse, B., Michou, M., Simon, P. (1999). MOCAGE: Modèle de Chimie-Transport à Grande Echelle. Acte de l'Atelier de Modélisation de l'Atmosphère, 33-36.

Pielke, R. (1974). A three-dimensional numerical model of the sea breeze over South Florida. *Mon. Wea. Rev.*, 102, 115–139.

Pielke, R. A. (1984). *Mesoscale Meteorological Modeling*, Academic Press, London.

Pisoni, E., Carnevale, C., Volta, M. (2010). Sensitivity to spatial resolution of modeling systems designing air quality control policies. *Environmental Modelling & Software*, 25(1), 66-73.

Pleim, J., Venkatram, A., Yamartino, R. (1984). ADOM/TADAP model development program. The Dry Deposition Module, 4.

Poplawski, K., Setton, E., McEwen, B., Hrebenyk, D., Graham, M. and Keller, P. (2011). Impact of cruise ship emissions in Victoria, BC, Canada. *Atmospheric Environment* 45(4), 824-833.

Precedo Ledo, A., & Sancho Comíns, J. (2001). Atlas de Galicia. Tomo I: Medio Natural), Sociedade para o Desenvolvemento Comarcal de Galicia, Xunta de Galicia, 137-155.

Protonotariou, A., Bossioli, E., Athanasopoulou, E., Dandou, A., Tombrou, M., Assimakopoulos, V., Flocas, H. A., Chelmis, C. (2004). Validation and inter-comparison of CALPUFF regulatory model to Eulerian models and measurements. An application over the greater Athens area,

Greece. In Proceedings of the 9th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes (pp. 131-135).

Radonjic, Z., (2005). Coupling NMM Mesoscale Weather Forecasting Model with CALMET/CALPUFF Regulatory Air Dispersion Model. A&WMA 98th Annual Conference and Exhibition. Minneapolis, Minnesota, June.

Radonjic, Z., Telenta, B., Chambers, D., Janjic, Z. (2010). WRF-NMM Mesoscale Weather Forecast Model and CALMET Meteorological Preprocessor Wind Simulations over the Mountaneous Region. In EGU General Assembly Conference Abstracts (Vol. 12, p. 2941).

Radonjic, Z., Chambers, D., Telenta, B. and Janjic, Z. 2011. Coupled NMM-CALMET Meteorology Development for the CALPUFF Air Dispersion Modelling in Complex Terrain and Shoreline Settings. Geophysical Research Abstracts Vol. 13, EGU2011-3729, 2011.

Ranzato, L., Barausse, A., Mantovani, A., Pittarello, A., Benzo, M., Palmeri, L. (2012). A comparison of methods for the assessment of odor impacts on air quality: Field inspection (VDI 3940) and the air dispersion model CALPUFF. Atmospheric Environment, 61, 570-579.

Rao, S. T., Galmarini, S., Puckett, K. (2011). Air Quality Model Evaluation International Initiative (AQMEII): advancing the state of the science in regional photochemical modeling and its applications. Bulletin of the American Meteorological Society, 92(1), 23-30.

Raza, S. S., Avila, R., Cervantes, J. (2001). A 3-D Lagrangian stochastic model for the meso-scale atmospheric dispersion applications. Nuclear engineering and design, 208(1), 15-28.

Reid, J. D. (1979). Markov chain simulations of vertical dispersion in the neutral surface layer for surface and elevated releases. Boundary-Layer Meteorology, 16(1), 3-22.

Renner, E., & Wolke, R. (2010). Modelling the formation and atmospheric transport of secondary inorganic aerosols with special attention to regions with high ammonia emissions. Atmospheric Environment, 44(15), 1904-1912.

Riley, J. J., Liu, H. T., Geller, E. W. (1976). A numerical and experimental study of stably stratified flow around complex terrain. Final Report, May 1974-Mar. 1975 Flow Research, Inc., Kent, WA., 1.

Rincón de Hoyos, M. E. (2012). Acoplamiento del modelo de mesoescala WRF al modelo de calidad del aire Calpuff (Tesis de Magister en Meteorología, Universidad Nacional de Colombia).

Rittmann, B. E. (1982). Application of two-thirds law to plume rise from industrial-sized sources. Atmospheric Environment, 16(11), 2575-2579.

Roberts Bank Container Expansion Program [RB] (2005). Deltaport Third Berth Project. Appendix C. CALMET Meteorological Model.

Rodríguez, A., Hernández, A., Dios, M., Souto, J.A., Casares, J.J. (2012). Validation of WRF model during both primary and secondary pollutants episodes over an atlantic coastal region. 8th International Conference on Air Quality - Science and Application, Athens, Greece.

Ryall, D.B., Maryon, R.H., (1998). Validation of the UK Met. Office's NAME model against the ETEX dataset. *Atmospheric Environment* 32, 4265-4276.

Saavedra, S. (2010). Caracterización de episodios de ozono troposférico en Galicia mediante la aplicación de distintas técnicas de simulación e interpretación de datos de campo (Tesis Doctoral. Universidad de Santiago de Compostela).

Saavedra, S., Rodríguez, A., Hernandez, A., Dios, M., Souto, J. A., Casares, J. J. (2012). Validation of WRF model during both primary and secondary pollutants episodes over an Atlantic coastal region. In 8th international conference on Air Quality–Science and Application, Athens (pp. 19-23).

Salsón, S., Souto, J.A. (2003). Automatic weather stations network of the Department of Environment of Galicia: Data acquisition, validation and quality control. 3th International Conference on Experiences with Automatic Weather Stations, 19-21 February, 2003, Torremolinos, Spain.

San Diego County. Air pollution control district [SDC] (2007). Eight-hour ozone attainment plan for San Diego County.

San José, R., Pérez, J. L., Callén, M. S., López, J. M., Mastral, A. (2013). BaP (PAH) air quality modelling exercise over Zaragoza (Spain) using an adapted version of WRF-CMAQ model. *Environmental Pollution*, 183, 151-158.

Sawford, B. L. (1984). The basis for, and some limitations of, the Langevin equation in atmospheric relative dispersion modelling. *Atmospheric Environment*, 18(11), 2405-2411.

Schaap, M., Timmermans, R. M., Roemer, M., Boersen, G. A. C., Builtjes, P., Sauter, F., Velders, G., Beck, J. (2008). The LOTOS-EUROS model: description, validation and latest developments. *International Journal of Environment and Pollution*, 32(2), 270-290.

Schulman, L. L., & Scire, J. S. (1980). Buoyant Line and Point Source (BLP) Dispersion Model User's Guide. Document P-7304B. Environmental Research and Technology, Inc., Concord, MA.

- Schulman, L. L., & Hanna, S. R. (1986). Evaluation of downwash modifications to the Industrial Source Complex Model. *Journal of the Air Pollution Control Association*, 36(3), 258-264.
- Scire, J. S., & Schulman, L. L. (1980). Modeling plume rise from low-level buoyant line and point sources. In *Proceedings Second Point Conference on Applications of Air Pollution Meteorology* (pp. 24-28).
- Scire, J. S., & Schulman, L. L. (1981). Evaluation of the BLP and ISC models with SF6 tracer data and SO2 measurements at aluminum reduction plants. In *APCA Specialty Conference on Dispersion Modeling for Complex Sources*, St. Louis, MO.
- Scire, J. S. Development of the MESOPUFF II dispersion model. (1984a). Research Triangle Park, NC: US Environmental Protection Agency. Report EPA-600/3-84-057.
- Scire, J. S., Lurmann, F. W., Bass, A., Hanna, S. R. (1984b). User's guide to the MESOPUFF II model and related processor programs. Research Triangle Park, NC: US Environmental Protection Agency. Report EPA-600/8-84-013.
- Scire, J. S., Strimaitis, D. G., & Fernau, M. E. (1996). New Developments in the CALPUFF Non-Steady-State Modeling System. In *Air Pollution Modeling and Its Application XI* (pp. 389-397). Springer US.
- Scire, J.S., Robe, F.R., Fernau, M.E. and Yamartino, R.J. (2000a). A User's Guide for the CALMET Meteorological Model (Version 5), Earth Tech, Concord, MA.
- Scire, J. S., Strimaitis, D. G., Yamartino, R. J. (2000b). A user's guide for the CALPUFF dispersion model. Earth Tech, Inc, 521, 1-521.
- Seinfeld, J. H., & Pandis, S. N. (2012). *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*. John Wiley & Sons.
- Sehmel, G. A. (1980). Particle and gas dry deposition: a review. *Atmospheric Environment*, 14(9), 983-1011.
- SENES Consultants Limited (2009). *Air Dispersion Modelling for Solid Waste Facilities in the Yukon*.
- Shepherd, J. G. (1974). Measurements of the direct deposition of sulphur dioxide onto grass and water by the profile method. *Atmospheric Environment* (1967), 8(1), 69-74.
- Sheppard, P. A. (1956). Airflow over mountains. *Quarterly journal of the Royal Meteorological society*, 82(354), 528-529.

Shorter, J. A., Ip, P. C., Rabitz, H. A. (1999). An efficient chemical kinetics solver using high dimensional model representation. *The Journal of Physical Chemistry A*, 103(36), 7192-7198.

Simpson, D., Fagerli, H., Jonson, J. E., Tsyro, S., Wind, P., Tuovinen, J. P. (2003). Transboundary acidification, eutrophication and ground level ozone in Europe. Part I, Unified EMEP model description, EMEP status report, 1, 2003.

Skamarock, W. C. and Klemp, J.B. (2008). A time-split nonhydrostatic atmospheric model for weather research and forecasting applications. *Journal of Computational Physics*, 227(7), 3465-3485.

Slinn, W. G. N., Hasse, L., Hicks, B. B., Hogan, A. W., Lal, D., Liss, P. S., Munnich, K.O., Sehmel, G.A., Vittori, O. (1978). Some aspects of the transfer of atmospheric trace constituents past the air-sea interface. *Atmospheric Environment*, 12(11), 2055-2087.

Smith, F. B. (1968). Conditioned particle motion in a homogeneous turbulent field. *Atmospheric Environment* (1967), 2(5), 491-508.

Smith, F. B. (1972). A scheme for estimating the vertical dispersion of a plume from a source near ground level. In NATO Comm. on the Challenges of Mod. Soc. Proc. of the 3 d Meeting of the Expert Panel on Air Pollution Modeling 14 p(SEE N 74-34995 24-20).

Snyder, W. H. (1980). Towing Tank Studies in Support of Field Experiments at Cinder Cone Butte, Idaho. Phase III: Verification of Formula for Prediction of Dividing Streamline Height. US EPA, Research Triangle Park, NC.

Snyder, W. H., & Hunt, J. C. R. (1984). Turbulent diffusion from a point source in stratified and neutral flows around a three-dimensional hill—II. Laboratory measurements of surface concentrations. *Atmospheric Environment* (1967), 18(10), 1969-2002.

Snyder, W. H. (1990). Fluid modeling applied to atmospheric diffusion in complex terrain. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 24(8), 2071-2088.

Snyder, M. A., Sansó, B., Sloan, L. C. (2007). Validation of climate model output using Bayesian statistical methods. *Climatic change*, 83(4), 457-476.

Sofiev, M., Siljamo, P., Valkama, I., Ilvonen, M., Kukkonen, J. (2006). A dispersion modelling system SILAM and its evaluation against ETEX data. *Atmospheric Environment*, 40(4), 674-685.

Sofiev, M., Genikhovich, E., Keronen, P., Vesala, T. (2010). Diagnosing the surface layer parameters for dispersion models within the meteorological-to-dispersion modeling interface. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 49(2), 221-233.

- Song, S. K., Shon, Z. H., Kim, K. H., Kim, Y. K., Pal, R. (2008). Dispersion and photochemical oxidation of reduced sulfur compounds in and around a large industrial complex in Korea. *Atmospheric environment*, 42(18), 4269-4279.
- Song, J., Lei, W., Bei, N., Zavala, M., Foy, B. D., Volkamer, R., Cardenas, B., Zheng, J., Zhang, R., Molina, L. T. (2010). Ozone response to emission changes: a modeling study during the MCMA-2006/MILAGRO Campaign. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(8), 3827-3846.
- Souto, J. A. (1993). Gestión de efluentes gaseosos: Desarrollo e implementación de un modelo de estructuras adaptables (Tesis Doctoral. Universidad de Santiago de Compostela).
- Souto, J. A., Pérez-Muñuzuri, V., De Castro, M., Souto, M. J., Casares, J. J., Lucas, T. (1998). Forecasting and diagnostic analysis of plume transport around a power plant. *Journal of Applied Meteorology*, 37(10), 1068-1083.
- Souto, M. J., Perez-Muñuzuri, V., Souto, J. A., De Castro, M., Casares, J. J. (1999). Forecasting of plume dispersion around a power plant. In *INSTITUTE OF MATHEMATICS AND ITS APPLICATIONS CONFERENCE SERIES* (Vol. 68, pp. 455-476). Oxford University Press.
- Souto, J. A., Castro, M. D., Casares, J. J., Souto, M. J., Perez-Munuzuri, V., Bermudez, J. L. (2000). Testing of an adaptive puff model for regulatory purposes around As Pontes power plant. *International Journal of Environment and Pollution*, 14(1), 198-207.
- Souto, M. J., Souto, J. A., Perez-Munuzuri, V., Casares, J. J., Bermudez, J. L. (2001). A comparison of operational Lagrangian particle and adaptive puff models for plume dispersion forecasting. *Atmospheric Environment*, 35(13), 2349-2360.
- Souto, J. A., Hermida, M., Casares, J. J., Bermudez, J. L. (2009). SAGA: a decision support system for air pollution management around a coal-fired power plant. *International Journal of Environment and Pollution*, 38(4), 444-461.
- Souto, J. A., Saavedra, S., Rodriguez, A., Dios, M., Cartelle, D., & Vellon, J. M. (2013). Evaluation of the PRESAXIO air quality forecasting system: PBL schemes WRF comparison and air quality modeling validation. In *Proceedings of the 15th International Conference on Harmonization within Atmospheric Dispersion Modeling for Regulatory Purposes*.
- Souto, J. A., Saavedra, S., Rodriguez, A., Dios, M., Lopez, J., Hernandez-Garces, A., Cartelle, D., Vellon, J. M., Gallego, N., Macho, M. L. (2014). PRESAXIO regional air quality modelling system: validation and applications. *International Journal of Environment and Pollution*, 55(1), 192-200.

Soriano, C., Fernández, A., Martín-Vide, J. (2006). Objective synoptic classification combined with high resolution meteorological models for wind mesoscale studies. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 91(1-4), 165-181.

Steyn, D. G., & Oke, T. R. (1982). The depth of the daytime mixed layer at two coastal sites: A model and its validation. *Boundary-Layer Meteorology*, 24(2), 161-180.

Stohl, A., Hittenberger, M., Wotawa, G. (1998). Validation of the Lagrangian particle dispersion model FLEXPART against large-scale tracer experiment data. *Atmospheric Environment*, 32(24), 4245-4264.

Strimaitis, D. (1988). EPA complex terrain model development: Final report.

Systems Applications International (SAI), 1995. User's guide to the variable-grid Urban Airshed Model (UAM-V) SYSAPP-95/027, 128pp.

Szopa, S., Foret, G., Menut, L., Cozic, A. (2009). Impact of large scale circulation on European summer surface ozone and consequences for modelling forecast. *Atmospheric Environment*, 43(6), 1189-1195.

Taseko Mines Limited. (2008). Taseko Prosperity Gold-Copper Project. Appendix 4-2-D: CALPUFF and CALMET Methods and Assumptions

Tartakovsky, D., Broday, D. M., Stern, E. (2013). Evaluation of AERMOD and CALPUFF for predicting ambient concentrations of total suspended particulate matter (TSP) emissions from a quarry in complex terrain. *Environmental Pollution*, 179, 138-145.

Tesche, T. W., Wilkinson, J. G., McNally, D. E., Kapahi, R., Oliver, W. R. (1988). Photochemical Modeling of Two SCCAMP 1984 Oxidant Episodes: Volume II: Modeling Procedures and Evaluation Results. Prepared for the US Environmental Protection Agency by Radian Corporation, Sacramento, CA.

Tesche, T. W., McNally, D. E., Morris, R. E., Emery, C. (2001). Evaluation of CAMx and Models-3/CMAQ Over the Lower Lake Michigan Region with Inputs from the RAMS3c and MM5 Models. prepared for the Coordinating Research Council, prepared by Alpine Geophysics, LLC, Ft. Wright, KY.

Thuillier, R. H. (1982). Dispersion characteristics in the lee of complex structures. *Journal of the Air Pollution Control Association*, 32(5), 526-532.

Thykier Nielsen, S., Deme, S., Mikkelsen, T. (1998). Description of the Atmospheric Dispersion Module RIMPUFF. RODOS report WG2_TN98_02 <http://www.rodos.fzk.de>.

- Truhetz, H., Gobiet, A., Kirchengast, G. (2007). Evaluation of a dynamic-diagnostic modelling approach to generate highly resolved wind fields in the Alpine region. *Meteorologische Zeitschrift*, 16(2), 191-201.
- Tsuang, B. J. (2003). Quantification on the source/receptor relationship of primary pollutants and secondary aerosols by a Gaussian plume trajectory model: Part I—theory. *Atmospheric Environment*, 37(28), 3981-3991.
- USGS (2008). U.S. Geological Survey, Technical report U.S. Geological Survey. Recuperado de: [<http://www.usgs.gov>].
- Valari, M., & Menut, L. (2010). Transferring the heterogeneity of surface emissions to variability in pollutant concentrations over urban areas through a chemistry-transport model. *Atmospheric Environment*, 44(27), 3229-3238.
- Valdenebro, V., Sáez de Cámara, E., Gangoiti, G., Alonso, L., García, J. A., Ilardia, J. L., González, N. (2013, April). Estimating hourly benzene concentrations in a highly-complex topographical environment in northern Spain using RAMS and the CALPUFF modeling system. In EGU General Assembly Conference Abstracts (Vol. 15, p. 12318).
- Van Egmond, N. D. & Kesseboom, H. (1983). Mesoscale air pollution dispersion models—II. Lagrangian puff model and comparison with Eulerian grid model. *Atmospheric Environment* (1967), 17(2), 267-274.
- Van Ulden, A. P., & Holtslag, A. A. M. (1985). Estimation of atmospheric boundary layer parameters for diffusion applications. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, 24(11), 1196-1207.
- Van Velzen, N., & Segers, A. J. (2010). A problem-solving environment for data assimilation in air quality modelling. *Environmental modelling & software*, 25(3), 277-288.
- Vautard, R., Beekmann, M., Roux, J., Gombert, D. (2001). Validation of a hybrid forecasting system for the ozone concentrations over the Paris area. *Atmospheric Environment*, 35(14), 2449-2461.
- Venkatesan, R., Mathiyarasu, R., Somayaji, K. M. (2002). A study of atmospheric dispersion of radionuclides at a coastal site using a modified Gaussian model and a mesoscale sea breeze model. *Atmospheric Environment*, 36(18), 2933-2942.
- Venkatram, A. (1980). Estimating the Monin-Obukhov length in the stable boundary layer for dispersion calculations. *Boundary-Layer Meteorology*, 19(4), 481-485.

- Venkatram, A. (1981). Estimation of turbulence velocity scales in the stable and the unstable boundary layer for dispersion applications. In *Air Pollution Modeling and Its Application I* (pp. 169-179). Springer US.
- Vestreng, V., Rigler, E., Adams, M., Kindbom, K., Pacyna, J. M., van der Gon, H. D.r, Reis, S., Travnikov, O. (2006). Inventory Review 2006; Emission Data reported to the LRTAP Convention and NEC Directive.
- Vestreng, V., Breivik, K., Adams, M., Wagner, A., Goodwin, J., Rozovskaya, O., Pacyna, J. M. (2005). Emission Data reported to LRTAP Convention and NEC Directive. Initial review for HMs and POPs.
- Vila-Guerau de Arellano, J., Duynkerke, P. G., Jonker, P. J., Builtjes, P. J. (1993). An observational study on the effects of time and space averaging in photochemical models. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 27(3), 353-362.
- Villasenor, R., Lopez-Villegas, M. T., Eidels-Dubovoi, S., Quintanar, A., Gallardo, J. C. (2003). A mesoscale modeling study of wind blown dust on the Mexico City Basin. *Atmospheric Environment*, 37(18), 2451-2462.
- Vivanco, M. G., Palomino, I., Vautard, R., Bessagnet, B., Martín, F., Menut, L., Jiménez, S. (2009). Multi-year assessment of photochemical air quality simulation over Spain. *Environmental modelling & software*, 24(1), 63-73.
- Vogelezang, D. H. P., & Holtslag, A. A. M. (1996). Evaluation and model impacts of alternative boundary-layer height formulations. *Boundary-Layer Meteorology*, 81(3-4), 245-269.
- Volta, M., Finzi, G., (2006). GAMES, a comprehensive gas aerosol modelling evaluation system. *Environmental Modelling and Software* 21, 587–594.
- Wang, F., Chen, D. S., Cheng, S. Y., Li, J. B., Li, M. J., Ren, Z. H. (2010). Identification of regional atmospheric PM₁₀ transport pathways using HYSPLIT, MM5-CMAQ and synoptic pressure pattern analysis. *Environmental Modelling & Software*, 25(8), 927-934.
- Wei, P., Cheng, S., Li, J., Su, F. (2011). Impact of boundary-layer anticyclonic weather system on regional air quality. *Atmospheric Environment*, 45(14), 2453-2463.
- Weil, J. C., & Brower, R. P. (1983). Estimating convective boundary layer parameters for diffusion application. Draft Report Prepared by Environmental Center, Martin Marietta Corp. for Maryland Dept. of Natural Resources.

- Weil, J. C., & Brower, R. P. (1984). An updated Gaussian plume model for tall stacks. *Journal of the Air Pollution Control Association*, 34(8), 818-827.
- Weil, J. C. (1985). Updating applied diffusion models. *Journal of climate and applied meteorology*, 24(11), 1111-1130.
- Weil, J. C. (1988). Plume rise. *Lectures on Air Pollution Modeling*. Editors, Venkatram A. and Wyngaard, J.C., 119-166.
- Weil, J.C. (1990) A diagnosis of the asymmetry in top-down and bottom-up diffusion using a Lagrangian stochastic model. *J. Atmos. Sci.*, 47, 501-515.
- Weil, J. C. (1991). Appendix C: Discussion of lofting model and related dispersion models. Modification of hybrid plume dispersion model (HPDM) for urban conditions and its evaluation using the Indianapolis data set. Vol. II. Electric Power Research Institute Rep. A089-1200 II, Electric Power Research Institute, Palo Alto, CA, 160 pp.
- Weil, J. C., Corio, L. A., Brower, R. P. (1997). A PDF dispersion model for buoyant plumes in the convective boundary layer. *Journal of Applied Meteorology*, 36(8), 982-1003.
- Weisman, B. (1976). On the criteria for the occurrence of fumigation inland from a large lake. *Atmospheric Environment* (1967), 10(2), 172-173.
- Wellburn, A., (1994). *Air Pollution and Climate Change: the biological impact*. Addison Wesley Longman Limited, Harlow, 268 pp.
- Wen, D., Lin, J. C., Millet, D. B., Stein, A. F., Draxler, R. R. (2012). A backward-time stochastic Lagrangian air quality model. *Atmospheric Environment*, 54, 373-386.
- Wesely, M. L., & Hicks, B. B. (1977). Some factors that affect the deposition rates of sulfur dioxide and similar gases on vegetation. *Journal of the Air Pollution Control Association*, 27(11), 1110-1116.
- Wetterzentrale, (2010). Wetterzentrale Top Karten. [Recuperado de <http://www.wetterzentrale.de/>]. Acceso 12/10/2010.
- Willis, G. E., & Deardorff, J. W. (1981). A laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convectively mixed layer. *Atmospheric Environment* (1967), 15(2), 109-117.
- Wheeler, N. (1990). Modeling of mixing depths during a southern California air quality study ozone episode. In *Proceedings of the AWMA International Specialty Conference on Tropospheric Ozone and the Environment* (pp. 19-22).

- White, B. R., & Kavanagh, J. F. (1991). A wind-tunnel study of atmospheric dispersion of a highly buoyant stack exhaust. 84th Annual Meeting & Exhibition of the Air & Waste Management Association, Vancouver, June, 1991.
- Whitford, J. (2009). Durham–York Air Quality Assessment. Appendix D. CALPUFF Methodology. Technical Study Report, Project No. 1009497.
- Willmott, C. J. (1981). On the validation of models. *Physical geography*, 2(2), 184-194.
- WMO, (2010). World Meteorological Organization. [Recuperado de <http://www.wmo.int/>]. Acceso 12/10/2010.
- Wolke, R., Knoth, O., Hellmuth, O., Schröder, W., Renner, E. (2004). The parallel model system LM-MUSCAT for chemistry-transport simulations: Coupling scheme, parallelization and applications. *Advances in Parallel Computing*, 13, 363-369.
- Wyngaard, J. C. (1988). Structure of the PBL. *Lectures on Air Pollution Modeling*. Editors, Venkatram A. and Wyngaard, J. C., 9-61.
- Xue, M., K. Droegemeier, V. Wong, A. Shapiro and K. Brewster (1995). ARPS Version 4.0 User's Guide. Center for Analysis and Prediction of Storms, University of Oklahoma, 100 E. Boyd, Suite 1110, Norman, OK 73019.
- Yamartino, R. J., Scire, J. S., Carmichael, G. R., Chang, Y. S. (1992). The CALGRID mesoscale photochemical grid model—I. Model formulation. *Atmospheric Environment*. Part A. General Topics, 26(8), 1493-1512.
- Yau, K. H., Macdonald, R. W., The, J. L. (2010). Inter-comparison of the AUSTAL2000 and CALPUFF dispersion models against the Kincaid data set. *International Journal of Environment and Pollution*, 40(1), 267-279.
- Yim, S. H., Fung, J. C., & Lau, A. K. (2009). Mesoscale simulation of year-to-year variation of wind power potential over southern China. *Energies*, 2(2), 340-361.
- Yim, S. H., Fung, J. C., Lau, A. K. (2010). Use of high-resolution MM5/CALMET/CALPUFF system: SO₂ apportionment to air quality in Hong Kong. *Atmospheric Environment*, 44(38), 4850-4858.
- Zannetti, P. (1981a). Some aspects of Monte Carlo type modeling of atmospheric turbulent diffusion. In 7th Conference on Probability and Statistics in Atmospheric Sciences, AMS. Monterey, CA.

Zannetti, P. (1981b). An improved puff algorithm for plume dispersion simulation. *Journal of Applied Meteorology*, 20(10), 1203-1211.

Zannetti, P. (1984). New Monte Carlo scheme for simulating Lagrangian particle diffusion with wind shear effects. *Applied Mathematical Modelling*, 8(3), 188-192.

Zannetti, P. (1990). *Air pollution modeling: theories, computational methods, and available software* (p. 444). Southampton: Computational Mechanics.

Zeng, J., Matsunaga, T., Mukai, H. (2010). METEX—A flexible tool for air trajectory calculation. *Environmental Modelling & Software*, 25(4), 607-608.

Zhou, Y., Levy, J. I., Hammitt, J. K., Evans, J. S. (2003). Estimating population exposure to power plant emissions using CALPUFF: a case study in Beijing, China. *Atmospheric Environment*, 37(6), 815-826.

Zilitinkevich, S. S. (1972). On the determination of the height of the Ekman boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 3(2), 141-145.

