



## 7<sup>mo</sup> Congreso de Medio Ambiente

Actas 7mo Congreso de Medio Ambiente AUGM  
22 al 24 de mayo de 2012. UNLP. La Plata Argentina

# MODELO DE DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES ATMOSFÉRICOS

Atmospheric pollutants dispersion model

María E Manzur <sup>\*a</sup>, Graciela Benzal <sup>b</sup>, Silvia N González <sup>c</sup>

<sup>a</sup> Cátedra de Química General, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán, Ayacucho 471, 4000 Tucumán, Argentina. [memanzur@fbqf.unt.edu.ar](mailto:memanzur@fbqf.unt.edu.ar)

<sup>b</sup> Instituto de Matemática, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán, Ayacucho 471, 4000 Tucumán, Argentina. [gbenzal@fbqf.unt.edu.ar](mailto:gbenzal@fbqf.unt.edu.ar)

<sup>c</sup> Instituto de Farmacia, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán., Ayacucho 471, 4000 Tucumán, Argentina. [sgonzalez@fbqf.unt.edu.ar](mailto:sgonzalez@fbqf.unt.edu.ar)

\*Autor para correspondencia: [memanzur@fbqf.unt.edu.ar](mailto:memanzur@fbqf.unt.edu.ar)

*Palabras claves: modelo gaussiano, simulación, calidad de aire*

*Keywords: gaussian model, simulation, air quality*

*Título abreviado: Simulación de contaminación atmosférica*

## ABSTRACT

The present work considers that the pollutant concentration is useful for the assessment of air pollution issues and evaluation of control strategies to minimize their impacts. Air quality models are used widely to simulate physical and chemical process in the atmosphere and they support environmental regulations. The gaussian model is commonly used to calculate the pollutant concentrations, like PM<sub>10</sub>. Some experimental parameters of Gaussian equation were estimated. The pollutant concentrations were calculated using MATLAB to all kind of Pasquill stability and graphics obtained to

several distances from the source. Comparisons between theoretical values from MATLAB and SCREEN3 MODEL of EPA were attained.

## **RESUMEN**

En el presente trabajo se aborda la temática de la contaminación atmosférica y se considera la concentración de contaminantes como un indicador ambiental, por lo tanto su monitoreo y determinación resulta una herramienta indispensable para conocer la calidad de aire atmosférico y diseñar estrategias de lucha contra la polución.

Los modelos de calidad de aire son utilizados para simular los procesos físicos y químicos de la atmósfera. El modelo de dispersión gaussiano es de gran aplicación y la ecuación que lo sustenta se utiliza en este trabajo para calcular los niveles de inmisión de PM<sub>10</sub>. Algunos parámetros de la ecuación gaussiana son estimados. Mediante el software matemático MATLAB se simulan las concentraciones de inmisión de PM<sub>10</sub> para las diferentes clases de estabilidad de Pasquill y distintas velocidades de viento. Posteriormente se comparan los valores obtenidos con MATLAB y con los del modelo SCREEN3 MODEL de EPA.

## **INTRODUCCIÓN**

La contaminación es un grave problema ambiental que afecta a todo el planeta de manera preocupante. Las sustancias químicas contaminantes presentes en la atmósfera producen un efecto nocivo en seres vivos o en el ambiente (Sans Fonfría & Ribas, 1999). La contaminación gaseosa está compuesta por material particulado (PM), compuestos volátiles y gases como dióxido y monóxido de carbono (CO<sub>2</sub>, CO), dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>), óxido nitroso (N<sub>2</sub>O) y otros producidos por procesos industriales. Las normas y guías para los contaminantes son recomendados por la Organización Mundial de la Salud (OMS) y los países se adaptan a ellas. En nuestro país no existe un marco regulatorio único sino una serie de normas nacionales, provinciales y comunales sobre temas particulares. Los modelos de calidad de aire usan

técnicas matemáticas y numéricas para simular los procesos físicos y químicos que afectan a los contaminantes cuando se dispersan y reaccionan en la atmósfera (Alcaide López, 2000). Los modelos de dispersión de contaminantes resuelven las ecuaciones de difusión en forma aproximada y obtienen resultados muy rápidamente (Sanín Cortés, 2002). El modelo de dispersión gaussiano considera que el penacho de contaminantes emitido por una chimenea sigue una distribución gaussiana perpendicular al movimiento convectivo principal. La ecuación de difusión gaussiana relaciona los niveles de inmisión en un punto con la cantidad de contaminantes vertidos a la atmósfera desde el foco emisor, teniendo en cuenta las condiciones de emisión de los gases y las características climáticas y topográficas del medio receptor. Se considera que el viento, la humedad, la temperatura y las precipitaciones tienen un papel importante en el aumento o disminución de la contaminación (Orozco Barrenetxea *et al.*, 2008). El viento generalmente favorece la dispersión de los contaminantes y la humedad juega un papel negativo en la dispersión de los mismos al aumentar la concentración de humos y polvo (Bustos Salas, 2004). La estabilidad de la atmósfera depende de la diferencia de temperatura entre una masa de aire y el que la rodea. Se presentan diferentes estabilidades (A, B, C, D, E, F) que se denominan *clases de estabilidad de Pasquill* (Henry, 1999). La simulación de concentración de contaminantes permite estimar la calidad de aire ambiental en una zona industrial, cuyos habitantes podrían estar expuestos a concentraciones que constituyen peligro para la salud humana. El presente trabajo considera el material particulado de tamaño inferior a 10 micrones, PM<sub>10</sub>, que actúa como sustrato huésped de sustancias y pueden activar reacciones, principalmente fotoquímicas (Vega de Kuyper, 2007).

## MÉTODOS

El modelo de dispersión gaussiano calcula los niveles de inmisión en un punto del espacio de coordenadas (x,y,z) donde el origen del sistema de coordenadas se fija en la base de la chimenea. La ecuación general del modelo de Gauss para la determinar la concentración de un contaminante en un punto espacial es:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-h}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+h}{\sigma_z}\right)^2\right] \right\}$$

donde,

$x, y, z$ : coordenadas espaciales en metros (m)

$C(x, y, z)$ : concentración de contaminante en un punto (x,y,z) ( g . m<sup>-3</sup>)

$Q$ : caudal de emisión (g.s<sup>-1</sup>)

$\sigma_y, \sigma_z$ : desviaciones estándar en las direcciones "y" y "z" respectivamente (m)

$u$ : velocidad media de viento (m.s<sup>-1</sup>) en el sentido del eje x

$h$ : altura efectiva de emisión (m)

Los gases emitidos por las chimeneas se mezclan con el aire ambiental y a medida que la pluma viaja se dispersa. Con el software matemático MATLAB 7.0 se simulan los valores de concentración (µg.m<sup>-3</sup>) utilizando el modelo de Gauss para diferentes clases de estabilidades de Pasquill. Lejos de la línea central, la pluma está representada por los coeficientes de dispersión,  $\sigma_y$  (horizontal) y  $\sigma_z$  (vertical). Los parámetros de dispersión se calculan en función de la distancia y la estabilidad atmosférica según la ecuación de Martin para áreas rurales. Los valores de concentración simulados con MATLAB son considerados los correspondientes al contaminante material particulado (PM<sub>10</sub>). La

simulación con MATLAB, para las estabilidades A, B, C, D, E y F, se realizó para distancias que varían de 100 m a 4000 m del foco emisor y en las siguientes condiciones: caudal de emisión,  $Q= 80 \text{ g.s}^{-1}$ ; altura de emisión de la chimenea,  $h =30 \text{ m}$  y altura de monitoreo,  $z = 2 \text{ m}$ . Las velocidades de viento  $u= 2, 4 \text{ y } 7 \text{ m.s}^{-1}$  son seleccionadas según la clase de estabilidad. A partir de las matrices y gráficas de concentraciones, simuladas con MATLAB 7.0, se analizan los valores máximos obtenidos para  $\text{PM}_{10}$  según las clases de estabilidades de Pasquill. Se estudia la correspondencia entre el valor máximo de concentración de  $\text{PM}_{10}$  con la velocidad del viento para algunas estabilidades. Se compara el comportamiento de las concentraciones de contaminantes para diferentes clases de estabilidades y distintas velocidades de viento.

Los valores de coeficientes de dispersión  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  se calculan de acuerdo a Martin con las ecuaciones:

$$\sigma_y = a x^b \quad \sigma_z = c x^d + f$$

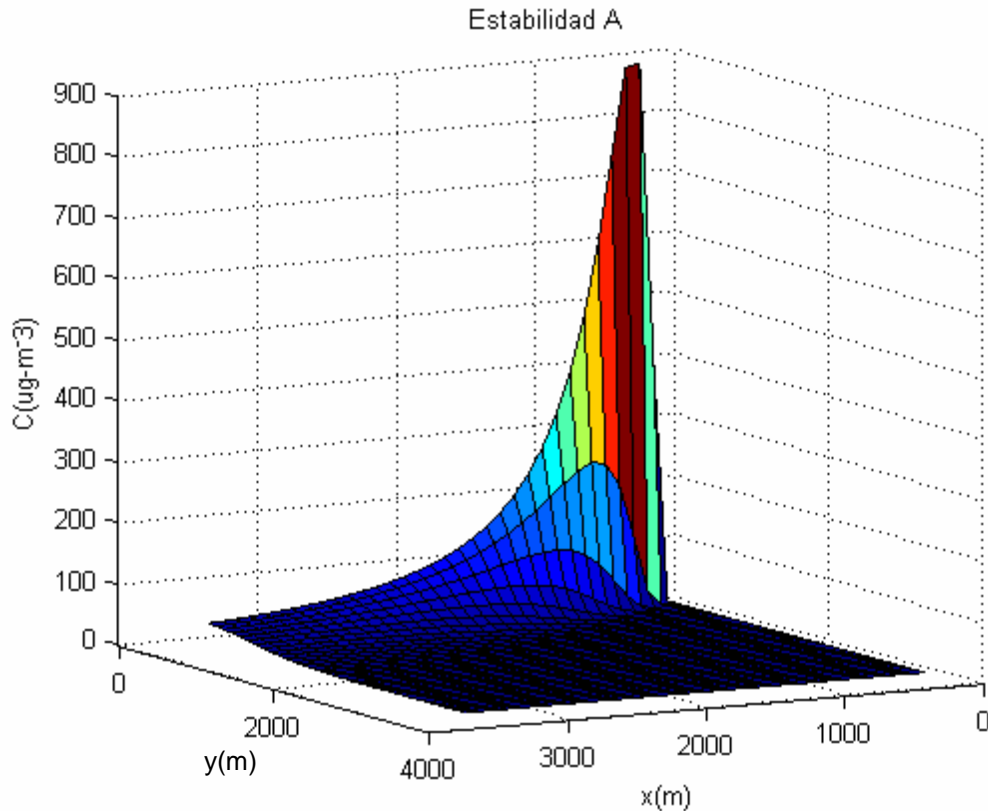
donde  $b=0.894$  y  $x$  se expresa en kilómetros. El resultado se obtiene en metros. El resto de las constantes,  $a$ ,  $c$ ,  $d$  y  $f$ , están tabuladas.

Las concentraciones de  $\text{PM}_{10}$  simuladas con MATLAB se comparan con los resultados obtenidos en las mismas condiciones con el modelo SCREEN3MODEL de la Versión 96043 de la EPA (Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos).

## RESULTADOS, DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

A partir de las simulaciones con MATLAB 7.0 se analizan las matrices de concentraciones y gráficas obtenidas para diferentes estabildades en área rural, velocidades de viento 2, 4 y 7 m.s<sup>-1</sup> y distancias comprendidas entre 100 m < x < 4000 m (Figuras 1 a 10). Las Figuras 1 a 5 corresponden respectivamente a clase de estabilidad A, E, F, C, D y la Figura 9 a la estabilidad B a la velocidad de viento  $u=2$  m.s<sup>-1</sup>. Las Figuras 6, 7 y 10 corresponden a velocidad de viento  $u=4$  m.s<sup>-1</sup>. Por último la Figura 8 corresponden a atmósfera estable D y velocidad de viento  $u=7$  m.s<sup>-1</sup>.

Para la estabilidad A, Figura 1, en las proximidades de la chimenea las concentraciones calculadas exceden ampliamente la norma legal de la provincia de Buenos Aires para PM<sub>10</sub>, igual a 150 µg.m<sup>-3</sup> promedio 24 h ( ley 5965, decreto reglamentario 3395/96) y al alejarse del foco emisor las mismas disminuyen abruptamente. A partir de los 1400 m las concentraciones dejan de ser peligrosas para la salud humana (OMS).

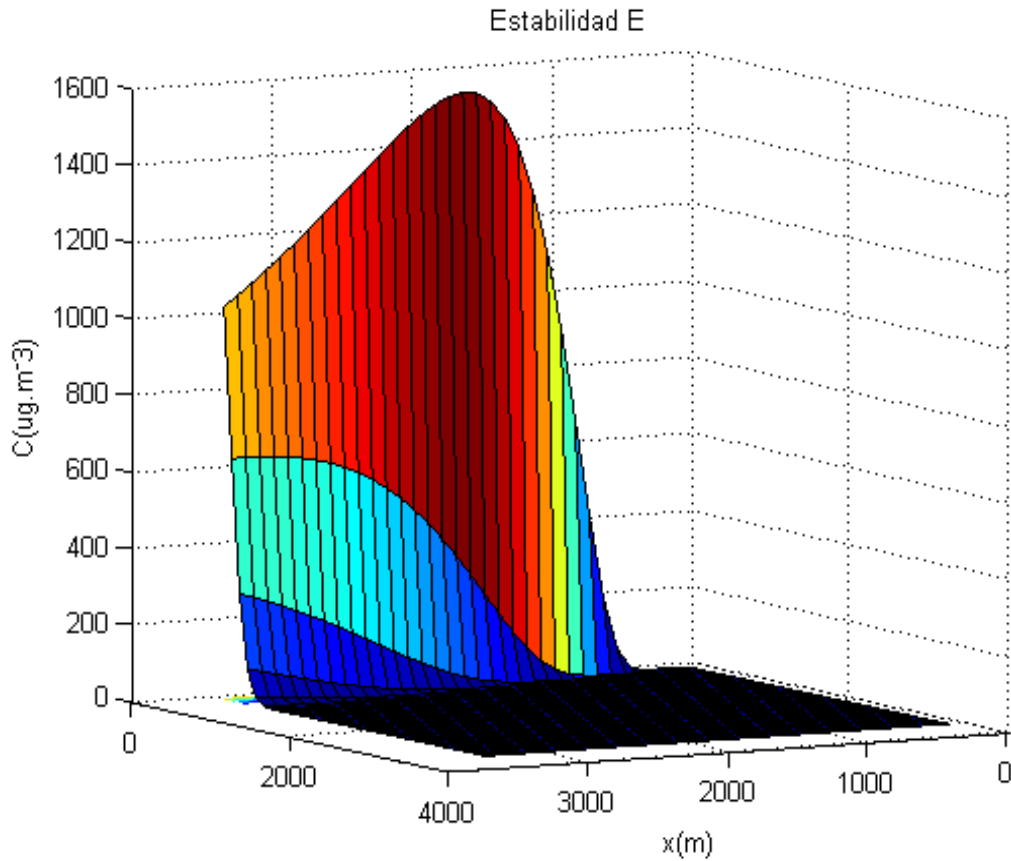


**Figura 1.** Valores simulados de concentración ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ), estabilidad A, área rural,  $u=2\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

**Figure 1.** Concentration ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ) simulated values, A stability, rural area,  $u=2\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

Para la estabilidad E, Figura 2, el máximo de concentración es  $1535.1 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  ocurre a una distancia de 1700 m del foco emisor. Las concentraciones resultantes para esta clase de estabilidad se encuentran dentro de los límites permitidos a distancias menores a los 700 m del foco emisor, a partir de esa distancia las concentraciones de  $\text{PM}_{10}$  exceden ampliamente la reglamentación vigente hasta los 4000 m del emisor. Se observa que en una amplia zona los valores de las concentraciones de  $\text{PM}_{10}$  no son aconsejables para la

salud.

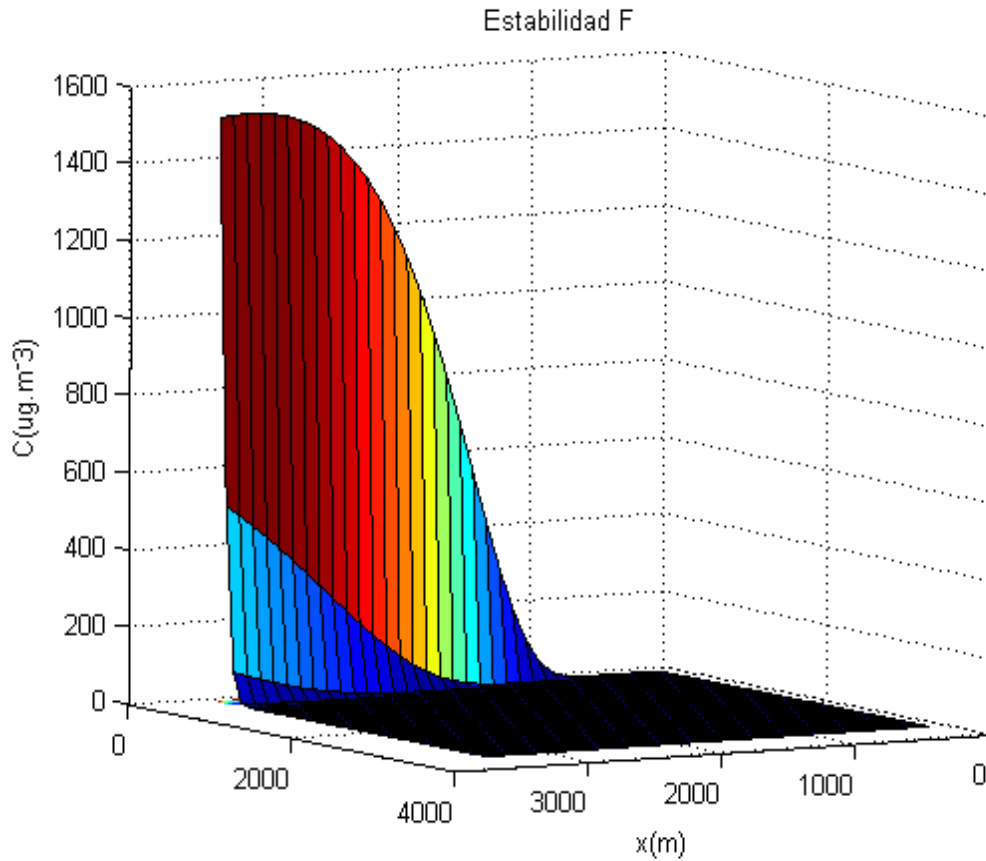


**Figura 2.** Valores simulados de concentración ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ), estabilidad E, área rural,  $u=2\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

**Figure 2.** Concentration ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ) simulated values, E stability, rural area,  $u=2\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

Para la estabilidad F, Figura 3, el comportamiento es similar al observado para la estabilidad E. El valor máximo de concentración de la Figura 3 es  $1513.7 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  y tiene lugar a 3200 m de distancia del foco emisor. En un amplio rango de distancias, más allá de 1200 m las concentraciones de  $\text{PM}_{10}$  son mayores a las permitidas por la norma legal.

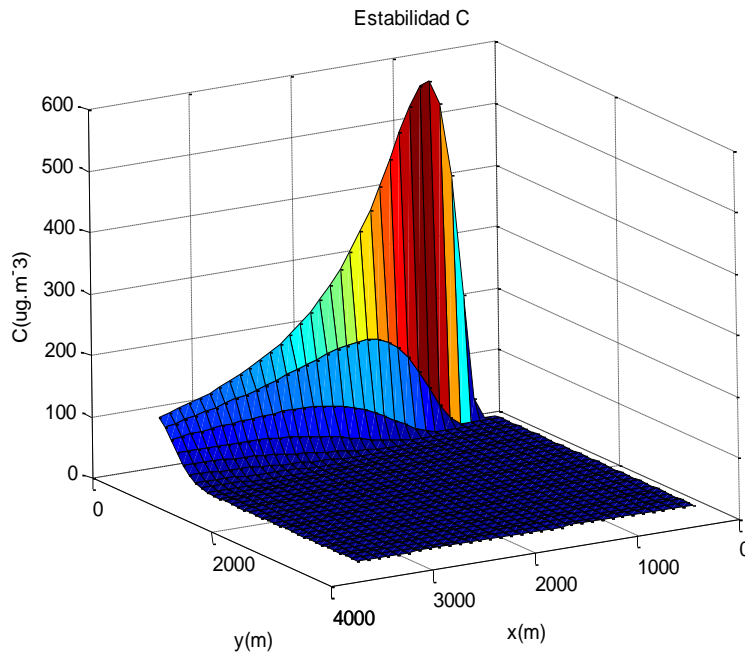




**Figura 3.** Valores simulados de concentración( $\mu\text{g.m}^{-3}$ ), estabilidad F, área rural,  $u=2\text{m.s}^{-1}$

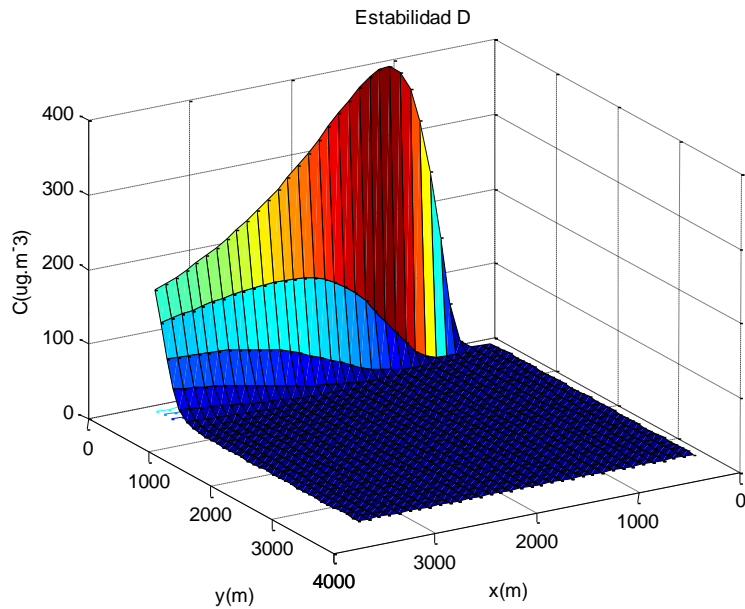
**Figure 3.** Concentration ( $\mu\text{g.m}^{-3}$ ) simulated values, F stability, rural area,  $u=2\text{m.s}^{-1}$

Para las clases de estabilidad C y D, Figura 4 y 5, se observa que el máximo se presenta cercano al foco emisor y luego los valores de concentraciones disminuyen con la distancia pero exceden ampliamente el máximo permitido por la legislación.



**Figura 4.** Valores simulados de concentración ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ), estabilidad C, área rural,  $u=2\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

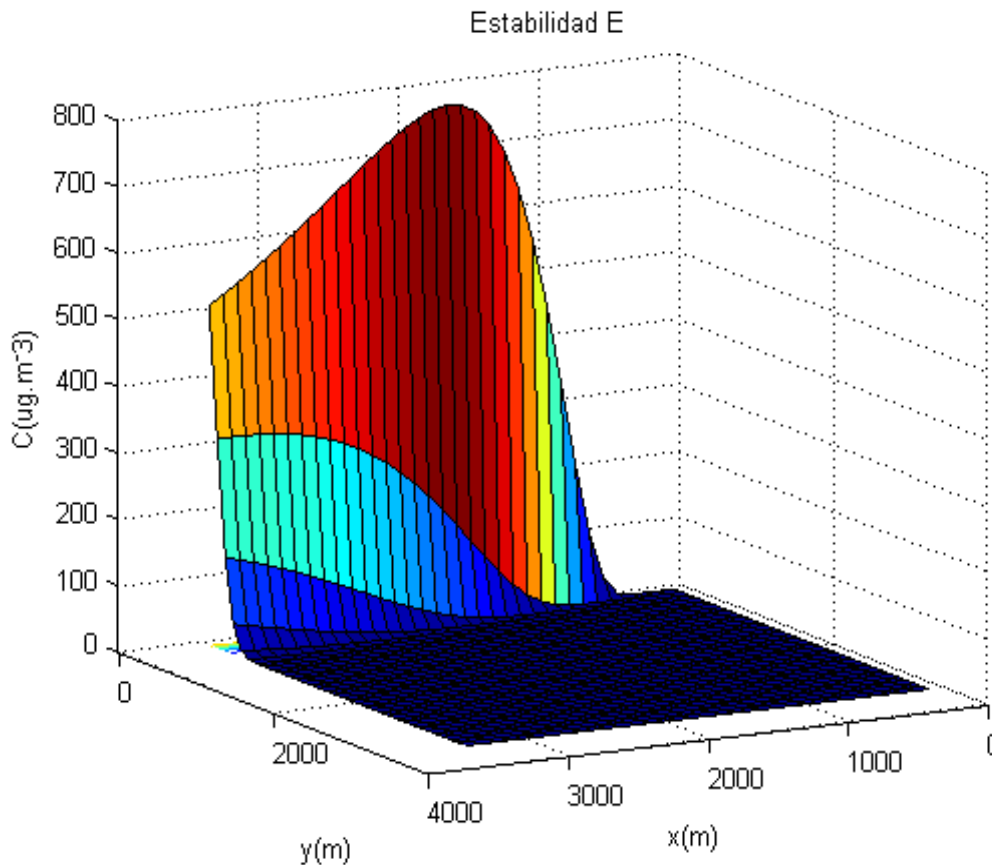
**Figure 4.** Concentration ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ) simulated values, C stability, rural area,  $u=2\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$



**Figura 5.** Valores simulados de concentración ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ), estabilidad D, área rural,  $u=2\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

**Figure 5.** Concentration ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ) simulated, D stability, rural area,  $u=2\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

La Figura 6 para la clase de estabilidad E y velocidad de viento  $4 \text{ m.s}^{-1}$  presenta un valor máximo de concentración de  $764.54 \mu\text{g.m}^{-3}$  a 1700 m de distancia; si se compara con el valor máximo resultante para  $u= 2 \text{ m. s}^{-1}$ , se observa que la concentración disminuye considerablemente conforme aumenta la velocidad del viento,  $u$ , mientras que la distancia al foco emisor no cambia.

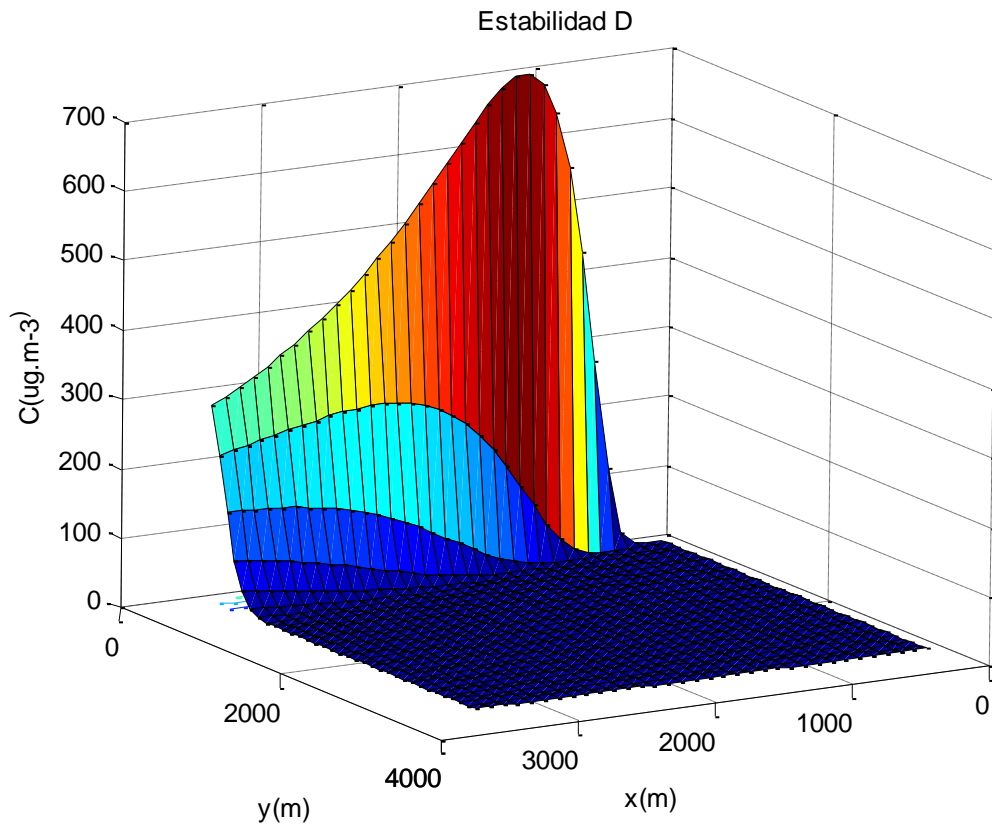


**Figura 6.** Valores simulados de concentración ( $\mu\text{g.m}^{-3}$ ), estabilidad E, área rural,  $u= 4\text{m.s}^{-1}$

**Figure 6.** Concentration ( $\mu\text{g.m}^{-3}$ ) simulated values, E stability, rural area,  $u= 4\text{m.s}^{-1}$

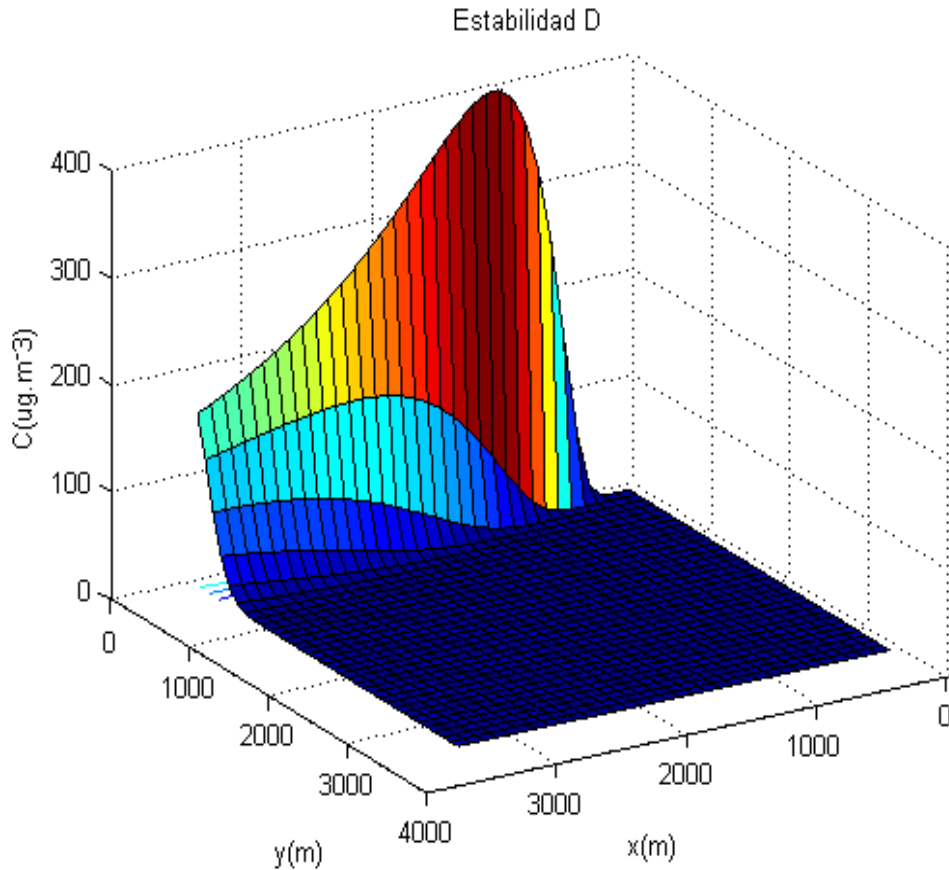
El valor máximo de concentración de  $\text{PM}_{10}$  para estabilidad D con velocidad de viento,  $u= 4 \text{ m.s}^{-1}$ , resulta  $697.84 \mu\text{g. m}^{-3}$  a 1100 m de distancia del foco emisor, Figura 7, mientras que para  $u= 7 \text{ m.s}^{-1}$ , Figura 8, el valor máximo de concentración no supera los  $400 \mu\text{g. m}^{-3}$ . Se evidencia nuevamente que la distancia a la que aparece el máximo de

concentración de  $PM_{10}$  no cambia considerablemente con el aumento de la velocidad de viento,  $u$ . El comportamiento de las gráficas que se observan en las Figuras 7 y 8 indicaría que por diferentes efectos las concentraciones de contaminante  $PM_{10}$  se mantienen mayores a las permitidas en una amplia zona, aún a grandes distancias del foco emisor.



**Figura 7.** Valores simulados de concentración ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ), estabilidad D, área rural,  $u= 4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$

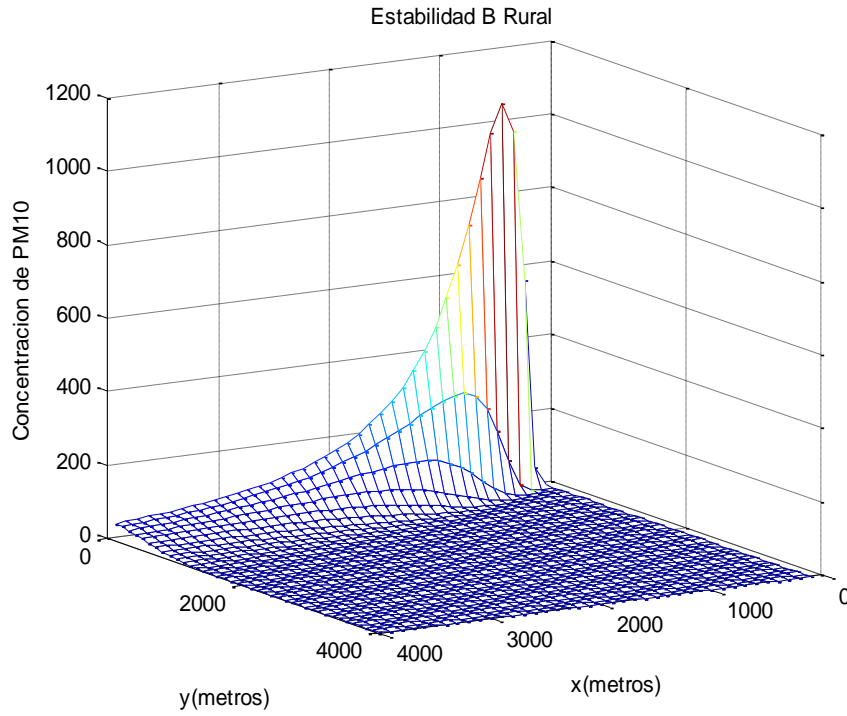
**Figure 7.** Concentration ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ) simulated values, D stability, rural area,  $u= 4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$



**Figura 8.** Valores simulados de concentración ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ), estabilidad D, área rural,  $u=7$   $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

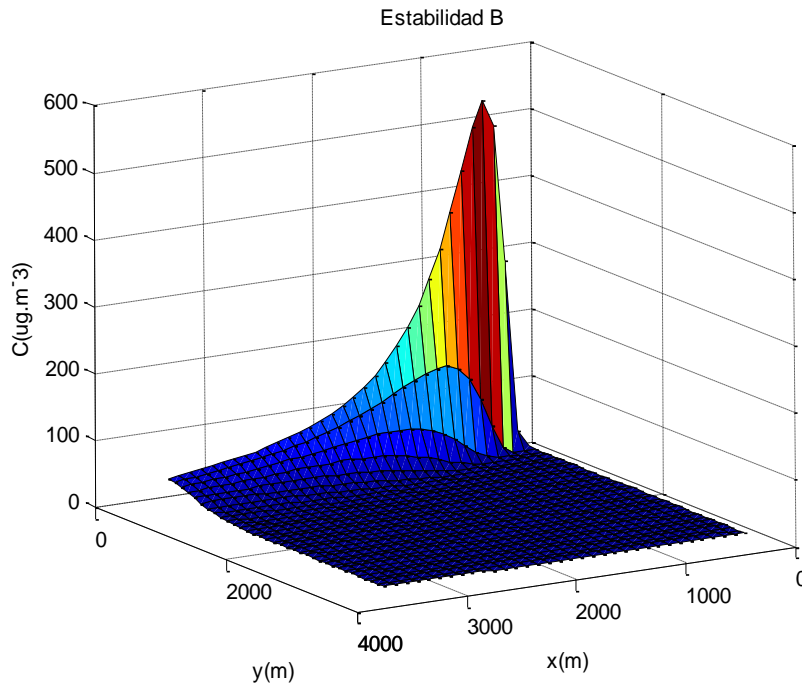
**Figure 8.** Concentration ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ) simulated values, D stability, rural area,  $u=7$   $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

Para la estabilidad B y velocidades de viento 2 y 4  $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ , Figuras 9 y 10, los valores máximos de concentraciones disminuyen aproximadamente a la mitad conforme aumenta la velocidad del viento,  $u$ , y resultan 1055 y 527.9  $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  respectivamente. La distancia a la que ocurre el máximo de concentración no depende de la velocidad del viento y se mantiene en un valor de 500 m y relativamente constante a una dada estabilidad.



**Figura 9.** Valores simulados de concentración ( $\mu\text{g.m}^{-3}$ ), estabilidad B, área rural,  $u= 2\text{m.s}^{-1}$

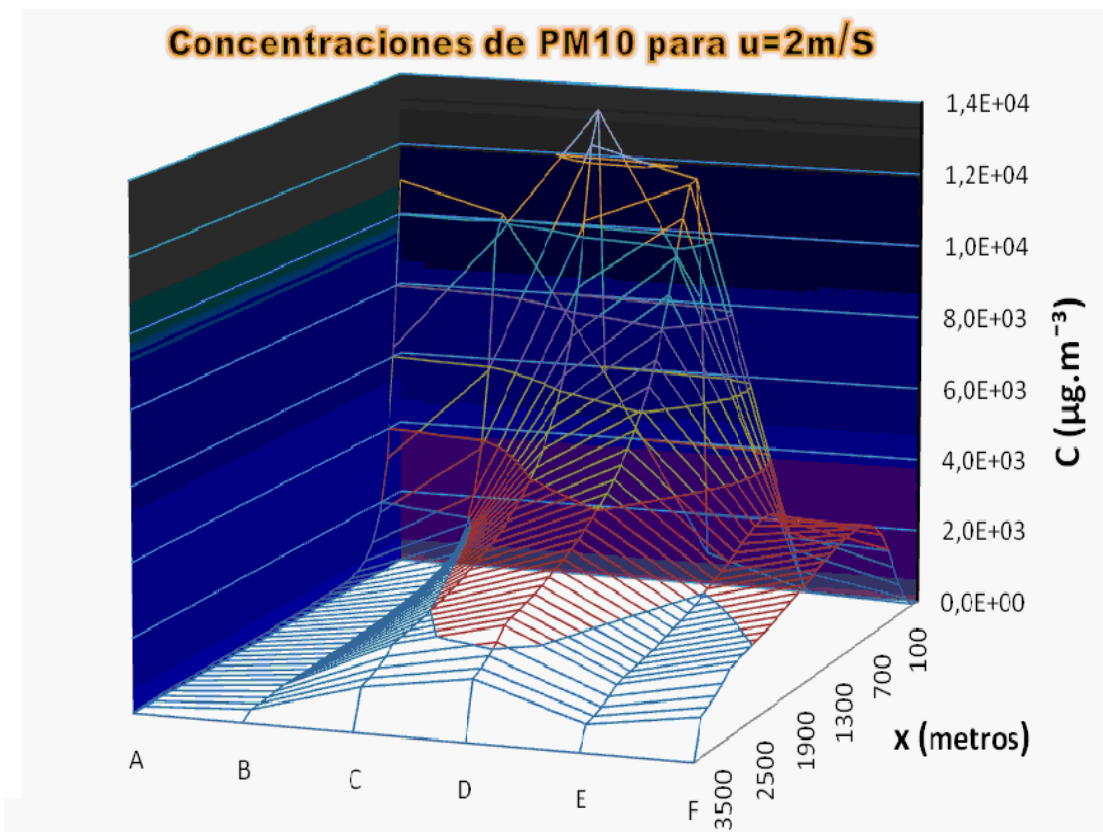
**Figure 9.** Concentration ( $\mu\text{g.m}^{-3}$ ) simulated values, B stability, rural area,  $u= 2\text{m.s}^{-1}$



**Figura 10.** Valores simulados de concentración ( $\mu\text{g.m}^{-3}$ ), estabilidad B, área rural,  $u= 4\text{m.s}^{-1}$

**Figure 10.** Concentration ( $\mu\text{g.m}^{-3}$ ) simulated values, B stability, rural area,  $u= 4\text{m.s}^{-1}$

Del análisis de los valores simulados con MATLAB y SCREEN3, para la estabilidad A, Figuras 1 y 11, se observa que en principio no existiría concordancia significativa para los valores máximos de concentración. Se podría emplear otro método de representación para realizar la comparación y además considerar factores de ajuste.



**Figura 11.** Valores simulados de concentración ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ) con SCREEN3, área rural, diferentes clases de estabilidad,  $u=2\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

**Figure 11.** SCREEN3 simulated values ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ), rural area, A to F stabilities,  $u=2\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

La Figura 11 muestra que los valores mínimos de concentraciones de  $\text{PM}_{10}$  de las estabildades E y F, se encuentran en sitios cercanos al foco emisor, presentando la estabilidad F menores valores. Del análisis de todas las clases de estabilidad se

corroborar que la clase F presenta los menores valores de  $PM_{10}$ . La forma de la gráfica para las clases E y F es similar, presentando valores máximos de  $PM_{10}$  aproximados alrededor de 1000 m de distancia, el cual aparece antes en la clase E. En un amplio rango de distancias, las concentraciones de  $PM_{10}$  se mantienen altas y disminuyen más lentamente en la clase F. Este comportamiento presenta además en las Figuras 2 y 3 (MATLAB), particularmente en la última.

Si analizamos en la Figura 11 el comportamiento de las clases C y D, se observa que en la primera el máximo aparece más cerca de la fuente y luego los valores de  $PM_{10}$  decrecen rápidamente con la distancia. Este comportamiento ya fue observado en el análisis comparativo de las clases E y F, Figuras 2 y 3 (MATLAB).

A fin de comparar los valores simulados con MATLAB y SCREEN3 se presentan las Tablas 1 y 2, correspondientes a 2900 y 1300 m del foco emisor, respectivamente, donde la velocidad de viento es  $2 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  y se mantienen los parámetros fijados. Se observa en la Tabla 1 que distancias mayores del foco emisor las estabilidades A y B, presentan concentraciones de  $PM_{10}$  que no son peligrosas para la salud.



**Tabla 1.** Valores simulados con MATLAB y SCREEN3 para concentración de contaminante PM<sub>10</sub> (µg.m<sup>-3</sup>), área rural, velocidad de viento 2 m.s<sup>-1</sup> y clases de estabildades A,B,C, D, E y F, a 2900 m del foco emisor

**Table 1.** MATLAB and SCREEN3 simulated values of PM<sub>10</sub> concentration (µg.m<sup>-3</sup>), rural area,  $u=2\text{ m.s}^{-1}$ , A to F stabilities at 2900 m from the steak.

Estabilidad de Pasquill	PM <sub>10</sub> MATLAB	PM <sub>10</sub> SCREEN3
A	38.4	92.9
B	86.6	372.1
C	227.5	1761
D	687.6	2519
E	1172.0	1176
F	1487.1	1852

**Tabla 2.** Valores simulados con MATLAB y SCREEN3 para concentración de contaminante PM<sub>10</sub> (µg.m<sup>-3</sup>), área rural, velocidad de viento 2 m.s<sup>-1</sup> y clases de estabildades A, B, C, D, E y F, a 1300 m del foco emisor.

**Table 2.** MATLAB and SCREEN3 simulated values of PM<sub>10</sub> concentration (µg.m<sup>-3</sup>), rural area,  $u=2\text{ m.s}^{-1}$ , A to F stabilities at 1300 m from the steak.

Estabilidad de Pasquill	PM <sub>10</sub> MATLAB	PM <sub>10</sub> SCREEN3
A	168.7	187.3
B	369.3	758.4
C	735.2	3640
D	1365.7	5290
E	1380.0	2552
F	296.3	3154

Los cálculos y simulaciones realizados forman parte de un trabajo de investigación donde se analizan los mismos respecto a valores monitoreados en sitios de un municipio, de acuerdo a esos resultados pueden considerarse las simulaciones con

MATLAB con mayor aproximación que los valores calculados con SCREEN3MODEL respecto a los determinados experimentalmente. Ante la ausencia de monitoreo del aire sería recomendable la simulación realizando suposiciones y consideraciones, tal como se efectuó en este trabajo. El aseguramiento de la calidad del aire merece ser una obligación a asumir por los municipios, que redundará en beneficios para la salud de la población y genera economías relacionadas con la salud pública, la educación, etc.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Alcaide López de la Manzanara M T. 2000. *Efectos ambientales del tráfico urbano*:
- *la evaluación de la contaminación atmosférica en Madrid*. Tesis Doctoral de Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Montes. España: 358 p
- Bustos Salas C. 2004. *Aplicación de modelos de dispersión atmosférica en la evaluación de impacto ambiental: análisis del proceso*. Tesis de Magister de la Universidad de Chile, Santiago, Chile: 86 p
- Henry JG & Heinke GW. 1999. *Ingeniería Ambiental*. 2ºed. Editorial Prentice Hall. México: 777 p
- Orozco Barrenetxea C, Pérez Serrano A, González Delgado MN, Rodríguez Vidal FJ & Alfayate Blanco JM. 2008. *Contaminación Ambiental. Una visión desde la Química*. Thomson Ed., Spain: 681 p
- Sanín Cortés N. 2002. *Construcción de un modelo tridimensional para ajuste de campos de viento y dispersión de contaminantes en la atmósfera*. Tesis Doctoral de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria. España: 188 p

- Sans Fonfría R & Ribas J de P. 1999. *Ingeniería Ambiental. Contaminación y tratamientos*. Alfaomega Grupo Editor SA de CV, México: 220 p
- Vega de Kuyper JC. 2007. *Química del Medio Ambiente*. Alfaomega Grupo Editor SA de CV, 2 ed, México: 234 p