



industriales  
etsii

Escuela Técnica  
Superior  
de Ingeniería  
Industrial

# UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial

## Limitaciones de los modelos gaussianos en la docencia de la simulación de la dispersión de especies en la atmósfera

TRABAJO FIN DE MÁSTER

MÁSTER EN INGENIERÍA AMBIENTAL Y PROCESOS  
SOSTENIBLES

**Autor:** José Luis Vicéns Moltó  
**Director:** Dr. José María Moreno Grau  
**Codirector:** Dra. Stella Moreno Grau



Universidad  
Politécnica  
de Cartagena

Cartagena 2016

## **Agradecimientos**

A los Drs.  
José María Moreno Grau  
y  
Stella Moreno Grau.

Por su paciencia, tolerancia y amabilidad.

Al Departamento de  
Ingeniería Química y Ambiental de la UPCT

A Flori,  
que me hace posible todo.

### **Aclaraciones a las ilustraciones y paginado.**

- 1.- Las ilustraciones, salvo que se cite lo contrario, son de elaboración propia.
- 2.- No se han omitido “páginas blancas de títulos” por el carácter digital del documento.
- 3.- No se han incluido las páginas en blanco en la numeración, para no aumentar ficticiamente la extensión, ni el índice.

Reflexión personal en torno al PFM

Un PFM es un acto de libertad académica personal que carece de más limitaciones que las del arte al que atañe y la racionalidad que se le supone al autor. Al amparo de esa libertad, el autor de este PFM pretende exponer unas reflexiones personales previas. En este caso, el PFM consiste básicamente en una propuesta de actuación docente para el proceso de enseñanza aprendizaje concerniente al Modelo Gaussiano de dispersión atmosférica. Este punto de partida plantea un interrogante: ¿Es pertinente una actuación docente como tema del Proyecto Final de un máster de Ingeniería Ambiental?

La Enseñanza de la Ingeniería está experimentando una profunda y constante conmoción intentando adaptarse a unos cambios en la sustancia y el ejercicio de la Ingeniería que tienen lugar a una velocidad inimaginable hasta hace pocos años. El proceso de enseñanza aprendizaje (proceso inexplicablemente novedoso) toma protagonismo, confiriendo en los últimos tiempos una importancia creciente a la metodología docente. En este sentido piensa el autor que la filosofía de este Proyecto Final encaja en la profunda reflexión interna a que debe someterse permanentemente la Enseñanza de la Ingeniería en estos tiempos. En referencia ya al contexto del tema específico tratado, el modelo gaussiano de dispersión atmosférica, si una propuesta docente puede contribuir a un acercamiento amistoso al mismo, puede tacharse de pertinente porque la Enseñanza de la Ingeniería y la Ingeniería misma deben entroncarse sin solución de continuidad.

También considera el autor, que un Proyecto Final no debe ser un trámite, un requisito administrativo que clausure un ciclo de aprendizaje, sino una oportunidad académica para iniciar un camino elegido y con proyección. Y también cree el autor que es correcto admitir como válido un Proyecto Final de Máster si el mismo reúne tres requisitos: versar sobre contenidos impartidos en el propio Master, aspirar a aportar algo nuevo o novedoso al ámbito de esos contenidos, y, finalmente, resultar de posible aplicación –al menos en teoría- en el entorno de dicho máster, pudiendo enriquecer al tiempo a la Institución en que se desarrolla. En este sentido, el autor piensa humildemente, que este Proyecto Final puede resultar pertinente.

Finalmente el autor aclara que no ha aplicado la estructura de *paper*, sino que ha intentado hilar un discurso amistoso, recurriendo al uso de los interrogantes para involucrar al hipotético lector. Estos interrogantes aspiran a constituir estímulos que orienten al lector por una senda reflexiva.

# Índice

Agradecimiento	
Dedicatoria	
Aclaraciones a ilustraciones y paginado	
Reflexión personal en torno al PFM	
Resumen	1
<b>Capítulo 1</b>	<b>4</b>
<b>1 La Enseñanza de la Ingeniería</b>	<b>4</b>
1.1. El aprendizaje en la Enseñanza de la Ingeniería	4
1.2. El aprendizaje metacognitivo	4
1.3. Obstáculos generales para el aprendizaje	5
1.3. Obstáculos concretos al aprendizaje	6
<b>2 Metodología propuesta en este trabajo</b>	<b>8</b>
2.1. <i>Learning doing</i>	8
2.2. Los pequeños grupos	8
2.3. Enfatización del caso/problema	8
2.4. Verbalización reflexiva	9
2.5. Uso de Matlab	9
2.6. El tutor facilitador	10
<b>3 Ciclo de aprendizaje reflexivo</b>	<b>11</b>
3.1. Concepto	11
3.2. Algoritmo	11
3.3. Matlab	12
3.4. Gráfico	12
3.5. Primera reflexión	12
3.6. Parámetros	13
3.7. Segunda reflexión	13
3.8. Revisión conceptual	13
<b>Capítulo 2</b>	<b>16</b>
<b>1 Estado del arte en la bibliografía</b>	<b>16</b>
1.1. Los clásicos	16
1.2. Los tutoriales	16
1.3. <i>Los papers</i>	17
<b>2 Los modelos</b>	<b>19</b>
2.1. A propósito de los modelos	19
2.2. Modelos físicos y modelos matemáticos	19
2.3. Modelos y discretización	20
2.4. Modelos de caja	20
2.5. Modelos discretizados	21
2.6. Ecuación de difusión advección	21
2.7. Enfoques lagrangiano y euleriano	22
2.8. Modelo gaussiano	23
2.9. Emisiones instantáneas	24
2.10. Dispersión de partículas	25
<b>Capítulo 3</b>	<b>26</b>
<b>1 Vigencia del modelo gaussiano</b>	<b>26</b>

1.1. La EPA	26
1.2. Mecanismos de evaluación de los modelos	26
1.3. ISCST	27
1.4. AERMOD	27
1.5. CALPUFF	28
1.6. Otros modelos gaussianos especializados	28
1.7. Modelos gaussianos <i>políticos</i>	29
1.8. Valoraciones absolutas de los modelos	30
1.9. Estudios comparativos modelos gaussianos	31
1.10. Modelos cuasi-gaussianos	31
<b>2 Valor docente del modelo gaussiano</b>	33
2.1. Razones específicas	33
2.2. Razones pedagógicas.	33
2.3. Razones para el uso de Matlab	34
<b>Capítulo 4</b>	38
<b>1 Introducción</b>	38
<b>2 Itinerario constructivista</b>	39
La ecuación de partida	40
<b>3 Etapas en el itinerario</b>	42
3.1. Parámetros de dispersión	42
3.2. La velocidad del viento	42
3.3. Altura eficaz	43
3.4. Algoritmos incorporados	43
3.5. Algoritmos para parámetros de dispersión	44
3.6. Algoritmos para la reflexión en el suelo	46
3.7. Algoritmos por la capa de inversión	48
3.8. Velocidad del viento y capa límite	50
3.9. Altura efectiva, momento y flotabilidad	52
Las ecuaciones de Briggs	53
Flotabilidad o momento	53
Predominio de flotabilidad	54
Predominio de momento	55
Trayectoria del penacho	55
<b>Capítulo 5</b>	58
<b>1 Introducción</b>	58
<b>2 Emisión instantánea y <i>puffs</i></b>	59
2.1. La dosis recibida	60
2.1.1. Emisión a cota cero	61
2.1.2. Emisión desde altura	62
2.2. Ausencia de viento	62
2.3. Parámetros de dispersión	63
<b>3 Partículas y ecuación de Ermak</b>	64
3.1. Dispersión atmosférica particulada	64
3.2. Modelo gaussiano y dispersión de partículas	65
3.3. Algoritmos tradicionales	65
3.4. Modelo de Haan	67
3.5. Ecuación de Ermak	67
<b>Capítulo 6</b>	72
<b>1 Introducción</b>	72
1.1. Sobre el aprendizaje, teoría y práctica	72



<b>2 Modelo, caso y problema</b>	74
2.1. El modelo	75
2.2. El caso	76
2.2. El problema	76
2.3. Un ejemplo	76
<b>3 Sensibilidad de los modelos</b>	79
<b>4 Manejo de los modelos en Matlab</b>	80
<b>5 Ejemplo de análisis de sensibilidad</b>	83
5.1. Sensibilidad respecto de la velocidad	83
5.2. Sensibilidad respecto a la altura eficaz	84
<b>6 Análisis de sensibilidad de dos parámetros</b>	86
6.1. Distancia constante, viento como parámetro	87
6.2. Viento constante, distancia como parámetro	88
<b>7 Representaciones tridimensionales</b>	90
<b>8 Reflejo en el suelo y capa de inversión</b>	92
9 Otras opciones gráficas	95
<b>Capítulo 7</b>	97
<b>1 Ecuación de Ermak</b>	97
<b>2 Ecuaciones convencionales</b>	101
<b>3 Representaciones de los puffs</b>	103
<b>Capítulo 8</b>	108
<b>1 Cálculo inverso de la dispersión atmosférica</b>	108
1.2. Planteamiento matemático general	109
1.3. Herramienta concreta	110
1.4. Pasos del ajuste	110
1.5. Valoración del resultado	111
1.6. Estructura de la sentencia tipo	112
<b>2 Cálculo inverso con datos de la línea media</b>	114
2.1. Procedimiento y resultados con tres receptores	114
2.2. Resultado con seis receptores	116
<b>3 Cálculo inverso con datos dispersos</b>	117
3.1. Aumento de la imprecisión en los receptores	118
<b>4 Cálculo con ubicación desconocida</b>	120
<b>Capítulo 9</b>	125
Conclusiones	125

Resumen

La atmósfera, el aire en un sentido coloquial, se caracteriza –entre otras cosas- por no conocer las fronteras que se detallan en los libros de geografía, y por estar presente en todo momento y en todo lugar. Baste esto, para aceptar la trascendencia que tiene el conocimiento de cómo se dispersan en su seno los contaminantes que se generan tanto por emisiones industriales, como por el tráfico urbano o por el capítulo de accidentes que comprende desde incendios forestales hasta accidentes en centrales nucleares.

El estudio de la dispersión atmosférica pretende conocer los niveles de concentración de los agentes dispersos a partir de una emisión, y precisar cómo se extienden estos por la atmósfera. Todo ello con la finalidad de prever el estado de la atmósfera para procurar a tiempo medidas que eviten su deterioro y los posibles daños biológicos derivados de este deterioro.

Una herramienta adecuada para este conocimiento es la elaboración de modelos que permitan tanto describir situaciones actuales de la dispersión y anticipar su evolución, como prever las situaciones que se puedan generarán ante emisiones previsibles, o imaginarias en un contexto metodológico de política de escenarios.

En el momento actual, las agencias de la máxima autoridad en los temas de medio ambiente certifican y actualizan determinados modelos de utilidad pública y privada, que gozan de aceptación universal. Estos modelos derivan de, y están nucleados por, el modelo gaussiano de dispersión atmosférica, cuya expresión más representativa es la fórmula de Sutton.

Este trabajo propone una actuación docente para facilitar un acercamiento amistoso del alumno de ingeniería al modelo gaussiano de dispersión con una doble finalidad. La primera facilitarle la adquisición de contenidos de una materia de innegable interés. La segunda, posicionarlo en una adecuadas disposiciones cognitiva y actitudinal para avanzar hacia los complejos modelos oficiales de dispersión atmosférica a los que nos hemos referido.

¿Realmente hace falta procurar ese acercamiento amistoso?

Los recorridos curriculares vigentes no contemplan la adquisición por parte del alumno de habilidades operacionales en algún lenguaje de cálculo y programación, lo que limita la capacidad del alumno para el manejo de algoritmos complicados o de uso penoso. En todo caso, el alumno puede resolver un ejercicio con un resultado numérico aislado, un caso, pero no puede ubicarlo en un contexto de problema, de manera de comportarse un fenómeno. Esta misma carencia limita al alumno a la representación bidimensional distorsionando una realidad ya tridimensional, sin considerar el tiempo. Estas dos

circunstancias desproveen de atractivos cognitivos el modelo gaussiano de dispersión, cerrándole el paso al aprendizaje significativo y no de caja negra de los modelos de ejercicio profesional.

En este trabajo se propone una actuación docente asistida con Matlab, para facilitar el aprendizaje metacognitivo del modelo gaussiano de dispersión.

Se estructura en nueve capítulos y un anejo en el que se consignan algunos de los programas de Matlab utilizados.

El primer capítulo se compone de tres apartados. En el primer apartado se exponen los fundamentos teóricos del hecho de que el aprendizaje en la enseñanza de la Ingeniería debe trascender a su dimensión estrictamente cognitiva, atendiendo especialmente al aprendizaje metacognitivo como peculiaridad propia de sus contenidos. En el segundo apartado se exponen las directrices metodológicas con que se desarrolla esta actuación docente, basada en el aprendizaje en pequeños grupos, la facilitación tutorizada, y la evocación recurrente. El tercer apartado presenta un proceso reflexivo propio que comprende la dualidad caso problema y la exploración de la sensibilidad de los modelos. Finalmente se justifica la razón del uso de Matlab como herramienta específica.

El segundo capítulo consta, a su vez, de dos apartados. En el primero se analizan las tendencias advertidas en de la bibliografía consultada para este trabajo, como resumen del estado del arte de la modelización gaussiana de la dispersión atmosférica. No se listan las fichas bibliográficas, que se reservan para, en su caso, en un anexo con paginación independiente. En el segundo apartado se expone el concepto de modelo de dispersión atmosférica, su tipología general, y el camino lagrangiano y euleriano para llegar a la ecuación de Sutton mediante las soluciones aproximadas de la ecuación en derivadas parciales de la difusión-advención.

El tercer capítulo valora la vigencia del modelo gaussiano de dispersión atmosférica y su consiguiente interés académico.

El cuarto capítulo desgana el itinerario conceptual constructivista que conduce desde la ecuación de Sutton hasta la filosofía de los modelos de mayor difusión y uso por la Agencia el Medio Ambiente de Estados Unidos (EPA o USEPA).

El quinto capítulo muestra dos adaptaciones conceptuales del modelo gaussiano. La primera son los *puffs* gaussianos como modelo de emisiones discontinuas. La segunda, muestra las adaptaciones del modelo Gaussiano de dispersión atmosférica a la dispersión de partículas, por la peculiaridad de su entidad gravitatoria, mediante la ecuación de Ermak.

El sexto capítulo desarrolla en el entorno Matlab los scripts que se corresponden con las ecuaciones anteriormente expuestas, con la finalidad docente previamente expuesta de su uso en un ciclo reflexivo, y exposición de la estructura y funcionamiento de los modelos complejos.

El séptimo capítulo desarrolla los scripts de simulación de emisiones instantáneas y emisiones particuladas.

El octavo capítulo apunta una opción para el cálculo inverso de la dispersión atmosférica mediante el modelo gaussiano y el lenguaje Matlab.

El trabajo concluye con el capítulo nueve, que formula las conclusiones.

# Capítulo 1

# 1 La Enseñanza de la Ingeniería.

Ante este título, cabe preguntarse: ¿Hay algo de especial en la Enseñanza de la Ingeniería? Aunque lo indicado es preguntarse qué tiene de especial el aprendizaje en la Enseñanza de la Ingeniería.

## 1 El aprendizaje en la enseñanza de la Ingeniería

La Enseñanza de la Ingeniería es el proceso de enseñanza que está experimentando la transformación más intensa en el ámbito docente superior, hasta el punto de que puede asignársele el papel emblemático en el reciente proceso de tránsito desde la Universidad como Centro de Enseñanza e Investigación, a la Universidad como Centro de Aprendizaje (Biggs, 2005). En ninguna otra como en la Enseñanza de la Ingeniería es tan urgente que la enseñanza sea un elemento subordinado al aprendizaje, con la finalidad de egresar ingenieros competentes.

Las competencias que integran el proceso de enseñanza-aprendizaje en la Enseñanza de la Ingeniería tienen como finalidad capacitar al alumno para actuar sobre la realidad física, tanto en su vertiente material, como en el cada vez más amplio ámbito de la señal. Es cierto que una gran parte del ejercicio de la profesión de Ingeniero se desenvuelve en la gestión de ingenios previos, pero el desiderátum de la profesión de ingeniero es la innovación, tanto mediante la creación del diseño total de nuevos procesos, como con la modificación y la mejora de los procesos técnicos ya operativos. Y sin duda la capacidad para el diseño, la innovación y la optimización dependen en gran medida de la solidez del aprendizaje metacognitivo en el periodo académico.

## 2 El aprendizaje metacognitivo

El término metacognitivo goza del dudoso status de estar de actualidad. Con el nebuloso apelativo de *aprender a aprender*, se ha extendido la especie de que el aprendizaje metacognitivo es un método más, un proceso más para facilitar el aprendizaje. Pero lo cierto es que no hay un método de aprendizaje metacognitivo como tal, lo que hay es estrategia, estilo, actitud. Lo que hay es metacognición. Para Flavell (1979) esta metacognición conjuga dos hechos. El primero, el conocimiento que el individuo tiene de los procesos y productos cognitivos propios. El segundo, el análisis y evaluación de ese conocimiento para propiciar su regulación y organización. Burón (1996) concreta en que la metacognición se destaca por el conocimiento de los objetivos, la elección de

las estrategias adecuadas, la auto-evaluación sobre la validez de estas estrategias y la propia capacidad para desarrollarlas, y, finalmente la actitud para la evaluación de los resultados a la luz de los objetivos. Esta búsqueda de convergencia entre objetivos y resultados, es lo que le confiere validez para la Enseñanza de la Ingeniería, que no sólo pretende conseguir que se sepa y se sepa hacer, sino que se sepa actuar.

No se trata, por tanto, del mantra *aprender a aprender* sino de aprender haciendo, un hacer que puede (y acaso debe) comenzar haciendo lo que se sabe, haciendo *ejercicios de lo aprendido*, y que después, cuando el bagaje cognitivo mínimo está asentado y contrastado con la acción, alcanza dimensión metacognitiva aprendiendo al hacer cosas nuevas, al *resolver problemas*, alcanzando la capacidad para generar procedimientos. De modo que este aprendizaje metacognitivo resulta también esencial para el aprendizaje colaborativo y el aprendizaje autónomo, que tanta atención acaparan últimamente, y que se basan en gran medida en la capacidad individual de autorregular el aprendizaje para sí mismo o para el grupo del que formas parte en un momento dado para un proceso de aprendizaje o de diseño.

Esta autorregulación tan valorada, que parece ser la clave del ejercicio cognitivo, la actuación ingenieril, se basa en tres elementos: cognición, metacognición y motivación. La cognición incluye habilidades necesarias para codificar, identificar y analizar contenidos, retener en la memoria, y tener recursos para recordar recuperando la información mediante la evocación, la rememoración y el reconocimiento. La metacognición incluye habilidades que permiten a los iniciados entender y calibrar sus propios procesos cognitivos para utilizarlos en aras de consecución de objetivos determinados. La motivación incluye creencias y actitudes que afectan el uso y desarrollo de habilidades cognitivas y metacognitivas. Cada uno de estos tres componentes son necesarios, pero no suficiente, para la autorregulación (Schraw, 2008).

### **3 Obstáculos generales para el aprendizaje metacognitivo**

¿Es sencillo fomentar el aprendizaje metacognitivo en los estudiantes de ingeniería?

No parece que sea así. La mayoría de los alumnos de ingeniería que se incorporan a las Escuelas presentan una limitación en su capacidad de visualización cognitiva en el sentido de que no aciertan a superar la bidimensionalidad. Y de igual modo se encuentran atrapados en un estado de sometimiento al pensamiento y razonamiento lineales, en detrimento de una mentalidad holística o sistémicos. La limitación bidimensional, se debe en gran medida a la ausencia de pensamiento geométrico de la enseñanza de la matemática en los estudios de pregrado. En tanto que la carencia de



capacidad de pensamiento sistémico deriva de la orientación conductista y lineal del conjunto de la enseñanza en el pregrado.

Esta bidimensionalidad y linealidad, favorecen la propensión a la simplificación de la modelización matemática, evitando la presencia de más de una variable independiente, en especial si las variables son de diferente naturaleza. Esta simplificación conduce a una percepción estática, plana, como fotograma a fotograma, del conocimiento de cualquier parcela de la realidad problema, al resultar dificultosa la presencia añadida de la variable temporal.

Esta disociación entre la evolución temporal y la evolución espacial dificulta la comprensión de no pocos sistemas ingenieriles, porque siembra ideas como las de que hay sistemas que cambian sin que corra el tiempo, sin la noción de duración, de ritmo, o sistemas que son pero que no están porque hay en ellos un antes y un después pero sin poder aventurar cambios. La incapacidad para pensar holísticamente, deriva de una *mentalidad antigua* en la que la realidad física se desarrolla como procesos y secuencias, en lugar de como sistemas e influencias. Esta dificultad procura una dificultad cognitiva para el análisis multivariable, lo que se traduce en una inmediata dificultad, cuando no aversión, para relacionarse con las ecuaciones diferenciales, en especial con las ecuaciones en derivadas parciales.

Las repercusiones de la visualización bidimensionalidad, suponen una aversión al croquis a mano alzada y al dibujo manual en general, una débil prospectiva tridimensional en el diseño tridimensionalidad (Gardner, 2001) y una desubicación cognitiva de las magnitudes vectoriales, con una percepción estrictamente algebraica del cálculo vectorial diferencial, infravalorando su naturaleza geométrica.

#### **4 Obstáculos concretos al aprendizaje metacognitivo del modelo gaussiano de dispersión atmosférica.**

¿Se pueden identificar obstáculos relevantes para este aprendizaje en particular?

En el aprendizaje del modelo Gaussiano de dispersión atmosférica cabe detectar diferentes obstáculos específicos que conducen fatalmente al desarrollo de un aprendizaje superficial.

La dificultad general para simultanear variables independientes de diferente naturaleza se manifiesta por la dificultad de armonizar modelos de emisión estacionaria y de emisión discontinua, como referentes de un mismo proceso por variaciones de algún parámetro externo (como es el caso de la velocidad del viento).

La némesis algebraica de la modelización, genera una dificultad para asimilar el mestizaje de los planteamientos analíticos con correlaciones teórico-experimentales (como es la determinación de los parámetros de dispersión) que lleva a la presencia de algoritmos con exponentes fraccionarios o de orden superior a dos, frente a los que al alumno le resulta difícil ejercitar la intuición geométrica, intuición que sí puede ejercitar cuando se tropiezan con expresiones lineales o cónicas, dado el carácter de dependiente de experiencia acumulada de la intuición matemática (Dehaene, 2014).

Otro obstáculo radica en la falta de efectividad de las ilustraciones que acompañan habitualmente los textos docentes. Estas ilustraciones pretenden relacionar los islotes conceptuales aislados, pero no lo consiguen por la naturaleza pasiva con la que el alumno se relaciona con ellas. Efectivamente el alumno tiene a menudo ante sí ilustraciones que no siempre sabe de dónde vienen, ni a donde van, con el peligro añadido de convertirse en imágenes para aprender de memoria a los efectos de conseguir un frágil, transitorio y fugaz bagaje cognitivo para superar a duras penas el escollo del examen.

Finalmente, el cuarto obstáculo consiste en la dificultad competencial procedimental de los alumnos para resolver en tiempo y forma razonables las ecuaciones no lineales con que se encuentran al finalizar los ejercicios de la parte de problemas de las materias, de modo que en lugar de una reflexión sobre el itinerario conceptual para la solución del problema, el alumno invierte su tiempo en un forcejeo matemático que corresponde a otras competencias curriculares de las que está insuficientemente dotado.

## 2 Metodología propuesta en este trabajo

Descansa en la filosofía del *learning doing*, apoyada en el aprendizaje de pequeños grupos

### 1 *Learning doing*

Se fundamenta en la filosofía del *learning doing* de Dewey (2007), Gibbs (1988) o Kolb (1984), en demanda de un aprendizaje profundo (Biggs, 2005), que es inseparable del aprendizaje metacognitivo, porque precisa desbordar y superar la simple adquisición (probablemente temporal) de información, para constituir una integración, una construcción de un sistema personal de almacenamiento y estructura de conocimiento.

### 2 Los pequeños grupos

La metodología de ejecución parte del funcionamiento de pequeño grupo (Exley y Dennick, 2009), no se comparte ordenador y se disponen las mesas individuales con un amplio pasillo, con uno o dos alumnos a cada lado, en cada fila; de modo que el profesor, actuando como tutor facilitador, ocupa el pasillo central, desde donde controla visualmente el desarrollo de las actuaciones de todos los alumnos. Ello permite aplicar el principio del vehículo lento del convoy, de modo que no se deja a nadie atrás, y el tutor asiste en tiempo real a cualquier tropiezo de un alumno.

### 3 Enfatización del caso/problema

El tratamiento ingenieril de un sistema físico pasa por su modelización al menos, en caso de no poder proceder a su simulación. El estudiante siempre trata con modelos matemáticos. Pero el uso que hace de ellos habitualmente, resulta improductivo. Careciendo de las herramientas de un lenguaje que le permita tanto explorar la sensibilidad de un modelo, como acompañarlo de un apoyo gráfico adecuado, debe conformarse en la mayoría de las ocasiones con unos cálculos *a ciegas* buscando *la solución*, habitualmente un número. Esto convierte en improductiva la relación con el modelo, que se ha convertido simplemente en la fórmula en la que, sustituidos los datos, proporciona los dígitos que conducen al aprobado. Nada queda interiorizado.

La propuesta de este trabajo es que los modelos, en este caso el de la dispersión gaussiana, son el objetivo del aprendizaje. Que el problema es conocer y controlar el modelo, explorando su respuesta frente a las variaciones de los parámetros que lo configuran, conociendo su comportamiento y su respuesta. Y que el ejercicio resuelto

con resultado de uno o varios números, es el caso; la particularidad que no cobra sentido en el aprendizaje si no se inserta en la generalidad del sistema, que es el modelo.

#### **4 La verbalización reflexiva**

En un entorno abocado a las TICs, todo lo que tiene relación con la comunicación ofrece especial interés. La verbalización es la clave básica de la comunicación y la generalización del conocimiento (Vigotski, 2010). Se admite que el ser humano piensa verbalizando, asumiendo y aceptando una “génesis del pensamiento en la palabra”, que se plasma “articulando el pensamiento” (Dewey, 2010; Kolb, 1984; Domingo y Gómez, 2014; Carruthers, 1998). La matemática no es una excepción, simplemente utiliza otro lenguaje, como es también el caso de la música. Existen tendencias a considerar un pensamiento no verbal, y una coexistencia de varios pensamientos, como ocurre con la cohabitación de distintos tipos de inteligencia (Gardner, 2003). En este trabajo se apela en concreto a la verbalización concurrente (Ericsson y Simón, 1993), que en nuestro caso consiste en verbalizar los contenidos a aprender, repasándolos secuencialmente con las indicaciones del experto de la situación, en este caso el tutor facilitador, preferentemente en grupo, para reconocer la propia aprehensión conceptual. La finalidad de su uso en este caso es la de convertir al menos en caja traslúcida, la caja negra que suele ser todo lenguaje de programación, identificando su argumento conceptual (Vicéns y Zamora, 2013).

#### **5 Uso de Matlab**

¿Por qué Matlab?

La herramienta que se postula en este trabajo para la cristalización de esta práctica reflexiva, es el lenguaje de programación Matlab.

MATLAB (‘MATrix LABoratory’, The MathWorks, Inc, 2014) es un lenguaje de programación de cuarta generación con un entorno computacional numérico multi-paradigma, capaz de interconectarse con programas C, C++, Java, Fortran y Phyton.

De entre sus virtudes generales, en relación con su aplicación al modelo gaussiano de dispersión atmosférica, cabe destacar:

- La salida gráfica está optimizada para una interacción continua entre los cálculos y la representación.
- La sintaxis de muchos comandos es constructivista y admite una verbalización conceptual.

- Está disponible para los alumnos en muchas Universidades; en este caso, en los ordenadores de salas de estudio de la UPCT.
- Propiciar un acercamiento amistoso a Matlab, es una actuación docente que trasciende la intención específica para generar una competencia transversal estimable.

## **6 El tutor facilitado**

Manteniendo la filosofía del *learning doing*, en esta propuesta se cuenta con la figura del tutor facilitador (Vicéns, 2012).

Este tutor actúa como facilitador proporcionando a los alumnos los recursos auxiliares, operacionales e instrumentales, que no son medulares al caso, así como el material clave: los scripts. En este sentido su tarea es de evitar que el alumno consuma su tiempo crediticio en actividades instrumentales extracurriculares y, sobre todo, vacías, operacionales sin contenidos propios. Y actúa como tutor porque observa las actuaciones individuales e indica las correcciones a las desviaciones cuando se agotan los recursos del alumno, y es el propio alumno quien lo manifiesta. En pocas palabras, proporciona los recursos y *está ahí*.

# 3 Ciclo de Aprendizaje reflexivo

La búsqueda de mecanismos para facilitar el aprendizaje profundo del alumno que propicien la metacognición, pasa por la vía de la práctica reflexiva (Domingo y Gómez 2014). La herramienta que se postula en este trabajo para la cristalización de esta práctica reflexiva, es el lenguaje de programación Matlab.

La práctica reflexiva en esta propuesta se lleva a cabo con el recorrido y las etapas que se describen en el ciclo reflexivo que se muestra en la figura 1 (Vicéns et al., 2016). Las etapas se denotan como: concepto, algoritmo, Matlab, gráfico, primera reflexión, parámetros, segunda reflexión, y revisión del concepto. El detalle de estas etapas, se desarrolla a continuación.

## 1 Concepto

El ciclo se inicia desde el presupuesto del conocimiento (en el sentido tradicional) por parte del alumno del concepto físico-matemático del sistema objeto de aprendizaje, que en este caso es el modelo gaussiano de dispersión atmosférica. Es lo que se podría denominar saber hacer las cosas *a mano*.

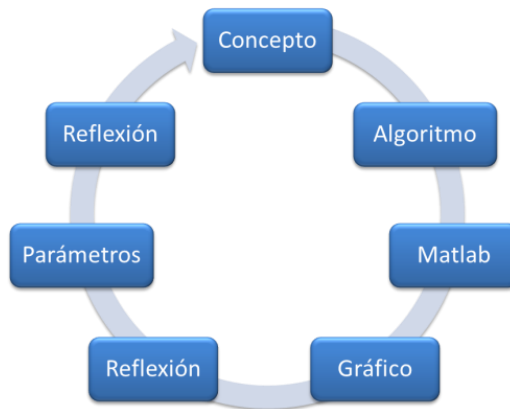
Este conocimiento inicial, y tradicional, de los contenidos es el punto crítico porque toda actuación de aprendizaje de *orden superior* ha de ser posterior a una *etapa atávica* de adquisición de conocimientos tradicional que establezca una base cognitiva. Esta base cognitiva, que incluye no pocos elementos memorísticos y experiencias procedimentales y transversales, es la que será objeto de valoración y gestión para poder proceder al aprendizaje metacognitivo.

Es importante tener presente que la metacognición incluye un proceso de auto evaluación de los recursos cognitivos propios frente a los requerimientos del proceso metacognitivo a enfrentar, con la finalidad de saber previamente si el aprendizaje va a ser posible.

Sin un proceso cognitivo previo consistente, es imposible una metacognición real.

## 2 Algoritmo

El concepto del sistema o proceso, en este caso el modelo gaussiano, se acompaña necesariamente con el conocimiento del algoritmo general y básico que se denomina habitualmente como modelo Gaussiano.



**Figura 1.-** Ciclo reflexivo propuesto para su utilización en el proceso de enseñanza-aprendizaje (Vicéns et al., 2016).

### 3 Matlab

Una vez que el concepto y su algoritmo son familiares para el alumno, el tutor facilita al alumno un ‘script’, que consiste en la transcripción del algoritmo al lenguaje Matlab; esta traducción se efectúa para que el alumno identifique en ella todos los componentes de la argumentación conceptual que describe el algoritmo, y sea capaz de verbalizarlo reflexivamente (Vicéns et al., 2016).

Es un script provisto de abundantes líneas de información, de modo que el alumno no encuentre en su repaso secuencial agujeros negros que no sepa interpretar. No debe poder pasar de una línea a la siguiente dejando atrás frentes abiertos.

### 4 Gráfico

Acto seguido el alumno ejecuta el *script*, obteniendo un resultado gráfico. Se trata de un gráfico interactivo de respuesta rápida al alumno cuando éste introduce algún cambio paramétrico. El alumno debe sentirse activo en su relación con el gráfico y asimilarlo como un elemento cognitivo que complementa y refuerza su conocimiento anterior.

### 5 Primera reflexión

A la vista de este gráfico, el alumno puede reflexionar sobre el concepto mismo, reforzando la percepción abstracta con la imagen del modelo. De esta primera reflexión se deriva la curiosidad natural por verificar la respuesta del modelo a la variación de los parámetros del sistema, como pueden ser la altura del foco de emisión o el viento para nuestro caso particular.

## **6 Parámetros**

Esta actuación es el destilado de la reflexión previa, mediante la que el alumno debe haber identificado la relevancia de los parámetros, así como los rangos de variación procedentes. Con estos elementos el alumno procede a definir, diseñar y poner en práctica un análisis de sensibilidad del modelo. Para ello va modificando los valores de los diversos parámetros, con arreglo a sus criterios teóricos, observando la respuesta del modelo.

## **7 Segunda reflexión**

La observación del carácter de la respuesta del modelo, conduce a una segunda reflexión sobre el concepto inicial. Puede concluirse entonces que el resultado final que busca este proceso es el enriquecimiento de los conceptos iniciales del alumno.

## **8 Revisión conceptual**

Tras la segunda reflexión, la visión del concepto cambia. Se tiene una visión dinámica de su naturaleza, de su comportamiento. El alumno está en disposición de replantearse la entidad de su aprendizaje, esto es, de su conocimiento, y tomar conciencia del grado de control que tiene sobre éste y qué uso puede hacer del mismo.



## Bibliografía para el capítulo 1

- Biggs. (2005). *Calidad del aprendizaje universitario*, Narcea, 2005. ISBN: 8427713983.
- Burón, J. (1990). *Enseñar a aprender: Introducción a la metacognición*. Bilbao. Mensajero.
- Dehaene. J. (2014). *Le Code de la Conscience*. Odile Jacob. 2014. ISBN 978-2-7381-6904-4
- Dewey, J. (2007). *Cómo pensamos*. Paidós Ibérica. 2007. ISBN 9788449320330.
- Domingo, A. y M.V. Gómez, M.V. (2014). *La Práctica reflexiva. Bases, modelos e instrumentos*. Narcea. ISBN 97834267719996.
- Exley, K., Dennick, R. (2009). *Enseñanza en pequeños grupos en educación superior tutorías, seminarios y otros agrupamientos*. Narcea Ed. Madrid. 206 pp.
- Flavell, J. H. (1993). *El desarrollo cognitivo*. Madrid: Visor.
- Ericsson, K.A., Simon, H.A. (1993). *Protocol analysis: Verbal reports as data*. MIT Press Ed. Cambridge Press. 499 pp.
- Exley, K., Dennick, R. (2009). *Enseñanza en pequeños grupos en educación superior tutorías, seminarios y otros agrupamientos*. Narcea Ed. Madrid. 206 pp.
- Gardner, H. (2003). *La inteligencia reformulada. Las inteligencias múltiples en el siglo XXI*. Paidós Ibérica Ed. Barcelona. 270 pp.
- Gibbs, G. (1988). *Learning by Doing: A Guide to Teaching and Learning Methods*, Further Education Unit, 1988. . ISBN: 1853380717, 9781853380716.
- Kolb, D.A. (1984). *Experiential Learning: Experience as the Source of Learning and Development*, Prentice-Hall, , 1984. ISBN: 978-0132952613.
- Schraw, G., Crippen, K.L. and Hartley. K. (2006). *Promoting Self-Regulation in Science Education: Metacognition as Part of a Broader Perspective on Learning*. *Research in Science Education* (2006) 36: 111–139 DOI: 10.1007/s11165-005-3917-8.
- Vicéns J.L. (2012) .Una modalidad de Tutor Facilitador en la Enseñanza de la Ingeniería, *Actas del XV Congreso Nacional y V Iberoamericano de Pedagogía*, Burgos (España).
- Vicéns, J.L. , Zamora, B. (2013). *La verbalización como método facilitador en la enseñanza de la Ingeniería en el contexto del proceso de Bolonia*, Libro de Capítulos del X FECIES 2013, Granada (España), pp. 290-296.
- Vicéns, J.L., Zamora, Blas, Ojados, D. (2016). *Improvement of the reflective learning in engineering education using MATLAB for problems solving*. Volume 24, Issue 5, September 2016, Pages 755–764.

Vigotski, L.S. (2010). Pensamiento y lenguaje. Paidós Ibérica Ed. Barcelona. 240 pp.

## Capítulo 2

# 1 El estado del arte en la bibliografía

A partir de la revisión bibliográfica relativa a los modelos de dispersión atmosférica en general, y del modelo gaussiano de dispersión en particular, puede clasificarse la bibliografía para este PFM, en diversos grupos.

## 1 Los clásicos

En primer lugar están los textos fundacionales, elaborados en la segunda mitad del siglo pasado, obra, por tanto, de los *clásicos*, y exponentes tanto de un gran esfuerzo conceptual, como de una pericia experimental para diseñar sistemas de verificación que validaran los modelos propuestos con experimentos reales. Este esfuerzo y esta pericia se afianzaban sobre un remarcable desarrollo matemático de carácter manual del análisis numérico, en particular de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, expresado en algoritmos que se han ido enriqueciendo pero que en modo alguno han sido desechados. Estos cálculos convencionales se benefician en la actualidad de la agilidad facilitada por los computadores cada vez más asequibles y ágiles, y de la existencia de lenguajes de programación cada vez más amistosos y asequibles.

Es llamativa la estrecha colaboración de estos autores con los estamentos oficiales federales de EE UU., así como la inmediatez del paso de las publicaciones científicas a los manuales de programas comerciales o a publicaciones federales gratuitas de libre difusión.

Debido a lo joven del área de conocimiento, no hay solución de continuidad entre estos autores y las vanguardias, de modo que los *clásicos* siguen citándose explícitamente en las publicaciones más recientes.

## 2 Los tutoriales

Este grupo se solapa cronológicamente con el anterior en las dos últimas décadas del siglo pasado, hasta nuestros tiempos. Está constituido por los textos, en ocasiones reconocidos manuales de instrucciones de las grandes agencias del Medio Ambiente, para la aplicación práctica de los modelos iniciales, delineando más o menos su evolución hasta constituir modelos más complejos pero cualitativamente similares.

Versan sobre modelos que han prestado y prestan inestimables servicios para disponer la actuación preventiva y paliativa de la dispersión atmosférica de sustancias

indeseables. La oportunidad y vigencia de estos modelos se han beneficiado de la universalización de los computadores y de la insólita circunstancia de que dichos modelos han tenido un carácter gratuito, debido acaso a la evidencia de que la dispersión atmosférica no sigue los dictados socioeconómicos de las fronteras políticas, de modo que no es tan interesante disponer de buenos modelos, como fomentar que los territorios vecinos también dispongan de ellos.

Son publicaciones que incluso en la actualidad mantienen una austeridad gráfica y tipográfica, así como un laconismo, sorprendentes. Los tutoriales de grandes corporaciones en el sector, como Lake, comparten hoy en día este estilo para difundir las estructuras de sus programas.

### **3 Los papers**

En tercer lugar se sitúan los artículos académicos, los *papers*, de los últimos 15 a 20 años, en los que se detecta una progresiva y creciente sofisticación en intenciones y recursos. Carecen de la austeridad formal y textual de los anteriores. Cabe distinguir entre ellos diversos subgrupos

#### **Continuistas**

Se incluyen los trabajos que aplican el modelo gaussiano de dispersión con presupuestos tradicionales. Son en gran parte de universidades del cercano Oriente y del Pacífico. Suelen presentar resultados favorables. Destaca la utilización del modelo gaussiano para la simulación de accidentes nucleares.

#### **Perfeccionistas y alternativos**

Consisten en análisis comparativos de la eficiencia de los modelos anteriores gaussianos y de sus perfeccionamientos refinados. Avanzan en sus métodos de cálculo sin renunciar totalmente a soluciones analíticas (como es el caso del GILT), pero se detienen en el límite que separa el cálculo numérico de la simulación numérica. Se detienen antes de la solución numérica inexacta de las ecuaciones de Navier Stokes y de convección advección mediante el uso de la Dinámica Computacional de Fluidos (CFD). Tienen un elevado estilo académico.

#### **Comparativos**

Llevan a cabo análisis y experiencias comparativas entre diversos modelos gaussianos, y entre estos y los de otras filosofías y orientaciones. Es difícil no detectar la filosofía voluntarista de algunos de ellos.

### **Fluido-dinámico-computacionales**

Se inicia con una entusiasta aplicación de la CFD para simular la dispersión atmosférica. Conforme avanza el siglo van replegándose ante problemas relevantes que conducen incluso a desautorizar paquetes computacionales de prestigio. Este entusiasmo va cediendo ante dos hechos que chirrían: los requerimientos de la CFD en lo relativo al y plus, y la especial naturaleza de la capa límite atmosférica, la Atmospheric Boundary Layer (ABL).

### **De pre-requisitos**

Se centran en los escollos para la CFD, en particular en las peculiaridades de la ABL, de las que se deriva la dificultad para estas modelizaciones de fenómenos a escala atmosférica con los, por otra parte excelentes, paquetes comerciales para la CFD. Suelen aportar algoritmos muy para definir las condiciones de contorno del proceso. La multitud de propuestas dispares evidencia la imprecisión del proceso.

### **Prácticos-urbanos**

El último subgrupo de *papers* se orienta a considerar la escala de los procesos como un aspecto determinante, para validar la utilización de una herramienta tan valiosa como la CFD. Esta utilización se lleva a cabo focalizando la aplicación de la CFD en la modelización de la dispersión atmosférica en ambientes urbanos, que van desde complejos constituidos por varias calles y edificios, hasta entornos más acotados constituidos por una calle determinada con las edificaciones que la definen. Esta aplicación, reconocible genéricamente como *Street Canyon*, pretende simular tanto la incidencia de agentes atmosféricos externos a la geometría del volumen de control considerado, como la incidencia de los agentes generados internamente, como es el caso de la emisión de contaminantes gaseosos y particulados por parte de los vehículos que circulan por la misma vía. La escala de estos fenómenos va intensificándose hasta permitir discriminar la incidencia sobre fachadas o calzada, o, incluso precisar la incidencia sobre los peatones. Los olores toman cierto protagonismo, así como la disminución de la escala a aplicar.

# 2 Los modelos

## 1 A propósito de los modelos

Para Seinfeld, un modelo de calidad del aire ambiente es un medio por el cual pueden relacionarse las emisiones de contaminantes con las concentraciones de esos contaminantes en el aire (Seinfeld, 1978). En otros términos un modelo de dispersión es una herramienta que pretende conocer la inmisión a partir de la emisión.

El primer modelo orientado en este sentido data de los años 20 del siglo pasado, formalizado por de científicos militares británicos con la finalidad de mejorar la eficacia del uso de gases tóxicos de guerra. Y ya en esa década Taylor introdujo la noción de la turbulencia en la atmósfera (Darly and Zanetti, 2007). Más tarde, en la década de los 30, Sutton y Bossanquet trataron de las propiedades de difusión de las plumas emitidas por las chimeneas industriales (MacDonald, 2003).

El primer texto que acotó el tema fue el de Sutton en 1953, y esa década y la siguiente supusieron avances importantes, sobre todo a raíz de un mejor conocimiento de la estructura de la atmósfera. Los textos de Pasquill y Srtern, en 1974 y 1976 respectivamente cerraron un ciclo. Desde ese momento la proliferación de modelos ha ido en aumento imparable (MacDonald, 2003).

## 2 Modelos físicos y modelos matemáticos

Existen en la literatura numerosas clasificaciones de modelos de dispersión. Antes que recurrir a una clasificación supuestamente exhaustiva, cabe establecer sucesivas distinciones. En general cabe distinguir entre modelos físicos, con la utilización de maquetas y túneles de viento, y modelos matemáticos, elaborados con conceptos físico-matemáticos (Torres Jerez, 2007). Entre estos modelos matemáticos cabe distinguir entre modelos estadísticos y modelos determinísticos.

Los modelos estadísticos son descriptivos o a posteriori, obtenidos a partir de los datos reales. Intentan modelizar lo ya ocurrido, a los efectos de saber un poco más el todo conociendo la parte. Se trata de modelos deductivos que no se adentran en explicaciones del cómo ni el por qué, limitándose a formalizar el fenómeno, aquello que es percible y cuantificable. Se concretan en ecuaciones que no tienen ningún significado físico (Jacobson, 2005), como es el caso de las funciones polinomiales obtenidas por ajustes de medidas mediante superficies de respuesta.

Los modelos matemáticos determinísticos pretenden adelantarse a los hechos, trabajando inductivamente para modelizar el comportamiento futuro de los sistemas, por inducción. Se concretan en ecuaciones paramétricas, con parámetros que tienen un significado físico (Jacobson, 2005). En este caso todos los parámetros son función de las variables tiempo y espacio. El problema radica en la formalización matemática de estos modelos, y en su flexibilidad formal para ir corrigiéndose con arreglo a las sucesivas validaciones con los hechos experimentales. En ambos casos, más allá de las atribuciones conductuales que derivan de hechos experimentales probados, no se emiten hipótesis, reconociendo la inaccesibilidad del nómeno.

### **3 Modelos y discretización**

Una primera distinción entre modelos se establece en función de la discretización del espacio a describir. Los modelos unitarios, que no discretizan, son los modelos de caja, que cuantifican la conservación, la circulación y la deposición del contaminante con la hipótesis de que las condiciones son uniformes en todo el espacio. Los modelos complejos son los que discretizan el espacio dividiéndolo en celdas tridimensionales, teniendo cada celda unas condiciones particulares. El contaminante circula entre celdas contiguas experimentando variaciones en función de estas condiciones. Son más precisos que los anteriores, pero necesitan información climática parcelar.

Para Holmes (2006), un factor importante para clasificar y discriminar unos modelos de otros, es la dificultad que suele encontrarse para modelizar adecuadamente gases y partículas simultáneamente, e incluso, para modelizar al mismo tiempo partículas de diferente tamaño. Ello hace que al margen de los modelos comerciales, se desarrollen modelos puntuales para situaciones más específicas.

### **4 Modelos de caja**

Basados en la conservación de la masa. Consideran que la masa del aire fuera una mezcla perfecta con concentraciones uniformes. El modelo climático utilizado puede ser muy sencillo, pero puede incluir esquemas de reacción química más complejos, así como tratamiento de la dinámica del aerosol, consiguiendo una buena caracterización fisicoquímica de las partículas. El inconveniente es que la simulación de la evolución de los contaminantes a partir de los datos iniciales es correcta, pero no permite tener información de las concentraciones locales de los contaminantes. Quizá por eso no son válidos para modelizar el comportamiento de las partículas, cuyas concentraciones y dinámica dependen en gran medida de los cambios locales de las emisiones y los factores climáticos.



## 5 Modelos discretizados

En 1904, el científico noruego Bjerkens propuso que la predicción del tiempo se podía considerar un problema matemático con siete ecuaciones en derivadas parciales con siete incógnitas: las tres componentes de la velocidad del viento, la presión, la densidad, la temperatura y la humedad específica (Lezaun, 2006). Desde entonces se está trabajando en la aplicación de la dinámica de fluidos a la dispersión atmosférica.

La modelización de la atmósfera mediante ecuaciones en derivadas parciales, acarrea una doble discretización: la discretización del espacio y la discretización de las ecuaciones.

Para la discretización del espacio se parcela la atmósfera en cajas, lo suficientemente pequeñas como para que sea legítimo manejarlas como entes numéricos, y lo suficientemente grandes como para que mantengan cualitativamente las propiedades de toda la atmósfera, y las variables atmosféricas sean homogéneas en el interior de cada caja.

La discretización de las ecuaciones consiste en la adaptación de las ecuaciones a ese espacio discretizado, asumiendo los intervalos discretos que adoptarán sus valores entre celdas adjuntas mediante, por ejemplo, diferencias finitas.

Cuanto más pequeñas sean las cajas atmosféricas y menor el paso de tiempo, el coste de la resolución es mayor, pero cabe esperar que la aproximación será mejor.

## 6 La ecuación de difusión-advección

Bajo un punto de vista teórico conceptual, en una atmósfera inerte e inmóvil, esto es, homogénea, la dispersión de una sustancia gaseosa, tendrá lugar según la ley de difusión.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -k \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2}$$

Pero la realidad es que la atmósfera es turbulenta, y anisótropa. De modo que la ecuación ha de matizarse según la difusión turbulenta que no es igual para las tres dimensiones.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -k_1 \frac{\partial^2 C}{\partial x_1^2} - k_2 \frac{\partial^2 C}{\partial x_2^2} - k_3 \frac{\partial^2 C}{\partial x_3^2}$$

Pero la atmósfera no está inmóvil, sino que hay un viento. Por lo que hay que considerar la advección del producto emitido en el fluido atmosférico en movimiento.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x_i} = -k_1 \frac{\partial^2 C}{\partial x_1^2} - k_2 \frac{\partial^2 C}{\partial x_2^2} - k_3 \frac{\partial^2 C}{\partial x_3^2}$$

Si, además, el producto emitido tiene capacidad de reacción, esto es, capacidad para transformarse y a la postre desaparecer, la ecuación queda:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x_i} = -k_1 \frac{\partial^2 C}{\partial x_1^2} - k_2 \frac{\partial^2 C}{\partial x_2^2} - k_3 \frac{\partial^2 C}{\partial x_3^2} - R$$

Esta ecuación representa un modelo más completo, pero no es en modo alguno el modelo exhaustivo, total. Y aun así hay que realizar algunas simplificaciones.

Se supone que no hay reacciones, por lo que  $R = 0$ , se supone que la velocidad del viento corresponde al eje  $x$ , de modo que las componentes  $y$ ,  $z$  de la velocidad son nulas, y se asume que la difusión en la dirección del viento, coordenada  $x$ , es despreciable respecto a la advección. Con lo que la expresión queda:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = k_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$$

Que es más sencilla, pero sólo más sencilla.

## 7 Enfoques Euleriano y Lagrangiano

La solución exacta de esta ecuación, incluso con estas simplificaciones, no es posible analíticamente, de modo que hay que recurrir a métodos numéricos que son necesariamente aproximados.

Los métodos de solución (en el sentido operativo y no analítico) son en general de orientación euleriana o lagrangiana, según el planteamiento de las ecuaciones en lo relativo al sistema de coordenadas respecto al que se referencian. El método euleriano utiliza un sistema de coordenadas fijo con respecto a la tierra, en tanto que el lagrangiano usa el sistema de coordenadas que acompaña el movimiento de la atmósfera.

Los modelos eulerianos representan la clase más sofisticada de modelos atmosféricos. El volumen de control a modelizar se divide en celdas, y la concentración en ellas se

determina en todas y cada una de las celdas con carácter simultáneo a determinados intervalos de tiempo.

En el modelo lagrangiano todos los sucesos (emisiones, reacciones, deposición y mezclado de los contaminantes) se describen en un volumen de aire que se desplaza con el viento (Sermanat, 2014).

## 8 El modelo Gaussiano

La ecuación de difusión-advección admite tratamientos de aproximación numérica con los enfoques Euleriano y Lagrangiano. Dada la unicidad del suceso y el rigor matemático de ambos enfoques, no hay una más válido que el otro.

La aproximación Euleriana, para obtener concentraciones medias, suele ser denotada como K-teoría. Parte de la base de que la difusión molecular es despreciable ante la difusión turbulenta, y que la atmósfera incompresible facilita la linealización. Con este planteamiento, y supuesta la uniformidad de los coeficientes de dispersión, se llega a la *solución*:

$$\langle c(x, y, z, t) \rangle = \frac{S}{8(\pi t)^{3/2} \sqrt{K_{xx} K_{yy} K_{zz}}} \exp\left(-\frac{(x - \bar{u}t)^2}{4K_{xx}t} - \frac{y^2}{4K_{yy}t} - \frac{z^2}{4K_{zz}t}\right)$$

En tanto que la aproximación lagrangiana, es la teoría estadística, que supone que la velocidad es una variable estocástica gaussiana función sólo del tiempo. Y su solución es:

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x(t)}} \exp\left(-\frac{(x - \bar{u}t)^2}{2\sigma_x^2(t)}\right)$$

Considerando una fuente puntual instantánea, se aprecia que las soluciones son superponibles igualando:

$$\sigma_x^2 = 2K_{xx}t \quad \sigma_y^2 = 2K_{yy}t \quad \sigma_z^2 = 2K_{zz}t$$

Aplicando a fuentes puntuales continuas, se observa igualmente la coincidencia, al igualar:

$$\sigma_y^2 = \frac{2K_{yy}x}{\bar{u}}, \quad \sigma_z^2 = \frac{2K_{zz}x}{\bar{u}}$$

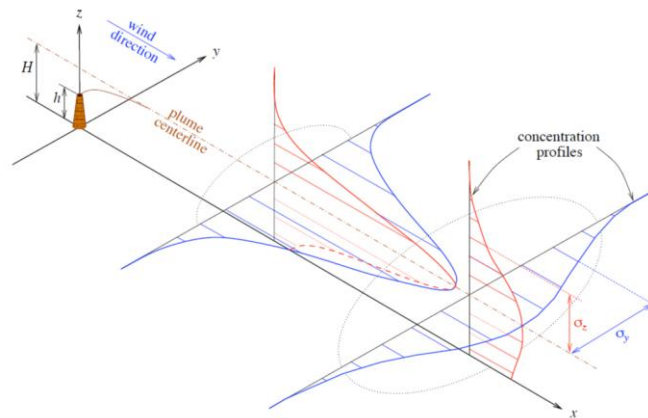
Por lo que el punto crítico está en la determinación de los parámetros de dispersión, sin los cuales el algoritmo no significa nada.

La ecuación base del modelo gaussiano de dispersión atmosférica, a la que se llega por tanto, por el camino lagrangiano o por el camino euleriano es:

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

La formulación del modelo se completó con la determinación experimental de los parámetros de dispersión, tanto el de sentido vertical, como el de sentido horizontal; parámetros que se corresponden con las desviaciones estándar en dichas direcciones de la distribución de concentraciones.

La imagen típica para ilustrar el modelo de pluma gaussiano, es la de Boubel (1994), tomada en este caso de Stockie (2011).



Aunque la mayoría de los modelos de Gauss sólo consideran la difusión y la advección de los contaminantes modelos gaussianas más anticipados han sido recientemente desarrollados que incluyen procesos físicos tales como la deposición y las reacciones químicas rápidas. Además, la ecuación de penacho gaussiano asume que no hay interacción entre las plumas, que puede llegar a ser significativo dentro de los entornos urbanos.

## 9 Emisiones instantáneas

Un enfoque analítico convencional, en el ámbito del modelo Gaussiano consiste (Arystanbekova, 2004) en considerar que la emisión instantánea es un sistema

autónomo, que se expande difusivamente en tanto se desplaza advectivamente por la acción del viento. La modelización con el modelo gaussiano *puff*, cumple estas expectativas.

## **10 Dispersión de partículas**

Para Holmes (2006), un factor importante para clasificar y discriminar unos modelos de otros, es la dificultad que suele encontrarse para modelizar adecuadamente gases y partículas simultáneamente, e incluso, para modelizar al mismo tiempo partículas de diferente tamaño. La ecuación de Ermak, derivada de la ecuación gaussiana introduce el comportamiento *másico* con sus circunstancias de deposición y sedimentación gravitacional (Stockie, 2011).

## Bibliografía para el capítulo 2

- Daly, A. and P. Zannetti. (2007). Air Pollution Modeling – An Overview. Chapter 2 of AMBIENT AIR POLLUTION (P. Zannetti, D. Al-Ajmi, and S. Al-Rashied, Editors). Published by The Arab School for Science and Technology (ASST) (<http://www.arabschool.org.sy>)
- 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 (2006) 5902–5928.
- Jacobson, M.Z. (2005). Fundamentals of Atmospheric Modeling. Cambridge University Press
- Lezaun, M. (2006). Matemáticas de los fluidos el clima y el tiempo. Encuentros multidisciplinares, Vol. 8, Nº 23, 2006 (Ejemplar dedicado a: matemáticas interdisciplinares en el siglo XXI), págs. 46-55.
- Macdonald, R. (2003). Theory and objectives of air dispersion. Modelling Air Emissions for Compliance MME 474A Wind Engineering. December 2003
- Seinfeld J.H. de Tecnología. California. (1978). Contaminación Atmosférica. Fundamentos físicos y químicos. Instituto de Estudios de Administración Local. Madrid.
- Semarnat. Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales de México. (2014). Tipos de modelos atmosféricos. <http://www.inecc.gob.mx/calair-herramientas-analisis/582-calair-tipos-modelos>.
- Stockie, J. (2011). The Mathematics of Atmospheric Dispersion Modelling. Siam Review. Vol. 53, No. 2, pp. 349–372.
- Torres Jerez, A. (2007). Aplicación práctica del modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos ICST3. Master en Ingeniería y Gestión Medioambiental 2007/2008. EOI, Escuela de Negocios.
- Turner, B. (1970). Workbook of Atmospheric dispersion estimates. U. S. Department of Health Education, and Welfare.

## Capítulo 3

# 1 Vigencia del modelo Gaussiano

Tras setenta años de utilidad y con el desarrollo computacional actual, ¿se puede considerar vigente el modelo gaussiano?

Referirse al modelo gaussiano de dispersión atmosférica, no es tratar de la fórmula de Sutton aislada, sino de los conjuntos de algoritmos que se articulan en torno a su concepto físico-matemático, configurando herramientas estructuradas y complejas. Confeccionando *paquetes* de cálculo con computadora que se diseñan con carácter más o menos específico. Por comodidad en este capítulo se denomina como *programa* a estos paquetes. Los paquetes a que se hace referencia son fundamentalmente los preconizados y auspiciados por la EPA.

## 1 La EPA

“La Agencia de Protección del Medio Ambiente (Environmental Protection Agency; más conocida por las siglas EPA) es una agencia del gobierno federal de Estados Unidos encargada de proteger la salud humana y proteger el medio ambiente: aire, agua y suelo” (Wikipedia, 2016).

Esta agencia recomienda una serie de modelos según los diversos problemas de la calidad del aire. Las recomendaciones se basan en una serie de pruebas rigurosas que contrastan sus predicciones con los resultados de experimentos de campo altamente controlados, y con los resultados obtenidos por otros modelos. Los modelos recomendados por la EPA son relativamente antiguos (decenas de años), pero están sometidos a continuas actualizaciones y versiones, y a permanentes contrastes de calidad (CIEMAT, 2016). Los modelos a que se hace referencia en este trabajo son fundamentalmente ISCST3, AERMOD y CALPUFF.

## 2 Mecanismos de evaluación de los modelos

Han revestido dos modalidades. Una de ellas consiste en comparar los resultados obtenidos con un modelo gaussiano y con otro tipo de modelo, en relación ambos con datos experimentales muy contrastados, obtenidos en procesos muy controlados en su producción y en las medidas de campo. Los procesos o experimentos más citados, son los denominados experimento de Prairie Grasse y el experimento de Kincaid, y las redes ETEX y ANATEX.



En el experimento de Prairie Grasse, se utilizaba dióxido de azufre, emitidos de modo puntual, desde una altura de 0.46 metros. La emisión duraba 10 minutos, y los receptores de medida estaban dispuestos a lo largo de cinco arcos semicirculares a 50, 100, 200, 400, y 800 metros de la fuente emisora. Los receptores de cada arco estaban espaciados cada 2° en los cuatro arcos más próximos al emisor, y en el más alejado, estaban dispuestos cada grado. En total se dispusieron 545 receptores. Aproximadamente la mitad de los 70 experimentos se realizaron en condiciones de estabilidad meteorológica abarcado una amplia gama de velocidades del viento desde 0.125 a 16 metros por segundo. De aquellos datos, posteriormente se han realizado ajustes de distribución gaussiana (Venkatram et al, 2013).

Para fuentes de mayor elevación sobre el terreno, puede citarse el experimento de Kincaid, con emisiones desde 187 metros de altura del trazador SF6. Se utilizaron 200 receptores ubicados en siete arcos semicirculares entre los 500 metros y los 10 kilómetros, y en cinco arcos en los 15, 20, 30, 40 y 50 km (Escoffier, 2013). Para largas distancias, es de utilidad la red ETEX (European Tracer Experiment), permanente desde 1994 a raíz del accidente de Chernobyl, o las redes CAPTEX (Cross-Appalachian Tracer Experiment), y ANATEX (Across North America Tracer Experiment), (Stolh,1998) (Korsakissok, Mallet, 2009).

### **3 ISCST3**

El modelo de fuentes industriales ISCST3 Industrial Source Complex es un modelo que desarrolló Pacific Environmental Services, Inc., Research Triangle Park, North Carolina, para la EPA en 1995. Contempla diversa geometría de fuentes emisoras, abatimiento de la pluma por edificaciones (por lo que contempla aspectos micro meteorológicos), la deposición seca y húmeda, y las condiciones reales del terreno. La EPA lo recomienda para simular las emisiones de complejos industriales y cuando el rango de distancias sea inferior a 50 km. (EPA, 1995).

### **4 AERMOD**

AERMOD es un modelo para estado estacionario gaussiano que basa el cálculo de la dispersión atmosférica en la estructura de la turbulencia de la capa límite atmosférica, y adaptada a los diversos terrenos en la versión de 2012 (EPA, 2012).

Es un modelo gaussiano complejo que incorpora un pre procesador meteorológico, AERMET, y un pre procesador de tratamiento del terreno, AERMAP, capaces de interactuar (Cimorelli et al, 2005).

El pre-procesador meteorológico AERMET calcula la capa límite atmosférica y los flujos de calor superficial mediante el uso de características locales y datos meteorológicos. A partir de estos parámetros establece los perfiles vertical y lateral de la velocidad del viento, las fluctuaciones turbulentas y el gradiente de temperatura (Sing, 2013).

AERMOD se utiliza para el cálculo de la dispersión, con excelentes predicciones ambientales en entornos de canteras y minas a cielo abierto (Tartakovsky et al, 2016).

En el otoño de 2005, AERMOD fue declarado modelo preferido de dispersión por parte de la EPA en su “Guía de modelos de calidad del aire”, y se estableció oficialmente como relevo del modelo ICS3 (Wikia, 2016).

## **5 CALPUFF**

Se trata de un modelo gaussiano no estacionario, que ha sido incluido en la guía de modelos de calidad del aire de la EPA como el modelo preferido para evaluar el transporte de contaminantes a larga distancia.

Consta de tres componentes principales, CALMET, que es un modelo meteorológico, CALPUFF, que es el modelo de dispersión, y CALPOST (un paquete de post-procesado). A ellos se añaden otros programas de pre-procesamiento y post-procesamiento. Las principales aplicaciones de Calpuff son: condiciones de estancamiento, inversión, recirculación y fumigación; transporte sobre el agua y zonas costeras; transporte a larga distancia; viento débil y formación de contaminantes secundarios; finalmente, material particulado y fuentes de área extensa.

Hay autores que aprecian inconvenientes (Lavy, 2002), pese a cubrir un hueco relevante en situaciones de bajo componente de advección.

## **6 Otros modelos Gaussianos especializados**

Existen, funcionando, multitud de modelos nucleados por el modelo gaussiano de dispersión, a continuación se citan algunos con características peculiares, y reconocidos por la EPA.

BLP es un modelo gaussiano de dispersión diseñado con la finalidad de modelizar exclusivamente problemas asociados con las plantas de reducción de aluminio y otros procesos industriales en los que son importantes los efectos de decaimiento de plumas producidas en fuentes de emisión lineales.

CALINE3 es un modelo de dispersión gaussiana para emisiones estacionarias diseñado para determinar las concentraciones de contaminación del aire en carreteras situadas en terreno relativamente uniformes.

CAL3QHC es un modelo basado en el modelo CALINE3 que incide sobre las alteraciones puntuales de la calidad en las intersecciones viarias reguladas por semáforos, calculando los picos de contaminación en relación con los retrasos de circulación y las colas de vehículos.

CAL3QHCR es una versión más refinada del modelo anterior, que utiliza los datos meteorológicos locales.

CTDMPLUS (Complex Terrain Dispersion Model PLUS) es, es un modelo gaussiano refinado para uso en condiciones muy diversas de estabilidad y para terrenos muy complejos y accidentados.

TOC es un modelo gaussiano diseñado para ámbitos oceánicos y costeros desarrollado para determinar el impacto de emisiones en alta mar a partir de fuentes puntuales, de área o de línea, en la calidad del aire de las regiones costeras. Precisa de datos meteorológicos oceánicos y costeros cada hora.

## **7 Modelos gaussianos “políticos”**

En este apartado se citan dos modelos gaussianos de dispersión atmosférica que tienen aplicación en demarcaciones políticas concretas, Japón y Chequia, el modelo METI-LIS y el modelo SYMOS/97 respectivamente. Y un modelo de ámbito geográfico europeo central, el AODM.

El modelo MET-LIS se utiliza en Japón para determinar las concentraciones de mercurio atmosférico originadas por la combustión del carbón. Es un desarrollo del Ministerio de Economía de Japón, y utiliza el modelo gaussiano estacionario y en versión de *puffs* para emisiones muy altas. Además de estimaciones a corto plazo, influidas por la meteorología puntual, permite cálculos promediados a largo plazo con una incorporación de datos meteorológicos horarios. Utiliza las ecuaciones convencionales del modelo gaussiano, los coeficientes de Briggs, la flotabilidad térmica, y el perfil vertical de velocidad del modelo gaussiano. Se utiliza para entornos próximos a las emisiones, permitiendo elaborar un mapa territorial, a base de múltiples determinaciones (Khandakar, 2012).

El SYMOS/97 (Stationary Sources Modeling System) es un modelo gaussiano regional diseñado para la predicción de concentraciones de contaminantes en la atmósfera a distancias por encima de los 100 km. Su uso es una imposición de la ley de Chequia,

que lo hace obligado para instituciones estatales, agencias ambientales y compañías privadas. Se trata de un modelo con relativas imprecisiones, pero que no limita el número de focos emisores o receptores (Sanka, 2014).

AODM, Austrian Odour Dispersion Model (AODM), es un modelo gaussiano adaptado a la predicción de olores. Su razón de ser es la de asumir que así como los receptores tomas muestras cada hora o media hora, la nariz humana percibe los olores de una sola inhalación. A este fin, el modelo trabaja con los picos de máxima concentración (Schauberger 2011).

## **8 Valoraciones absolutas de los programas con modelos gaussianos**

La literatura presenta muchos artículos sobre el uso de los modelos gaussianos de dispersión. Entre los relativamente recientes cabe citar:

Lokeshwari (2013), lo aplica a emisiones de industrias que utilizan carbón de coque en zonas semiáridas tropicales de la India, obteniendo resultados satisfactorios

Varma (2014) lo aplica a la predicción de concentraciones a nivel del suelo de partículas en suspensión, óxidos de azufre, dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>) y monóxido de carbono, con buenos resultados.

Skraba (2012) describe la integración del modelo gaussiano en (GEPSUS, 2011; Geographical Information Processing for Environmental Pollution-Related Security), que es un soporte de decisión ante emisiones nocivas, que utiliza directamente las ecuaciones gaussianas con el lenguaje Matlab, integrando los resultados con el Sistema de Información Geográfica (SIG).

Mesnard, (2013) utiliza el modelo gaussiano para cálculo inverso.

Cosemans, (2012) Valora la utilidad gaussiana en la cercanía de edificios.

Elperin, (2016) aumenta la complejidad del modelo gaussiano incluyendo la compactación de las partículas de aerosol por la lluvia en la pluma gaussiana. Obtiene buenos resultados.

Lo cierto es que a nivel de *papers* se detecta un afán academicista por presentar aspectos inéditos y novedosos; en tanto que en otro tipo de publicaciones, las correspondientes a empresas y organismos, así como a los de países emergentes, se sigue recurriendo directamente a los modelos gaussianos preconizados por la EPA, en sus últimas versiones y con diversos complementos, pero manteniendo las ecuaciones básicas.

## 9 Estudios comparativos de modelos gaussianos

Bursini (2012) efectúa una comparación entre AERMOD Y CALPUFF, en transporte de olores. Considera tanto emisiones de focos puntuales como de focos extensos bidimensionales, bajo las diversas condiciones de estabilidad atmosférica que se suceden en un año. Los resultados muestran una aceptable coincidencia entre ambos modelos salvo para la atmosfera estable, en la que el modelo AERMOD señala una columna más desarrollada y más concentrada.

Mazzoldi, (2008), verifica una comparación entre la herramienta de la CFD, Fluidyn PANACHE, con el modelo Gaussiano de dispersión ALOHA 5.4. La verificación es rigurosa porque la efectúa con los resultados de los experimentos Prairie Grass y Kit Fox. Para este autor PANACHE ofrece mejores resultados, pero reconoce que para la rapidez requerida en casos de accidente, lo que prima es la rapidez del modelo escogido

Zairi (2012), compara el algoritmo desarrollado del modelo de dispersión gaussiana con los resultados obtenidos por Schnelle y Dey en 2000, utilizando el modelo *Industrial Source Complex-PC* (ISCPC). Se empleó formaldehído en un rango de estabildades atmosféricas desde A (francamente inestable) a la F (estable). Para el modelo gaussiano se utilizaron las ecuaciones de Briggs. La diferencia de valores de la máxima concentración para ambos modelos fue de 5.4769  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  (4.97 %) y de la distancia correspondiente, de 0.46 km (7.67 %).

Piringer (2015) y Schauburger (2011) establecen valoraciones entre los modelos AODM y LASAT, que es un desarrollo lagrangiano, en relación a la propagación de olores. El análisis estadístico revela que e modelo LASAT tiende a aumentar las distancias en comparación con AODM. A pequeñas distancias de separación, los cálculos con el modelo AODM pueden ser superiores a los del modelo LASAT.

## 10 Modelos cuasi-gaussianos

Cabe citar los modelos gaussianos fluctuantes (FPM), ya esbozados por (Gliford, 1959) matizando el modelo de pluma gaussiana estacionaria, en la que las dispersiones vertical y horizontal de la concentración de una emisión a favor del viento siguen la distribución gaussiana. Para el FPM, el penacho fluctúa como resultado de los meandros resultantes de la fluctuación de la velocidad del viento.

Igualmente algunas mejoras en la elevación de la pluma gaussiana mediante el algoritmo PRIME, para evaluar los efectos de los obstáculos en el campo de la velocidad. El algoritmo PRIME permite evaluar los efectos de los obstáculos en el campo de la velocidad y de forma consecutiva en la dispersión de contaminantes. Fue

incluido por primera vez en el modelo regulatorio ISC3 y se utiliza actualmente en los modelos de regulación y AERMOD CALPUFF. El modelo incluye el efecto del obstáculo en las líneas de corriente pistas que provoca la elevación y / o descendente del penacho que pueden permitir el penacho de ser capturado por la estela de obstáculos. Se utiliza para determinar la trayectoria del penacho en el campo de flujos alterados (Schulman, 2000), (Harerton, 2014).

(Haan, 1995) completa el modelizado Puff-Particle Model (PPM), que contempla las fluctuaciones de cada elemento individual, dentro del volumen de control del penacho. Estableciendo fluctuaciones de dos niveles.

Finalmente se está acoplando el modelo gaussiano con la gestión en redes neuronales con resultados satisfactorios (Ma, 2016).

## 2 Valor docente del modelo Gaussiano

Realmente, ¿tiene interés invertir tiempo en el aprendizaje del modelo gaussiano de dispersión atmosférica?

Puede pensarse que sí por dos grupos de razones.

### 1 Razones específicas

- 1.- Es un tema perteneciente al área de conocimiento de la ingeniería ambiental, una ingeniería cada día más decisiva en todos los procesos técnico-económico-sociales, hasta el punto de constituir un filtro crítico absoluto.
- 2.- Tiene carácter de competencia específica y curricular en la enseñanza de la Ingeniería ambiental.
- 3.- Tiene un carácter de competencia trasversal de indudable interés en las otras ingenierías.
- 4.- Deriva directamente de la ecuación de convección advección tras su desarrollo por incrementos finitos, u otros recursos similares, por lo que presenta una continuidad cognitiva con conocimientos anteriores.
- 5.- Constituye el concepto nuclear en torno al que se construyen los modelos comerciales, industriales y oficiales de mayor prestigio y uso.

### 2 Razones pedagógicas

- 1.- Su aprendizaje puede facilitar posteriormente el manejo de los modelos comerciales con un sentido eidético y no con un mero carácter instrumental de caja negra.
- 2.- El aprendizaje de sus posibilidades puede generar una motivación intrínseca hacia el área de la dispersión atmosférica de contaminantes.
- 3.- Puede utilizarse cualquier lenguaje de cálculo y programación, Excel, Matlab, Mathematica, etc.

Aceptado lo anterior, en relación esta propuesta docente concreta cabe plantearse otra pregunta, ¿es razonable utilizar Matlab para proceder a un aprendizaje del modelo gaussiano de dispersión atmosférica?

### **3 Razones para el uso de Matlab**

- 1.- La sintaxis y semantemas de sus algoritmos permiten identificar los elementos conceptuales que definen los algoritmos del modelo gaussiano de dispersión, así como reconocer la relevancia de sus componentes.
- 2.- El aprendizaje eficiente del modelo gaussiano de dispersión se beneficia de las posibilidades gráficas bidimensionales y tridimensionales de Matlab.
- 3.- Facilita la exploración de la sensibilidad de los modelos, propiciando el aprendizaje metacognitivo.
- 4.- Disponible en la UPCT.



### Bibliografía del capítulo 3

- Belcher S.E., Coceal O., Hunt J.C.R., Carruthers D.J. and Robins A.G.,(2013).A review of urban dispersion modelling. Atmospheric Dispersion Modelling Liaison Committee. ADMLC-R7, ISBN 978-0-85951-734-8.
- Bursino, V. , Laura Capelli, Selena Sironia, Giuseppe Nanao, Andrea N. Rossib, Simone Bonatib. (2012).Comparison of CALPUFF and AERMOD Models for Odour Dispersion Simulation. CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS VOL. 30, 2012
- Cheng Guanhui Cheng a, Guohe (Gordon) Huang , Cong Dongb .(2015).Synchronic interval Gaussian mixed-integer programming for air quality management. Science of the Total Environment 538 (2015) 986–996
- Cosemans, G., W. Lefebvre, C. Mensink. (2012). Calculation scheme for a Gaussian parameterization of the Thompson 1991 wind tunnel building downwash dataset. Atmospheric Environment 59 (2012) 355e365
- Elperin, T., Tominykh, A., Krasovitev, B. (2016) Effect of raindrop size distribution on scavenging of aerosol particles from Gaussian air pollution plumes and puffs in turbulent atmosphere. Process Safety and Environmental Protection 102 (2016) 303–315.
- EPA, 2004. AERMOD: Description of Model Formulation. U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC (Report EPA-454/R-03e004). [www3.epa.gov/scram001/7thconf/aermod/aermod\\_mfd.pdf](http://www3.epa.gov/scram001/7thconf/aermod/aermod_mfd.pdf)
- Escoffier, Ch. (2013). Calpuff model overview and some applications. DMUG meeting, St Martin in the fields, London.
- Gibson, M.D., Kundu, S., Satish, M.(2016). Dispersion model evaluation of PM<sub>2.5</sub>, NO<sub>x</sub> and SO<sub>2</sub> from point and major line sources in Nova Scotia, Canada using AERMOD Gaussian plume air dispersion model. Atmospheric Pollution Research 4(2013)157-167.
- de Haan, P., and Rotach, M.W. (1995) ‘A puff-particle dispersion model’, Int. J. Environment and Pollution, Vol. 5, Nos. 3–6, pp. 350–359.
- Harerton Dourado, Jane Meri Santos, Neyval C. Reis Jr., Ilias Mavroidis. (2014). Development of a fluctuating plume model for odour dispersion around buildings. Atmospheric Environment 89 (2014) 148-157.
- Khandakar Md Habib Al Razi, Moritomi Hiroshi.(2012). Modeling of atmospheric dispersion of mercury from coal-fired power plants in Japan. Atmospheric Pollution Research 3 (2012) 226-237
- Korsakissok, I., Mallet, V. (2009). Comparative Study of Gaussian Dispersion Formulas within the Polyphemus Platform: Evaluation with Prairie Grass and Kincaid Experiments. Journal of Applied Meteorology and Climatology, American Meteorological Society, 2009, 48 (12), pp.2459-2473.
- Levy, J., 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, Volume 36, Issue 6, February 2002, Pages 1063-1075.

- Lokeshwari.Na, G.Srinikethanb and V.S.Hegdec, Nagraj. Pa. (21013). Modelling of Pollutants from a Point Source: A Case study from Coke Industry, Dharwad, India. International Journal of Current Engineering and Technology, Special Issue1 (Sept 2013)
- Ma Denglong, Zaoxiao Zhang (2016) Contaminant dispersion prediction and source estimation withintegrated Gaussian-machine learning network model for pointsource emission in atmosphere. Journal of Hazardous Materials 311 (2016) 237–245.
- Mazzoldi, A., Hill, T. and Colls, J. (2008). CFD and Gaussian atmospheric dispersion models: A comparison for leak from carbon dioxide transportation and storage facilities. Atmospheric Environment 42 (2008) 8046–8054
- Mesnard, L. (2013). Pollution models and inverse distance weighting: Some critical remarks. Computers & Geosciences 52(2013)459–469
- Piringer, M., Werner Knauder a, Erwin Petz a, Günther Schauburger. (2016). Factors influencing separation distances against odour annoyance calculated by Gaussian and Lagrangian dispersion models.
- Sanka, O., Lisa Melymuk, Pavel Cupr\*, Alice Dvorska 1, Jana Kanova.(2014).Dispersion modeling of selected PAHs in urban air: A new approach combining dispersion model with GIS and passive air sampling Atmospheric Environment 96 (2014) 88e95
- Schauburger, G., Martin Piringer b, Werner Knauder b, Erwin Petz. (2011). Odour emissions from a waste treatment plant using an inverse dispersion technique. Atmospheric Environment 45 (2011) 1639e1647
- Schulman, L.L., Strimaitis, D.G., Scire ,J.S. (2000). Development and evaluation of the PRIME plume rise and building downwash model. J Air Waste Manag Assoc. 2000 Mar;50(3):378-90.
- Singh, S.K. ,Maithili Sharan. (2013). Simulation of plume dispersion from single release in Fusion Field Trial-07 experiment. Atmospheric Environment 80 (2013) 50-57.
- Škraba, A.,Stojanović, R., Berkowicz, S., de Amicis, R.,Elhanani, Conti, G., Kofjač1, D. (2012) Modeling of the Air-Pollution Emergency Situations Control and Geographical Information Processing for Rescue Decision Making <http://www.systemdynamics.org/conferences/2012/proceed/papers/P1487.pdf>
- Stohl, A., Hitteenberg, M. and Wotawa, G. (1998). VALIDATION OF THE LAGRANGIAN PARTICLE DISPERSION MODEL FLEXPART AGAINST LARGE-SCALE TRACER EXPERIMENT DATA Atmospheric Environment Vol. 32, No. 24, pp. 4245—4264, 1998
- Stocker J, Ellis A, Smith S, Carruthers D, Venkatram A, Dale W and Attree M,2016:A review of the limitations and uncertainties of modelling pollutant dispersion from non-point sources. Atmospheric Dispersion Modelling Liaison Committee, ADMLC/2015/06 Report.
- Tartakovsky, D. a, Eli Sternb, David M. Broday a Indirect estimation of emission factors for phosphate surface mining using air dispersion modeling. Science of the Total Environment 556 (2016) 179–188.
- Torres Enríquez, R.C., (2004). Comparación de modelos de dispersión de emisiones provenientes de fuentes fijas. INE. DICA. Gobierno de México. [http://www.inecc.gob.mx/descargas/calair/rep\\_proy\\_comp\\_mod\\_dispersion.pdf](http://www.inecc.gob.mx/descargas/calair/rep_proy_comp_mod_dispersion.pdf)
- Varma, S.A.K. Srimurali, M.,Varma, S.V.K. (2014). Prediction of Ground Level Concentrations of Air Pollutants Using Gaussian Model, Rayalaseema Thermal Power Project, Kadapa, A.P., India 2 Energy and Environmental Engineering 2(4): 91-97, 2014

Venkatrama, A., Snyder, M.G., Heist, D.K., Perry, S.G., Petersen, W.B., Isakov, V. (2013). Re-formulation of plume spread for near-surface dispersion / Atmospheric Environment 77, (2013), pp.846-855.

Zairi Ali, Ubaidullah, M. N. Zahida, Kahar Osman (2012) Optimization of Stack Emission Parameters Using Gaussian Plume Model. Jurnal Teknologi (Sciences & Engineering) 58 (2012) Suppl 2, 45–51

## **Documentos en la WEB**

[http://www.epa.gov/scram001/dispersion\\_prefrec.htm](http://www.epa.gov/scram001/dispersion_prefrec.htm).

<http://atmosphericdispersion.wikia.com/wiki/AERMOD>.

[https://www3.epa.gov/scram001/dispersion\\_prefrec.htm#calpuff](https://www3.epa.gov/scram001/dispersion_prefrec.htm#calpuff)

[https://es.wikipedia.org/wiki/Agencia\\_de\\_Protecci%C3%B3n\\_Ambiental\\_\(Estados\\_Unidos\)](https://es.wikipedia.org/wiki/Agencia_de_Protecci%C3%B3n_Ambiental_(Estados_Unidos))

<http://www.ciemat.es/MCAportal/portal.do?TR=C&IDR=166>

<https://www.weblakes.com/guides/iscst3/toc/index.html>

<https://www3.epa.gov/ttn/catc/dir2/isc3drvs.pdf>

[https://es.wikipedia.org/wiki/Agencia\\_de\\_Protecci%C3%B3n\\_Ambiental\\_\(Estados\\_Unidos\)](https://es.wikipedia.org/wiki/Agencia_de_Protecci%C3%B3n_Ambiental_(Estados_Unidos))

## Capítulo 4

# 1 Introducción

Académicamente no es frecuente el interés del alumno por la modelización de la dispersión atmosférica, especialmente a raíz de su experiencia de la pobreza de resultados de los penosos cálculos manuales. Se suele caer, así, en la filosofía de que *para eso están los programas*. Esta utilización de los paquetes comerciales como cajas negras, de las que se desconoce el contenido, el *argumento* y la lógica de su funcionamiento amenaza con relegar al ingeniero a un papel pasivo alejado del diseño y la mejora de los ingenios, convirtiéndolo en un usuario.

En el contexto del aprendizaje metacognitivo, alcanzar el uso de paquetes comerciales con un sentido eidético y de contenidos, aconseja previamente analizar por partes y como un todo, modelos sencillos que estructuralmente sean escalables con aquellos que se manejarán posteriormente. Ello puede permitir entender su funcionamiento, su lógica interna, sus limitaciones y su capacidad de error.

En relación a la modelización de la dispersión atmosférica, más allá del ámbito académico, en ese mundo real en el que un modelo acarrea medidas técnico-económicas, tanto las actuaciones empresariales como las de naturaleza político-ambiental, descansan en programas de mayor o menor complejidad pero nucleados por el modelo gaussiano.

Esta dependencia conceptual de los modelos industriales, AERMOD, ICSRT, al concepto gaussiano, es difícilmente percibida por el alumno que o bien se limita a usar programas gratificantes por la respuesta inmediata a su manejo a ciegas, como caja negra, o bien los observa como herramientas herméticas cuando no crípticas, que no le despiertan el interés.

En este PFM se defiende la idea de que se debe procurar un acercamiento amistoso al modelo gaussiano y su capacidad de progresiva complejidad hasta alcanzar la consistencia de los modelos modernos en vigor, para motivar el acercamiento a la modelización de la dispersión atmosférica.

## 2 Itinerario constructivista

Un mecanismo para que el alumno se interese por el tipo de modelos que más tarde podría usar, es el reproducir de un modo aproximado y, naturalmente simplificado, el itinerario constructivista que conduce desde el simple enunciado de la ecuación de Sutton hasta la última versión de Aermod, presentada por Lake Company en 2016.

Se trata de evitar que el primer y permanente contacto del alumno con los programas *oficiales* tenga lugar mediante una interface del tipo:

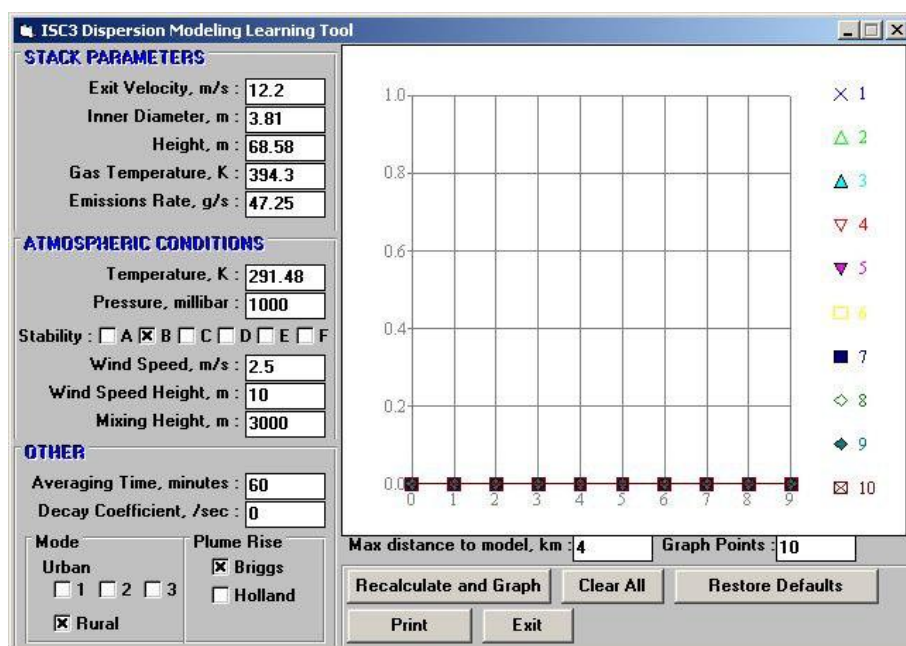


Figura 4.1. Guide Usuary Input (GUI) del programa ISC3, que utiliza el modelo gaussiano de dispersión.

Reduciendo al futuro ingeniero a la categoría de usuario.

La exposición que sigue muestra los algoritmos más asequibles para el enriquecimiento del modelo Gaussiano, teniendo en cuenta que exactamente estos mismos o muy similares anidan en los programas ya citados.

Se omiten los desarrollos matemáticos porque no suponen sino aumento del tamaño del texto, sin añadir contenidos significativos, y porque hay muchas fuentes documentales asequibles sobre estos extremos.

El interés se centra en los argumentos conceptuales que justifican el uso de dichos algoritmos, por lo que en este sentido se puede llegar a ser algo reiterativo.

El itinerario conceptual a desarrollar enlaza la ecuación de difusión advección con la complejidad de los programas de uso, tiene dos etapas. La primera, el tránsito de la ecuación de advección-difusión a la fórmula de Sutton se omite, dándola por conocida por mor de ahorro de espacio, y que está expuesto en todos los textos de la materia.

El interés específico radica en la segunda etapa que conduce desde la expresión general a un modelo estructurado y complejo para sustentar su validez, incorporando sucesivamente ecuaciones que pretenden completarlo acercando sus resultados al fenómeno observado.

## La ecuación de partida

El modelo gaussiano elemental implica admitir una serie de restricciones y simplificaciones, que lo hacen claramente irreal; entre otras, la naturaleza cuasi-puntual del foco emisor, carácter estacionario de la misma, y un viento constante, coincidente con la dirección del eje x.

Con estos supuestos la *ecuación inicial* de Sutton, puede formularse como:

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

Presenta tres factores que se corresponden cada uno de ellos con un sentido físico específico.

El primer multiplicando

$$\frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z}$$

Se corresponde con la concentración media de la emisión en el volumen de control tal y como es en cada instante, suponiendo intervalos de un segundo en la configuración de este valor.

La primera exponencial

$$\exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]$$

Expresa la distribución horizontal según el eje de las y, correspondiendo a las distancias laterales respecto a la línea media en la dirección del viento. Es adimensional.

La segunda exponencial

$$\exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right]$$

Describe la distribución en altura, o eje z. Incluye el valor de la altura del foco puntual emisor, H. Es adimensional.



## 3 Etapas en el itinerario

El camino desde esta ecuación a los modelos preconizados por la EPA se puede describir como un *proceso de adaptación metodológica del modelo*. Este proceso de adaptación está constituido por una serie de respuestas sucesivas ante necesidades específicas del modelo bajo el punto de vista físico matemático. Estas necesidades alcanzan a todas las variables y parámetros que intervienen en el modelo gaussiano, a la búsqueda de una mayor fiabilidad prospectiva, una mayor fidelidad al hecho físico y una precisión en la producción de resultados.

Distinguiendo como etapas cada una de las variables o de los parámetros, podemos distinguir: los parámetros de dispersión,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$ , la cantidad emitida,  $Q$ , la velocidad del viento,  $v$ , y la altura de emisión,  $H$ .

### 3.1 Los parámetros de dispersión

Son el concepto clave del modelo gaussiano. Representan la desviación estándar de la distribución gaussiana de probabilidad, con una fuerte naturaleza estructural en el sentido matemático, pero que no escapa a los condicionantes del sentido físico del fenómeno al que se aplica, a los que no puede contradecir.

¿Qué expresa físicamente el parámetro de dispersión?

Básicamente el coeficiente de dispersión representa el grado de dilución que va experimentando el agente disperso conforme se aleja de la fuente de emisión. Al centrarse sobre la cantidad de agente emitido, surgen varios interrogantes. Qué cantidad se emite es, en realidad, algo más que una cantidad. Es conveniente conocer a qué temperatura se emite, a qué velocidad se emite, qué dimensiones tiene el foco emisor, circunstancias todas que modificarán el modo de emitirse o, lo que es lo mismo, el modo de dispersarse.

### 3.2 La velocidad del viento

Igualmente la velocidad no es un valor constante, no ya en el tiempo, sino en las diferentes cotas de la atmósfera. De hecho, en la vertical en cada punto del suelo, la velocidad adopta valores cambiantes configurando el perfil de velocidad; de modo que la velocidad deja de ser definida por un valor escalar para ser definida como una función de la cota considerada. El perfil de velocidades se extenderá en toda la altura correspondiente a la capa límite de la atmósfera. Pero siendo el aire un fluido, y estando

en movimiento, la forma del perfil de velocidades (del campo de velocidades) estará condicionada por la rugosidad del suelo, por el stress de cizalla.

### **3.3 Altura eficaz**

En cuanto a la altura de emisión, cabe preguntarse en qué punto, la dispersión (que en puridad comienza en el instante inicial y el origen geométrico) empieza a ser relevante. La dispersión modelizada por esta ecuación tiene su *motor* en la velocidad del viento, que se considera en la dirección del eje  $x$ . Y se genera un interrogante: ¿la emisión tiene lugar a velocidad nula? Es evidente que no. La emisión es una masa fluida portadora de los agentes dispersos que sale a la atmosfera a una determinada velocidad. Ello indica que la masa emitida tiene una cantidad de movimiento debida a una velocidad de componente  $z$ , que elevará la emisión. Esta velocidad ascensional se compondrá con la velocidad del viento, según el eje  $x$ , agotando la componente vertical paulatinamente por gravedad, fricción y choque turbulento, hasta quedar anulada. En este punto el penacho está horizontalizado.

Pero la emisión, además de estar dotada con esta velocidad ascensional *mecánica*, está a una cierta temperatura. Si ésta es similar a la de la atmósfera, no influirá en la cinemática de la emisión. Pero si está a mayor temperatura originará un impulso vertical *térmico* debido a la menor densidad que le impulsa a ascender. Este impulso es una velocidad en el eje  $z$ , que se compondrá con la del viento, según el eje  $x$ . ¿Hasta cuándo? Hasta que se igualen las temperaturas, enfriándose la masa ascensional en un entorno más frío. Y en ese punto el penacho se horizontalizará. De modo que en cada emisión habrá que valorar qué componente ascensional es más influyente, si el mecánico o el térmico.

Todas estas circunstancias, son en realidad condiciones de contorno y condiciones iniciales que, debidamente formalizadas, van haciendo más complejo el modelo aumentando su validez. Esta formalización, mediante incorporación de ecuaciones a la inicial, va configurando un modelo complejo estructuralmente similar a los modelos vigentes.

### **3.4 Algoritmos incorporados en las etapas**

Seguidamente se exponen los algoritmos que se irán incorporando a la ecuación elemental para cada una de las variables y parámetros, hasta constituir una estructura similar (evidentemente más simplificada) a la de los modelos oficiales de la dispersión atmosférica.

### 3.5 Algoritmos para los parámetros de dispersión

En un atmósfera en reposo (sin advección) y térmicamente homogénea (sin convección), la única entidad actuante sería la difusión, de modo que la dispersión sería de la misma intensidad en todas las direcciones, y habría un único coeficiente de dispersión para las tres dimensiones (que es lo que se aplica en la deducción inicial de las ecuaciones).

Pero la atmósfera no es homogénea, sino que tiende a estar estratificada, sin que ello suponga, además, una homogeneidad por estratos. La atmósfera no sólo no está en reposo, sino que además se comporta siempre de un modo turbulento. La atmósfera no es isótropa térmicamente, y además cambia con el tiempo en diferentes escalas temporales (variaciones diarias y estacionales) y por diversas circunstancias meteorológicas sobrevenidas como la nubosidad o la insolación.

La primera conclusión, derivada de la concepción estratificada de la atmósfera es que la dispersión horizontal, será distinta de la dispersión vertical, y que en el caso habitual en que existe un viento dominante, y las temperaturas del aire no presentan disparidades acusadas, la difusión y la convección pueden despreciarse frente a la advección. Advección que tiene su dirección en la del viento, de modo que la coincidencia de esta dirección con el eje  $x$ , conduce a que el coeficiente de dispersión en el eje  $x$  está asumido por la velocidad del viento.

Un concepto importante a nivel pedagógico es que ante la complejidad caótica de la atmósfera las modelizaciones de los coeficientes de dispersión se configuran sobre una base estrictamente experimental, utilizando frecuentemente correlaciones y modelos matemáticos sin sentido físico. Es éste un punto importante porque la existencia de algoritmos de cálculo conduce en no pocas ocasiones a atribuir naturaleza analítica a magnitudes de naturaleza empírica.

Las primeras determinaciones de los parámetros de dispersión en estudios de campo se consideraron como función de la distancia al foco emisor. En concreto a partir de los datos recogidos del experimento de la *Green prairie*, con los que se elaboraron las tablas de los valores de  $\sigma$  de Pasquill-Gifford, válidos para distancias de pocos kilómetros y en terrenos regulares. (MacDonald, 2006).

Pero se advirtió que la distancia al foco emisor debía encuadrarse en el marco de las variaciones de la convección y la advección turbulenta, derivadas de la velocidad del viento, de la intensidad de radiación solar según el periodo del día, y, por vía de análisis de semejanza en el comportamiento de los fluidos, de parámetros como el factor de Monin-Obukhov (Foken, 2006). Con estas entradas se tabuló una clasificación de la

estabilidad como factor condicionante en seis escalones que van desde la estabilidad A, estado muy inestable con alta incidencia del fenómeno advectivo, a la estabilidad F, o atmósfera altamente estable (Hanna et al, 1996).

En la tabla se advierte la presencia del factor de Monin-Obukhov, junto a factores más conocidos como los horarios y la radiación solar, así como la presencia del viento.

Descripción	P-G Estabilidad	Hora/condición	Velocidad viento	Monin-Obukhov
Muy inestable	A	Día soleado	< 3 m/s	-10 m
Inestable	B or C	«	2-6 m/s	-50 m
Neutral	D	Nuboso ventoso	> 3-4 m/s	L  > 100 m
Estable	E	«	2-4 m/s	+ 50 m
Muy estable	F	Noche clara	< 3 m/s	+10 m

Tabla 4.1 Clasificación de la estabilidad atmosférica según Pasquill-Gifford. Llama la atención la presencia del factor Monin-Obukhov que intenta mantener la continuidad conceptual entre las determinaciones empíricas y el análisis de semejanza (traducción sobre el de MacDonald, 2003).

El factor de Monin-Obukhov factor es un parámetro con dimensiones de longitud que caracteriza en cierto modo la capa límite. Establece una comparación entre los valores relativos de cizalladura y flotabilidad con la disipación de energía cinética turbulenta. Se expresa como:

$$L = \frac{-u_* T_v}{kgQ_{v0}}$$

En donde k es una constante,  $u_*$  es la velocidad de fricción de von Kármán,  $Q_{v0}$  es el flujo debido a la temperatura virtual cinemática,  $T_v$  es una temperatura virtual de referencia, y g es la aceleración gravitacional. La relación  $g / T_v$  define el parámetro de flotación. El sentido físico está en su relación con el valor de la altura a la que el empuje domina sobre la fuerza de cizalla de la turbulencia. Una interpretación física de la longitud de Obukhov, L es que orienta sobre la altura sobre la superficie en la que el empuje (movimiento) domina sobre la producción mecánica (cizalla) de la turbulencia. Delimita las capas bajas, con cotas  $z \ll L$ , en las que las fuerzas de la cizalla del viento predominan sobre las del empuje, que son casi despreciables, de las capas altas, para cotas  $z \gg L$ , en las que ocurre lo contrario, predominando el empuje sobre la cizalla turbulenta.

El valor de L es positivo para estratificación estable, y negativo para estratificación inestable, y tiene al infinito para la estratificación neutra en donde el flujo de calor,  $Q_{v0}$ , que se encuentra en el denominador, tiende a cero. La dimensión Obukhov, como

parámetro de estabilidad, se define como  $z / L$ , y generalmente oscila entre -5 a 5, con valores positivos en condiciones de estabilidad, y valores negativos en condiciones de inestabilidad. En el límite de la estratificación neutra tiende a cero.

En la práctica hay diversos procesos para calcular las dispersiones. Algunos son gráficos (con las consiguientes inexactitudes) y otros son analíticos (en este caso se trata de correlaciones o regresiones sobre datos experimentales, o bien de algoritmos teóricos de utilidad académica).

En este trabajo sólo se consigna el método de Martin (Martin, 1976), que a partir de la tipología de la estabilidad atmosférica que se ha descrito, clasifica la estabilidad atmosférica en seis categorías de la A a F, utiliza los valores correspondientes de los coeficientes de la tabla adjunta en las expresiones:

$$\sigma_y = ax^{0.894}$$

$$\sigma_z = cxd + f$$

El resultado viene expresado en metros, y  $x$  se introduce en kilómetros.

Estabil. Categoría	a	x ≤ 1 km			x ≥ 1 km		
		c	d	f	c	d	f
A	213	440.8	1.941	9.27	459.7	2.094	-9.6
B	156	106.6	1.149	3.3	108.2	1.098	2
C	104	61	0.911	0	61	0.911	0
D	68	33.2	0.725	-1.7	44.5	0.516	-13
E	50.05	22.8	0.678	-1.3	55.4	0.305	-34
F	34	14.35	0.74	-0.35	62.6	0.18	-48.6

Tabla 4.2. Valores de coeficientes y exponentes para el cálculo de los parámetros de dispersión por el método de Martin.

Con este primer acercamiento, la ecuación de la dispersión gaussiana, incorpora al menos dos ecuaciones para calcular los parámetros de dispersión en función de la distancia. Hay procedimientos más exactos y con más ecuaciones; pero en este caso se expone el método de Martin por sencillez.

### 3.6 Algoritmos por la reflexión en el suelo

Frente a la suposición inicial de que el 100% del material disperso se deposita en el terreno nada más contacta con el mismo, tal y como si fuera absolutamente permeable,

cabe admitir que en no pocas ocasiones el material es reflejado en mayor o menor medida por el suelo, modificando el perfil de su distribución.

¿Cómo modifica la reflexión los valores de la atmósfera?

En la zona de contacto con el suelo, el rebote del elemento disperso, al volver a elevarse, incrementa la concentración en las capas superficiales. El efecto es como si no hubiera rebote, sino absorción total, pero, al mismo hubiera en el interior del suelo, una fuente de emisión simétrica respecto a la línea del suelo, que de igual manera no encontrase en la línea del suelo la menor resistencia al paso del elemento disperso, pasando su contenido a la atmósfera. La situación se visualiza en la figura.

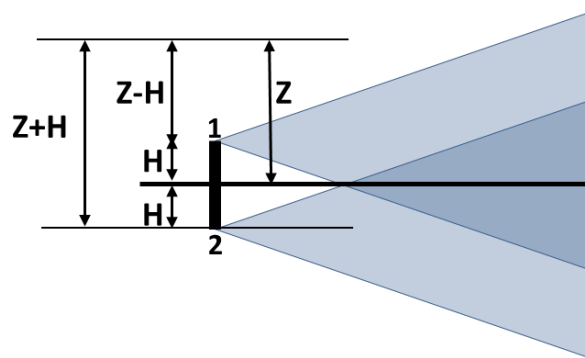


Figura 4.2. El número 1 indica la emisión original, el número 2 indica el punto de emisión de la fuente virtual simétrica respecto del plano del suelo. Para una cota dada, Z, la distancia vertical respecto al emisor real es Z-H, en tanto que la distancia para el emisor virtual, Z+H.

En esta situación, las concentraciones ocasionadas por cada foco son:

$$c1(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] \left\{ \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}$$

$$c2(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] \left\{ \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}$$

Por el principio de superposición, la concentración en un punto es la suma de concentraciones ocasionadas por cada foco emisor. Por lo que la expresión de las concentraciones con reflexión total es:

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

Naturalmente la reflexión total no es una realidad física frecuente. La reflexión tendrá un grado mayor o menor, expresándose con un coeficiente,  $r$ , que varía de 0 a 1.

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

La reflexión es importante en el caso de emisión de partículas, por prolongar su permanencia en suspensión, facilitando su inhalación durante plazos más prolongados

### 3.7 Algoritmos por la capa de inversión

Los diversos tipos de configuración de los penachos de emisión, muestran que en múltiples ocasiones la libre difusión de los elementos dispersos encuentra obstáculos atmosféricos de índole horizontal que limitan la configuración del penacho resultante, obligándole a adoptar formas variadas. El obstáculo atmosférico que limita la ascensión vertical de los penachos, es la ya conocida capa de inversión, derivada de la estructura térmica de la atmósfera.

La capa de inversión se corresponde con una situación térmica tal que las rectas que representan en el espacio temperatura/altura el gradiente adiabático seco y el gradiente de temperatura no coinciden en la cota cero, y se cruzan a determinada altura. Esa altura corresponde a la capa de inversión. En esta situación hay un calentamiento en altura que limita la movilidad ascensional. Junto a la capa de inversión, hay que considerar que la atmósfera estable dificulta los desplazamientos verticales, en tanto que la inestabilidad los facilita. La determinación de la altura de la capa de inversión se efectúa experimentalmente mediante sondas.

El comportamiento de la capa de inversión ante el penacho de dispersión es similar al que efectúa el suelo en el caso de la reflexión. De modo que cuando la emisión se encuentra limitada por arriba y por abajo por la capa de inversión y el suelo reflectante, puede considerarse que cada punto del espacio soporta la concentración de tres focos de emisión: el foco real, el foco virtual simétrico respecto a la línea del suelo, y el foco virtual simétrico respecto de la línea de inversión como eje.

Por el principio de superposición, la concentración total en cada punto será la suma de las concentraciones atribuibles a cada uno de los tres focos. Para la emisión por parte del foco real, se aplica la ecuación genérica.

$$c1(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}$$

Para el foco emisor virtual de reflexión del suelo, se utiliza el término ya visto, en el que la diferencia de cotas entre el foco emisor y cualquier punto es  $z+H$ .

$$c1(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}$$

En lo referente a la concentración derivada de la emisión del foco virtual especular a la capa de inversión, el término de distribución vertical, presenta una estructura algo más delicada, que se explica en la figura.

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

La suma de las tres concentraciones proporciona el resultado final:

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \begin{array}{l} \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \\ + \exp\left[-\frac{(z-2L+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \end{array} \right\}$$

En este caso, por simplicidad, se ha limitado a uno el número de rebotes, pero añadiendo sucesivos términos con la misma estructura, se posibilita el cálculo final.

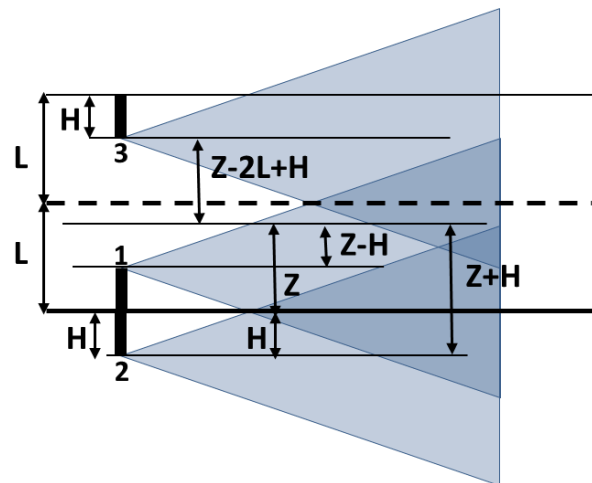


Figura 4.3. Esquema de un único rebote entre la capa de inversión y el suelo.



La capa de inversión puede ser más o menos permeable a la dispersión y en este caso hay que considerar la capacidad de penetración; esto es, si el penacho es capaz de perforar en parte o totalmente la capa de inversión.

En el caso de que la inversión sea intensa y el penacho no puede perforarla, y además que tienen lugar infinitos rebotes entre el suelo y capa de inversión, la concentración en el suelo se expresa como:

$$c(x, y, 0) = \frac{Q}{(2\pi)^{1/2} \sigma_y Lu} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]$$

En donde  $L$  es la cota de la capa de inversión.

### **3.8 Velocidad del viento y capa límite atmosférica**

La capa límite atmosférica (denominada comúnmente como ABL, Boundary Atmospheric Layer), es uno de los aspectos más delicados de todo lo que tiene que ver con la atmósfera.

La capa límite en mecánica de fluidos es el espesor del fluido que sufre la influencia de la pared, con un posible intercambio entre fluido y pared de energía térmica, cantidad de movimiento o incluso masa. La capa de la atmósfera en que se puede apreciar la influencia de del suelo se llama capa límite atmosférica, o Atmospheric Boundary Layer (ABL). De modo que puede decirse que se crea por la interacción entre la tierra y la atmósfera (Castro et al, 1991).

El flujo en esta capa es francamente turbulento, En general, se considera que en la ABL el flujo es completamente turbulento, lo que lleva a variaciones bruscas de velocidad, temperatura o humedad. Tiene un tamaño variable que oscila entre 30 a 3000 metros según la temperatura y la rugosidad del suelo entre otros factores.

El determinar su espesor tiene interés en la medida de que por encima de ella es difícil modelizar las velocidades del viento. Tras muchas simplificaciones, a título orientativo su espesor en condiciones de estabilidad puede asimilarse a 125 veces la velocidad del viento de referencia (Núñez Crespí).

Es en el espesor de esta capa límite, o altura de mezcla, en donde tiene sentido establecer un perfil vertical de velocidades.

En este trabajo se utilizan el algoritmo potencial, y los cálculos de la teoría de similitud de Monin-Obukhov (MOST).

El modelo potencial es el más sencillo:

$$u = u_{ref} \left[ \frac{z}{z_{ref}} \right]^p$$

Es importante reparar en que frecuentemente el dato de velocidad del viento se refiere a la altura material del punto de emisión, esta altura es  $z_{ref}$  y este dato es  $v_{ref}$ . El valor del exponente,  $p$ , que es de índole experimental y, por tanto, necesariamente inexacto, se extrae de tablas como la que se adjunta tabla 4.

El modelo logarítmico es más riguroso en su proceso, ya que se basa en el análisis de semejanza. Utiliza el factor Monin-Ubikov, pero también requiere un parámetro experimental conceptualmente impreciso.

La velocidad de fricción es un parámetro que reúne la velocidad del viento, la estabilidad del medio y el régimen de turbulencia.

El método logarítmico establece la relación de la velocidad respecto a la velocidad de fricción como:

$$u = \frac{u_*}{k} \ln \left[ \frac{z}{z_0} \right]$$

En donde  $k$  es la constante de Karman (en este caso, 0.4),  $z$  la cota, y  $z_0$  la altura de rugosidad (Guevara, 2013).

Ecuación que se resuelve mediante:

$$\frac{u_*}{k} = \frac{u_{10}}{\ln \left[ \frac{z_{10}}{z_0} \right]}$$

Con lo que se tiene:

$$u = \frac{u_{10}}{\ln \left[ \frac{z_{10}}{z_0} \right]} \ln \left[ \frac{z}{z_0} \right]$$

Categorías de estabilidad	Exponente (condiciones rurales)	Exponente (condiciones urbanas)	Tipo de terreno	Z <sub>0</sub> (m)
A	0.07	0.15	1. Mar	0,0002
B	0.07	0.15	2. Liso	0,005
C	0.10	0.20	3. Abierto	0,03
D	0.15	0.25	4. Abierto rugoso	0,10
E	0.35	0.30	5. Rugoso	0,25
F	0.55	0.30	6. Muy rugoso	0,5
			7. Rugoso uniforme	1,0
			8. Caótico	8,0

Tabla 4.3. A la izquierda valores del exponente en el modelo exponencial del perfil vertical de velocidades (Source EPA, 1987). A la derecha, clasificación de Davenport de las rugosidades efectivas del terreno (modificada de Hammond y Chapman, 2012) para el modelo logarítmico.

### 3.9 Altura efectiva, momento y flotabilidad

La altura efectiva es la cota más elevada en que el penacho adopta la horizontalidad. Es la cota en la que el momento y la flotabilidad de la emisión, se han agotado, por lo que la dispersión ya sólo depende del viento.

El cálculo de la sobrelevación,  $\Delta h$ , la cota en que se alcanza esa situación, a sumar a la altura física de emisión para obtener la altura efectiva, puede calcularse mediante muchas propuestas. En este trabajo se citan la de Hollands, consistente en un algoritmo fijo, y la de Briggs, más compleja y flexible, más adaptada a las condiciones específicas de cada emisión.

Según Hollands, en condiciones neutrales, la sobre elevación depende del diámetro de la chimenea,  $d_s$ , temperatura de la emisión,  $T_s$ , velocidad de la emisión,  $v_s$ , velocidad del viento,  $u$ , temperatura del aire,  $T_a$ , y presión atmosférica,  $P$ . Así, para condiciones neutrales:

$$\Delta h = \frac{d_s v_s}{u} \left[ 1.5 + 2.68 \times 10^{-3} P \left( \frac{T_s - T_a}{T_s} \right) d_s \right]$$

Para condiciones no neutrales:

$$CF = \left( \frac{T_s}{10} \right) + 0.7 \quad \Delta h_{CF} = (CF) \Delta h$$

### ***Las ecuaciones de Briggs***

El método de las ecuaciones de Briggs para el cálculo de la flotabilidad de la pluma, permite una mejor aproximación, pero es complejo y arduo, en especial para cálculos manuales.

Procede esencialmente como un árbol de decisión que va bifurcándose ante alternativas propuestas.

### ***Flotabilidad o momento***

La primera decisión es si en la emisión prima la flotabilidad o el momento. Para ello define los parámetros de flotabilidad y momento de la emisión. El parámetro de flotabilidad es

$$F_b = g v_s \frac{d_s^2}{4} \left( \frac{T_s - T_a}{T_a} \right)$$

Y el parámetro de momento,

$$F_m = \frac{v_s^2 d_s^2}{4} \left( \frac{T_a}{T_s} \right)$$

Igualmente, el incremento de temperatura de cruce, que expresa en términos de temperaturas el predominio o no de la flotabilidad sobre el momento (Lakes Environmental, 2005).

Si la emisión tiene lugar con una estabilidad atmosférica inestable o neutral, A, B, C o D, se calculará su  $F_b$ . Si el valor de este  $F_b$ , parámetro de flotabilidad, es  $F_b < 55$ , el incremento de temperatura de cruce se calculará con la ecuación

$$(\Delta T)_c = \frac{0.0297 T_s V_s^{1/3}}{d_s^{2/3}}$$

Si la emisión con una estabilidad atmosférica A, B, C o D, ofrece un valor de  $F_b \geq 55$ , el incremento de temperatura de cruce se calculará como

$$(\Delta T)_c = \frac{0.00575 T_s V_s^{2/3}}{d_s^{1/3}}$$

Si la emisión con una estabilidad atmosférica E o F, el incremento de temperatura de cruce se expresará como

$$(\Delta T)_c = 0.01958 T_s V_s s^{1/2}$$

La comparación de este incremento de temperatura de cruce con el salto térmico entre la emisión y el aire,

si  $(T_s - T_a) \geq (\Delta T)_c$ , predomina la flotabilidad

si  $(T_s - T_a) < (\Delta T)_c$ , predomina el momento

### ***Predominio de flotabilidad***

El agotamiento paulatino del momento y de la flotabilidad de la pluma conduce a que la inclinación de la misma vaya variando hasta alcanzar la horizontalidad antes del decaimiento.

Para ello hay que definir determinados valores de la distancia al foco de emisión, eje x, en los que el eje de la pluma experimente cambios significativos de dirección. Los puntos más relevantes son,  $x^*$ , distancia al foco emisor en que la turbulencia comienza a dominar, y  $x_f$ , también en el eje x al foco emisor, que es la distancia la que pluma alcanza su máxima altura y está horizontalizada. Se calculan:

Para estabilidad atmosférica A, B, C y D

$$\text{si } F_b \geq 55 \text{ m}^4 / \text{sec}^3, \quad x^* = 34 F_b^{2/5}, \quad x_f = 3.5x^*$$

$$\text{si } F_b < 55 \text{ m}^4 / \text{sec}^3, \quad x^* = 14 F_b^{5/8}, \quad x_f = 3.5x^*$$

Para estabilidad atmosférica E y F, se define un parámetro de estabilidad, S.

$$s = \frac{g}{T_a} \left( \frac{\Delta \Theta}{\Delta T} \right)$$

Que toma el valor 0.02 K/m para estabilidad E, y 0.035 K/m para estabilidad atmosférica F.

$$x_f = 2.0715 \frac{u}{s^{1/2}}$$

Y la sobrelevación final para el predominio de la flotabilidad queda que para estabilidad atmosférica A, B, C y D

$$\Delta h = \frac{1.6F_b^{1/3}(3.5x^*)^{2/3}}{u}$$

Para estabilidad atmosférica E y F,

$$\Delta h = 2.6 \left( \frac{F_b}{us} \right)^{1/3}$$

#### ***9.4 Predominio del momento***

En el caso de tratarse de una emisión en una atmósfera con estabilidad A, B, C o D, con predominio del momento, la sobrelevación es

$$\Delta h = \frac{3d_s v_s}{u}$$

Y si la estabilidad atmosférica es E o F, la expresión es:

$$\Delta h = \frac{1.6F_b^{1/3}(x)^{2/3}}{u}$$

Lo aconsejable es calcular las dos y aplicar la menor

#### ***Trayectoria del penacho hasta horizontalidad***

Así como la sobrelevación de la pluma tiene importancia porque en determinadas condiciones de inyección y temperatura la altura eficaz final de la emisión puede experimentar un aumento apreciable modificando la dispersión a sotavento, el punto en que se efectúa la horizontalidad es importante porque es a partir de ese lugar que la dispersión turbulenta actúa plenamente.

La ecuación del eje de la pluma en caso de predominar la flotabilidad, para valores de x desde 0 hasta  $x_f$ , es:

$$\Delta h = 1.5 \left( \frac{F_m}{u\sqrt{s}} \right)^{1/3}$$

En caso de que predomine el momento, hay que definir un coeficiente de inyección,  $\beta_j$

$$\beta_j = \frac{1}{3} + \frac{u}{v_s}$$

Que relaciona las velocidades de emisión y del viento. Y la ecuación del eje de la pluma, para valores de x desde 0 hasta  $x_f$ , es, para estabilidad atmosférica A, B, C y D.

$$\Delta h = \left( \frac{3F_m x}{\beta_j^2 u^2} \right)^{1/3}$$

Y en el caso de que se trate de emisiones con predominio de momento en condiciones de estabilidad E y F, la ecuación de la trayectoria es:

$$\Delta h = \left[ 3F_m \frac{\sin(x\sqrt{s}/u)}{\beta_j^2 u \sqrt{s}} \right]^{1/3}$$

En donde intervienen el parámetro de estabilidad,  $s$ , y el coeficiente de inyección,  $\beta_j$ .

## Bibliografía para el capítulo 4

- Bhargava, A. (2016). Effect of Stack Exit Velocity and Gas Temperature on Plume rise using different equations. *International Journal of Scientific Development and Research (IJS DR)*. Volume 1, Issue 4.
- Castro, M., R. González, R. y. Portela, A. (1991). Parametrización de la capa límite atmosférica en los modelos numéricos de pronóstico meteorológico. *Rev Física cielo Tierra*, núm. 3. 103-138. Ed. Univ. Compl. Madrid. 1991.
- Foken, T., 2006: 50 years of the Monin–Obukhov similarity theory. *Bound.-Layer Meteor.*, 119, 431–447, DOI: 10.1007/s10546-006-9048-6.
- Hanna, Drivas and Chang, 1996, citados por Macdonald, R. (2003). Theory and objectives of air dispersion. *Modelling Air Emissions for Compliance MME 474A Wind Engineering*. December 2003
- Guevara Diaz, J.M. (2013). Cuantificación del perfil del viento hasta 100 m de altura desde la superficie y su incidencia en la climatología eólica.
- Hammond, D.S., Chapman, L. and Thornes, J.E. (2010). Roughness length estimation along road transects using airborne LIDAR data. *METEOROLOGICAL APPLICATIONS*. *Meteorol. Appl.* 19: 420–426 (2012). Published online 20 September 2011 in Wiley Online Library. (wileyonlinelibrary.com) DOI: 10.1002/met.273.
- Hammond, D.S., Chapman, L. and Thornes, J.E. (2010). Improving estimates of roughness length in a road weather prediction model using airborne LIDAR data. 2010 Standing International Road Weather Commission Biennial Conference, Quebec City, Canada, February 5th -7th 2010.
- Martin, D.O., 1976. Comment on “The Change of Concentration Standard Deviation with Distance”, *J. Air Pollut. Control Assoc.*, 26:145-147.
- Núñez Crespi, S. (2002). ALTURA DE LA CAPA DE MEZCLA: CARACTERIZACIÓN EXPERIMENTAL Y APLICACIÓN DE UN MODELO METEOROLÓGICO PARA EL ESTUDIO DE SU EVOLUCIÓN DIURNA. MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR. 2004ISBN: 978-84-669-1749-0
- Vittal, K. P. R., Santos Alvala, R. C., Prasad, G. S. S. D., Sá, L. D. A., Amaury, S.(1998). The stability of the surface layer as indicated by Monin Obukhov length scale. Conference: X Congresso Brasileiro de Meteorologia/VIII Congresso da FLISMET.

[https://www.weblakes.com/guides/iscst3/section6/6\\_1\\_4.html](https://www.weblakes.com/guides/iscst3/section6/6_1_4.html)



## Capítulo 5

# 1 Introducción

El modelo gaussiano de dispersión atmosférica goza de alta consideración en el *mundo real* de la industria y la política ambiental, como acredita la USEPA, en un ambiente donde, según cita Stockie (2011) a Settles (2006), "*plume dispersion modeling is central to homeland security*"

Entre otros, hay cuatro problemas que se han planteado para la implantación absoluta del modelo gaussiano. El primero, es la falta de respuesta pormenorizada al carácter necesariamente turbulento de la atmósfera, complicado por la repercusión del perfil rugoso del *skyline*. A este respecto son numerosos los intentos analíticos (apoyados en el principio de superposición) que se han ido incorporando a las ecuaciones iniciales. El segundo problema, es la dificultad para aplicar el modelo gaussiano cuando la velocidad del viento es muy baja, desproveyendo al modelo del papel relevante del componente advectivo. Un tercer problema surge cuando las emisiones son instantáneas y no estacionarias, o de naturaleza discontinua. El cuarto problema nace a la hora de considerar el agente disperso de naturaleza particulada, o con capacidad de reacción química que modifica con el tiempo las propiedades del agente transportado.

En este capítulo se muestran algunas adaptaciones elementales del modelo gaussiano correspondientes a dos de estas situaciones: las emisiones instantáneas o intermitentes, y las emisiones de partículas.

Las expresiones matemáticas han sido extraídas de cuatro fuentes para verificar su coincidencia. Estas fuentes son (Ludlow, 2001), (Crowl and Louvar, 2002), (Nazirah and Halim, 2010) y (Stockie, 2011). En razón de la coincidencia de las expresiones y para evitar recargar el texto, no se indica habitualmente qué expresión se ha extraído de qué autor. Mención aparte merecen las expresiones extraídas de (Arystanbekova, 2004), en cuyo caso se citan explícitamente.

## 2 Emisión instantánea y *puffs*

Las emisiones instantáneas o no estacionarias suelen corresponder a accidentes en empresas industriales, químicas o radiológicas, depósitos de petróleo, oleoductos y centrales nucleares. Su carácter imprevisto y sus consecuencias exigen herramientas de modelización robustas y rápidas que proporcionen más una visión inmediata del problema con delimitación de zonas de peligrosidad, que una descripción exhaustiva y pormenorizada. Su interés estriba en la implantación de medidas de protección y evacuación más que en la brillantez académica.

La herramienta gaussiana adaptada a este fin, es el programa CALPUFF, del que ya se ha hecho referencia.

Un enfoque analítico *convencional*, en el ámbito del modelo Gaussiano, consiste en considerar que la emisión instantánea se comporta como un sistema autónomo, que se expande activamente por difusión, en las tres dimensiones en tanto que es desplazado pasivamente, adventiciamente, por la acción del viento (Arystanbekova,2004). Este sistema autónomo, es una nube que se expande y desliza, es lo que se denomina puff.

La solución aproximada de este planteamiento en el modelo gaussiano, considerando que la dispersión en el eje  $x$ , tiene su propia entidad, no siendo despreciable en relación a la actuación adventicia, da lugar a la ecuación:

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \left\{ \exp \left[ -\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right] \right\} \left[ \exp \frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2} + \exp \frac{-(z+H)^2}{2\sigma_z^2} \right]$$

En donde llaman la atención dos aspectos. En primer lugar la presencia del tiempo como variable independiente relevante, acentuando el carácter no-estacionario del proceso. Y en segundo lugar la presencia de  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$ , coeficientes de dispersión en las tres dimensiones, y no solo en sentido vertical y horizontal como de ordinario. La explicación radica en que la dispersión en el eje  $x$  no depende exclusivamente del viento. El resto de las variables que se encuentran en las expresiones son las habituales para las emisiones estacionarias.

Al ser el puff un sistema que se desliza su comportamiento puede describirse desde el punto de vista del centro del propio puff, o desde el punto de vista del receptor que experimenta la concentración del agente dispersante.

Si se consideran las concentraciones de los agentes dispersos originadas por un puff que tiene en ese instante su centro situado en las coordenadas  $x_c, y_c, z_c$ , la ecuación adecuada es:

$$C(x, y, z) = \frac{M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{(x-x_c)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y-y_c)^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z-z_c)^2}{2\sigma_z^2}\right)$$

Este planteamiento supone una elusión de la variable tiempo, considerando exclusivamente dónde se encuentra el puff. Un interés de esta expresión es que constituye un mecanismo para suplir la ecuación gaussiana tradicional para sucesos estacionarios, por la suma de diversos puffs sucesivos, permitiendo configurar los efectos de un penacho con meandros (Guariso, 2015)

Más interés tiene la expresión:

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-ut}{\sigma_x}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y-vt}{\sigma_y}\right)^2\right] \times \left[ \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-h-wt}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+2H_L+h-wt}{\sigma_z}\right)^2\right] \right]$$

En donde, siendo  $Q$  la emisión,  $h$  la altura efectiva de la emisión, y  $H_L$  la altura de la capa de mezcla, se observan una peculiaridad, añadida a la presencia de la variable tiempo y de parámetros de dispersión para las tres dimensiones. Se trata de la presencia de  $u, v$  y  $w$ , componentes de la velocidad; porque es evidente que si se hace coincidir el eje  $x$  con la dirección del viento, con lo que  $v = w = 0$ , la ecuación se convierte en la expresión del modelo gaussiano.

La razón de esto es que ya no hay que considerar que el viento es constante, sino que pueda ir variando con el paso del tiempo. Finalmente la presencia de la capa de inversión, porque la tendencia expansiva del puff sugiere que siempre se alcance con el tiempo esa altura. De no existir una capa de inversión definida, parece recomendable incluir el valor de la capa de mezcla.

Una expresión más completa todavía es la expresada (Arystanbekova, 2004), que incluye una referenciación hacia un sistema de coordenadas centrado en el punto de emisión, orientado de tal modo que su eje  $x$  coincida con la dirección del viento. De este modo, el ángulo respecto al sistema fijo viene definido por las componentes del viento. Esta orientación se transmite a los parámetros de dispersión, igualmente.

La expresión es:

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{((x-x_0)u - (y-y_0)v - (u^2 + v^2)(t-t_0))^2}{2\sigma_x^2(u^2 + v^2)} \right) \right] \times$$

$$\exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{((x-x_0)u - (y-y_0)v)^2}{\sigma_y^2(u^2 + v^2)} \right) \right] \times$$

$$\left[ \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{(z - (z_0 + h))^2}{2\sigma_z^2} \right) \right] + \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{(z - (z_0 + h) + 2H_L)^2}{2\sigma_z^2} \right) \right] \right]$$

En donde  $t$  es el tiempo transcurrido,  $t_0$ , el tiempo de emisión,  $Q$  es la emisión,  $u$ ,  $v$  las componentes de la velocidad del viento,  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  los parámetros de dispersión horizontal y vertical,  $H$  es la altura de la capa de mezcla,  $x_0$ ,  $y_0$ ,  $z_0$  las coordenadas del punto de emisión, y  $h$  es la altura efectiva de emisión.

## 2.1 Las dosis recibidas al exponerse a un puff

El carácter accidental e imprevisto de la mayoría de emisiones puff, eventualmente de sustancias muy tóxicas o con actividad radiactiva, establece como primer plano de las modelizaciones, la determinación de las concentraciones en el suelo con el paso del tiempo, así como de las dosis totales acumuladas.

### 2.1.1 Puff generado en la cota cero

Se corresponden con los accidentes en conducciones industriales, en especial de petroquímicas.

La expresión de la concentración con el paso del tiempo cuando la emisión tiene lugar desde el suelo es:

$$c(x, y, 0, t) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x-ut}{\sigma_x} \right)^2 + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{z^2}{\sigma_z^2} \right] \right\}$$

Y la concentración a nivel del suelo, cuando la emisión tiene lugar al mismo nivel, es:

$$c(x, y, 0, t) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x-ut}{\sigma_x} \right)^2 + \frac{y^2}{\sigma_y^2} \right] \right\}$$

Y la concentración en el eje x a nivel del suelo es:

$$c(x, 0, 0, t) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x-ut}{\sigma_x} \right)^2 \right]$$

En lo relativo a las dosis totales, recibida en el suelo para emisión desde el suelo es:

$$D_{total}(x, y, 0) = \frac{Q}{\pi \sigma_y \sigma_z u} \exp \left( -\frac{1}{2} \frac{y^2}{\sigma_y^2} \right)$$

Y la dosis total en la línea media es:

$$D_{total}(x, 0, 0) = \frac{Q}{\pi \sigma_y \sigma_z u}$$

### 2.1.2 Emisión del puff a una altura sobre el suelo

La expresión que describe el comportamiento del puff al emitirse desde una altura es como la anterior, y viene matizada por la estructura habitual de introducir condicionantes en la expresión de la dispersión vertical.

$$\begin{aligned} c(x, y, z) &= \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{y}{\sigma_y} \right)^2 \right] \\ &\times \left\{ \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{z-Hr}{\sigma_z} \right)^2 \right] + \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{z+Hr}{\sigma_z} \right)^2 \right] \right\} \\ &\times \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x-ut}{\sigma_x} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

Se omiten las expresiones específicas para la superficie del suelo o planos específicos, que se obtienen anulando determinadas variables.

## 2.2 Ausencia de viento

Como se indicaba en la introducción al capítulo, uno de los problemas que se presentan a la hora de la validez del modelo gaussiano, es su indeterminación en caso de ausencia de viento. En efecto, anular totalmente el efecto advectivo en principio parece un

planteamiento irreal dado la naturaleza turbulenta de la capa límite atmosférica. La idea de que toda la dispersión de un agente pueda llevarse a cabo exclusivamente a expensas de la difusión no parece lógica.

En el caso de ausencia de viento, se utiliza la expresión (Nazirah and Halim, 21020).

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{z^2}{\sigma_z^2} \right) \right]$$

En esta línea de cálculo, hay expresiones que describen el estado de una emisión continua en ausencia de viento:

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

### 2.3 Los parámetros de dispersión en emisiones instantáneas

En el caso de las emisiones instantáneas o modelos *puff*, los parámetros de dispersión tienen características especiales. Suele utilizarse la tabla de parámetros de Briggs de acuerdo con la clasificación de la estabilidad según Pasquill (Arystanbekova, 2004), pero parecen relativamente inexactas.

Se han tabulado expresiones para los parámetros de dispersión, pero solamente para tres estabilidades genéricas: inestable, neutral y estable, que se exponen en la tabla 5.1. Las expresiones son ajustes a partir de muy pocas determinaciones experimentales entre 0.1 y 4 km (Crowl y Louvar, 2002).

$$\sigma_x = \sigma_y$$

$$\text{Inestable} \quad \log_{10} \sigma_y = -0.844030 + 0.992014 \log_{10}(x)$$

$$\text{Neutral} \quad \log_{10} \sigma_y = +0.006425 + 0.297817 \log_{10}(x)$$

$$\text{Estable} \quad \log_{10} \sigma_y = -1.671410 + 0.892679 \log_{10}(x)$$

$$\text{Inestable} \quad \log_{10} \sigma_z = -0.27995 + 0.72802 \log_{10}(x)$$

$$\text{Neutral} \quad \log_{10} \sigma_z = -0.8174 + 0.698592 \log_{10}(x)$$

$$\text{Estable} \quad \log_{10} \sigma_z = -1.33593 + 0.605493 \log_{10}(x)$$

Tabla 5.1 Algoritmos para calcular los parámetros de dispersión en emisiones instantáneas.

# 3 Partículas y ecuación de Ermak

## 3.1 Dispersión atmosférica particulada

Las partículas tienen una especial importancia porque pueden ser inhaladas por parte de los seres vivos. Por ello el tamaño de la partícula influye en dos circunstancias. La primera en su comportamiento mecánico en el seno de un fluido turbulento como es la atmósfera, y la segunda en su facilidad para entrar en el cuerpo a través de la inhalación o adsorción dérmica.

Las dosis recibidas por inhalación dependen en gran medida del tamaño de partícula dentro del rango respirable, porque a menor tamaño las partículas tienen más facilidad de descenso por el árbol respiratorio y más facilidad para ser retenidas en las paredes del entorno húmedo y cálido (químicamente activo) del tracto.

La modelización de la dispersión y especialmente la deposición de las partículas no solo en un momento dado, sino como depósito acumulado en el tiempo es de gran interés (Mandel, 2015).

### *Carácter peculiar físico de las partículas*

Las partículas aportan al fenómeno de la dispersión aérea un elemento de complejidad debido a su naturaleza de entidad másica puntual sometida a la acción de la gravedad. Este hecho implica incorporar a su modelización la velocidad de caída y la deposición de las partículas en la superficie del terreno. Esta caída y esta deposición se combinan con el impulso ascensional térmico inicial, con el impulso mecánico de emisión, con el arrastre debido al viento, y con las turbulencias específicas de la capa límite atmosférica, definiendo una diversidad de procesos.

Esta diversidad explica que el comportamiento de las partículas no tiene un carácter universal y permanente. Ya que su diámetro crítico (por encima del cual predominará el proceso gravitatorio), depende en cada caso de las características físico-térmicas de la emisión, de la forma y densidad de las partículas, de la altura de la emisión y, muy especialmente, de la estabilidad atmosférica en cada caso (Mandel et al, 2015). Ello lleva a estos autores a determinar estos diámetros críticos según sea el régimen del flujo alrededor de la partícula un flujo de Stokes, un flujo intermedio o un flujo Newtoniano.



En este capítulo se va a indicar la limitación del modelo gaussiano de dispersión sin la introducción de determinadas modificaciones, las opciones de modificación gaussiana, el modelo fluctuante particulado de Hann y la ecuación de Ermak.

Hay abundantes modelos particulares (normalmente lagrangianos) que intentan modelizar la dispersión particulada, pero no gozan de la expansión del modelo gaussiano.

### **3.2 Modelo gaussiano y dispersión de partículas**

Las ecuaciones del modelo gaussiano de dispersión, en su formulación convencional contemplan el transporte de inertes en un proceso estacionario y sin interferencias gravitacionales. Para Holmes, los modelos habituales no han contemplado la simultaneidad de transporte de gases y partículas. Este autor identifica como una gran limitación de los modelos de penacho que, como se ciñen al estado estacionario no tienen en cuenta lo que ocurre con el contaminante durante el tiempo de viaje hasta el receptor. Indica que, por tanto, el estudio de la dinámica de aerosoles descansa en el tratamiento post proceso, incluyendo la incorporación de modelizado de reacciones químicas en determinados casos.

Ciertamente la mayoría de los modelos de Gauss sólo consideran la difusión y la advección de los contaminantes, pero los modelos gaussianos más actualizados, incluyen procesos físicos tales como la deposición y las reacciones químicas rápidas (Holmes and Morawska, 2006). Se trata de incorporar *comportamientos no gaussianos* de las partículas a los modelos gaussianos (Smith, 2006).

### **3.3 Algoritmos tradicionales**

Una primera actuación es la inmediata interpretación mecánica de incluir en la composición de velocidades que determina la trayectoria de los agentes transportados la acción de la gravedad sobre los entes másicos particulados. Sin duda la primera repercusión es desviación de la pluma con la aparición de una pendiente negativa en el eje inicialmente horizontal de la pluma.

La magnitud de esta inclinación vendrá determinada por la velocidad de arrastre del viento y la velocidad de sedimentación propia de la partícula.

Con este planteamiento simplificado, la formulación de la pluma gaussiana estándar puede establecerse como para cada rango de partículas que configuran la dispersión específica, calculando el total por superponibilidad de concentraciones:

$$C(x, y, z) = \frac{Q(k)}{2\pi V \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{\sigma_y^2}\right) \left( \exp\frac{-(z-H_e)^2}{2\sigma_z^2} + \exp\frac{-(z+H_e)^2}{2\sigma_z^2} \right)$$

Suponiendo  $N$  rangos de partículas, la concentración total será la suma de las concentraciones de los diversos rangos de partículas según su diámetro, ya que tendrán velocidades de sedimentación diferentes:

$$C(x, y, z) = \sum_{k=1}^N \frac{Q(k)}{2\pi V \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{\sigma_y^2}\right) \left( \exp\frac{-(z-H_e)^2}{2\sigma_z^2} + \exp\frac{-(z+H_e)^2}{2\sigma_z^2} \right)$$

En donde la altura eficaz viene modificada en el sentido de:

$$H_e = H - v_g(k) z_1 / V$$

en donde  $v_g(k)$  es la velocidad de deposición seca del tipo  $k$ , y que se puede expresar como (Wark y Warner, 2000).

$$v_g = \left[ \frac{2m_p g (\rho_p - \rho_g)}{A C_d \rho_p \rho_g} \right]^{1/2}$$

En ella intervienen las densidades del gas (aire) y de la partícula,  $\rho_g$  y  $\rho_p$ , el área equivalente,  $A$  y el coeficiente de resistencia aerodinámica,  $C_d$ . Se aprecia la imposibilidad de obtener una expresión analítica exacta, ya que el coeficiente de resistencia,  $C_d$ , es función del número de Reynolds, de modo que sólo es aproximable en régimen laminar, en donde la expresión es la de la ley de Stokes:

$$v_g(k) = \frac{d^2(k) g \rho(k)}{18\mu}$$

Esta ley es aplicable a partículas de entre 1 y 50  $\mu\text{m}$ , más aproximada para tamaños entre 50 y 100  $\mu\text{m}$ . Por debajo de este tamaño hay que aplicar el factor de corrección de Cunningham (Wark y Warner, 2000).

### **3.4 Modelo de Haan**

Presentado en 1999, se trata de un modelo mixto, incorporando elementos lagrangianos al modelo gaussiano.

El Puff Partículas Modelo (PPM) consiste en la inserción en el modelo gaussiano de dispersión de puff, CALPUFF, un módulo lagrangianos para tratar en detalle y no en promedio la dispersión de partículas. Combina las ventajas de ambos enfoques, lagrangiano u gaussiano, y permite predecir tanto la media de la concentración, como la distribución de sus valores alrededor de la media (Haan and Rotach, 1995), (Scire, 2008).

Utiliza un enfoque lagrangiano para determinar la trayectoria del puff. Y distingue dentro del desplazamiento conjunto del sistema, las fluctuaciones propias de las partículas, pues no sólo hay que considera los grandes remolinos que influyen sobre el puff, ocasionando los meandros, las oscilaciones y fluctuaciones de la trayectoria conjunta, sino además los pequeños remolinos que se generan dentro del mismo con carácter estocástico.

La USEPA patrocina este modelo como complemento al básico CALPUFF.

### **3.5 La ecuación de Ermak**

Considera la deposición y la sedimentación actuando simultáneamente. Se trata en este caso de la deposición seca, diferente de la deposición húmeda que es el fenómeno de adherencia de las partículas en suspensión al agua también en suspensión, y que entra más bien en el capítulo de transformaciones del agente disperso, ya que frecuente mete la deposición húmeda se acompaña de transformaciones químicas.

La naturaleza másica gravitacional de las partículas, como ya se ha visto, hace que tiendan a separarse de la atmósfera cayendo a una velocidad definida, que es la velocidad de sedimentación.

Pero además de esta velocidad vertical, en la superficie del suelo hay un flujo de partículas, debido a que todas o parte de las partículas que contactan con la superficie, se depositan en ella siendo absorbidas, adsorbidas, atraídas, etc. Las determinaciones experimentales indican que el flujo vertical particulado en la superficie es proporcional a la concentración en la superficie, definiéndose la velocidad de deposición (Stockie, 2011).

Según Stockie ya Smith en 1962 formuló las ecuaciones de Gauss del penacho teniendo en cuenta la deposición. Pero es Ermak (1977) el primero en considerar la dispersión de contaminantes tanto con la deposición y la sedimentación.

Ermak introduce en la ecuación de advección difusión el término,  $W_z$ , correspondiente al descenso gravitacional de la partícula.

De modo que la ecuación queda como

$$U \frac{\partial C}{\partial x} = K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + W_z \frac{\partial C}{\partial z}$$

Y, además:

$$\left[ K \frac{\partial C}{\partial t} + w_{set} C \right]_{z=0} = w_{dep} C|_{z=0}$$

Donde  $w_{set}$  es la velocidad de sedimentación y  $w_{dep}$ , la velocidad de deposición, expresadas ambas en m/s.

Así se alcanza la expresión (Ermak, 1976) (Lushi and Stockie 2010).

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi U \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \exp\left(-\frac{U_{set}(z-H)}{2K_z} - \frac{U_{set}^2 \sigma_y^2}{8K_z^2}\right) \left( \exp\left(\frac{-(z-H_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(z+H_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) - \sqrt{2\pi} \frac{U_0}{K_z} \exp\left(\frac{U_0(z+H)}{K_z} + \frac{U_0^2 \sigma_z^2}{2K_z^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sigma_z U_0}{\sqrt{2}K_z} + \frac{z+H}{\sqrt{2}\sigma_z}\right) \right)$$

Se trata de un algoritmo complejo, que incluye una función especial, la función error complementaria, que deriva de la función error correspondiente. Existe una relación simple entre la función error y la función distribución para una variable aleatoria (con media “ $\mu$ ” y desviación típica “ $\sigma$ ”): es la probabilidad de que el error de una mediación individual se encuentre comprendido en el intervalo  $-x$  y  $+x$  (matematica.laguia2000, 2011).

La función error complementaria, se denota como  $\operatorname{erfc}$ , es la complementaria de la función error, y se expresa como:

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt$$

En la ecuación de Ermak  $U_{set}$  es la velocidad de sedimentación,  $U_{dep}$  es la velocidad de deposición,  $U_0$  es

$$U_0 = U_{dep} - \frac{1}{2} U_{set}$$

Los resultados del modelo se supone que son capaces de describir una variedad de fenómenos de deposición que se pueden separar en una tipología en función de la proporción entre la velocidad de deposición,  $U_{dep}$ , y la velocidad de sedimentación,  $U_{set}$ . Si bien estas clases o tipos se definen arbitrariamente, resultan útiles en relación a los resultados del modelo respecto a situaciones físicas reales.

La clase, A, corresponde a aquellos casos en que  $U_{dep} = U_{set} = 0$ . En realidad se Trata de un caso trivial que corresponde a partículas gaseosas o muy pequeñas (por lo general  $<$ ,  $0.1 \mu\text{m}$  de diámetro. Corresponde a condiciones en que la deposición se puede despreciar.

En la clase B,  $U_{dep} > 0$ ,  $U_{set} = 0$ . Esta clase corresponde a partículas gaseosas o muy pequeñas en las que los efectos de la sedimentación gravitacional son despreciables, pero sin embargo se produce deposición. La deposición podría ser debida en este caso a la absorción sobre la vegetación o suelo, o sobre una masa de agua.

En la clase C,  $U_{dep} = U_{set} > 0$ . En este caso la deposición se debe exclusivamente a la sedimentación gravitacional. Es típico de las partículas de diámetro superior a  $50 \mu\text{m}$ .

En la clase D,  $U_{dep} > U_{set} > 0$ . La deposición se facilita, por ejemplo, por la rugosidad de la superficie, más que por la sedimentación gravitacional, corresponde a partículas de diámetro intermedio, entre  $0.1$  y  $50 \mu\text{m}$ .

En la clase E,  $U_{set} > U_{dep} = 0$ . La velocidad de deposición es menor que la velocidad de sedimentación gravitacional y las partículas depositadas vuelven a la atmósfera, como en una tormenta de polvo.

La ecuación de Ermak se usa ampliamente, pero no carece de críticos. Kar y Damodaran, (2013) han establecido una comparación entre los resultados producidos por este algoritmo y el modelo Atmos. Han establecido que dentro de un radio de 5 a 6 km, las predicciones de ambos modelos coinciden. Pero que a partir de esta distancia, los valores gaussianos son menores que los reales y, por tanto no representan lo que ocurre.

## Bibliografía para el capítulo 5

- Arystanbekova, N.Kh. (2004). Application of Gaussian plume models for air pollution simulation at instantaneous emissions. *Mathematics and Computers in Simulation* 67 (2004) 451–458.
- Crowl, D.A. and Louvar, J.E. (2002). *Chemical Process Safety: Fundamentals with Applications* (3rd Edition) (Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences) 3rd Edition. <https://books.google.es/books?id=ogdmLGMOOrEMC&pg=PT129&lpg=PT129&dq=Chemical+Process+Safety:+Fundamentals+with+Applications+Escrito+por+Daniel+A.+Crowl,+Joseph+F.+Louvar&source=>. Consultado 19 septiembre de 2016.
- Ermak, D.L. (1976). An analytical model for air pollutant transport and deposition from a point source. *Atmospheric Environment* Vol 11, pp 231-237 Pergamon Press 1977.
- Función error | La Guía de Matemática <http://matematica.laguia2000.com/general/funcion-error#ixzz4La15e8IC>
- Guariso, G. (2015). The Gaussian plume model and emission plans (.pptx). <http://home.deib.polimi.it/guariso/>
- de Haan, P., and Rotach, M.W. (1995). A puff-particle dispersion model', *Int. J. Environment and Pollution*, Vol. 5, Nos. 3–6, pp. 350–359.
- Holmes, N.S. and 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):pp. 5902-5928.
- Kar, S. and Damodaran, M. (2013). MODELS FOR ASSESSING AIR POLLUTION IN CITIES. The Eighth Asia-Pacific Conference on Wind Engineering, December 10–14, 2013, Chennai, India
- Ludlow, D. (2001). Toxic release and dispersion models. <https://www.google.es/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&cad=rja&uact=8&ved=0ahUKEwjs94y2obLPAhWJB8AKHVkxBsEQFggeMAA&url=http%3A%2F%2Fweb.mst.edu%2F~dludlow%2Fclasses%2Fche258%2FToxic%2520Release%2520and%2520Dispersion%2520Models>. Consultado 12 de Septiembre de 2016.
- Lushi, E. and Stockie, J.M., (2010). An inverse Gaussian plume approach for estimating atmospheric pollutant emissions from multiple point sources. *Atmospheric Environment* 44 (2010) 1097e1107

- Mandel, A., Stern, E., Ullmann, A., Brauner, N., (2015). Setting threshold values of particle sizes for determination of the appropriate dispersion/deposition model during various atmospheric stability conditions. *Atmospheric Environment* 105 (2015) 181e190
- Nazirah, H. and Halim, A. (2010). ERT 312 Safety & Loss Prevention In Bioprocess [http://portal.unimap.edu.my/portal/page/portal30/Lecturer%20Notes/KEJURUTERAA\\_N\\_BIOPROSES/Semester%201%20Sidang%20Akademik%2020102011/BIOPROCES%20ENGINEERING%20PROGRAMME/TAHUN%203/ERT%20312%20-%20SAFETY%20AND%20LOSS%20PREVENTION](http://portal.unimap.edu.my/portal/page/portal30/Lecturer%20Notes/KEJURUTERAA_N_BIOPROSES/Semester%201%20Sidang%20Akademik%2020102011/BIOPROCES%20ENGINEERING%20PROGRAMME/TAHUN%203/ERT%20312%20-%20SAFETY%20AND%20LOSS%20PREVENTION). Consultado 10 septiembre 2016.
- Smith, R.B. (2008). A K-Theory of Dispersion, Settling and Deposition in the Atmospheric Surface Layer. *Boundary-Layer Meteorol* (2008) 129:371–393, DOI 10.1007/s10546-008-9321-y
- Settles, G.S. (2006). Fluid mechanics and homeland security. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 38:87–110, 2006. Citado en Stockie, J. (2011). The Mathematics of Atmospheric Dispersion Modeling. *SIAM REVIEW* Vol. 53, No. 2, pp. 2.
- Stockie, J. (2011). The Mathematics of Atmospheric Dispersion Modeling. *SIAM REVIEW* Vol. 53, No. 2, pp. 349–372
- Scire, J. (2008). Overview of the Puff-Particle Model (PPM). Presented at: 9th Conference on Air Quality Modeling October 9-10, 2008. [https://www3.epa.gov/scram001/9thmodconf/scire\\_puff-particle\\_model.pdf](https://www3.epa.gov/scram001/9thmodconf/scire_puff-particle_model.pdf)
- Wark, K. and Warner, C.F. (2000). Contaminación del aire. Origen y control. Editorial Limusa.

## Capítulo 6



# 1 Introducción

## 1.1 Sobre el aprendizaje, la teoría y la práctica

En el capítulo 1 ya se ha expuesto la concepción sobre el aprendizaje que orienta este trabajo. Simplemente recordar la prioridad del aprendizaje metacognitivo como objetivo final en la Enseñanza de la Ingeniería, y la reflexión como actitud permanente para el mismo.

De igual modo en los capítulos anteriores se ha intentado justificar la procedencia de considera el modelo gaussiano de dispersión atmosférica, como materia, como contenido estimable para constituir objeto de aprendizaje en el contexto de la Enseñanza de la Ingeniería.

Actualmente resulta inconsistente la distinción entre la teoría y la práctica con carácter general, e igualmente inconsistente la distinción entre aprendizaje con y sin ordenador en el ámbito particular de la Enseñanza de la Ingeniería.

La Ingeniería trata sobre la cosa misma, la realidad física, con la intención de entenderla y dominarla obedeciéndola, para hacer cosas. Este fin implica tener la recta opinión de los fenómenos y contar con la asistencia del número. Ello formula ciertos interrogantes: ¿Administramos siempre unidos el concepto, esa recta opinión platónica, y el número? ¿Persiste la enseñanza por separado de *la teoría* (sea eso lo que sea) y de *los problemas*, e incluso de las *prácticas*? ¿Hay aprendizajes aislados sólo de problemas, sólo de teoría o sólo de prácticas?

En una concepción lineal de la realidad estática, puede. En la concepción sistémica dinámica el aprendizaje es tan global como la realidad que araña.

¿Cómo acercarse a un aprendizaje metacognitivo en el modelo gaussiano de dispersión atmosférica? El camino que se propone en este trabajo es la identificación, identificación, que no simultaneidad de la teoría y los problemas. Una realidad única lleva a un único conocimiento

El conocimiento ingenieril de un fenómeno, de un sistema, se desarrolla en la dialéctica entre la teoría (la recta opinión clásica) y los problemas matemáticos (el número). Los números intentan adaptarse a lo que se describe conceptualmente sobre la cosa misma para generar una imagen de comportamiento manejable, un modelo. Pero la reflexión sobre estos modelos lleva a plantearse nuevas preguntas sobre los conceptos y a una nueva reelaboración de los mismos. No cambia la realidad (el noúmeno) ni lo que de

ella se aprecia (el fenómeno), pero sí la interpretación de lo ya sabido. El concepto muestra su cara matemática, el modelo, y el modelo, abstracto, abre vías del pensamiento que revierten sobre el concepto alumbrando matices nuevos. La capa límite atmosférica parecía inicialmente una capa límite ordenada, y su propio desarrollo matemático (el tamaño necesario de las celdas) indicó que presentaba más complejidad de la supuesta. Hubo que reinterpretar las leyes de pared, porque no deja de tratarse de un fluido. La matemática orienta hacia un camino nuevo, el caos en el sistema, y la percepción de la realidad atmosférica cambia.

La construcción de la ciencia a nivel de especie, no se reproduce en absoluto a nivel de cada sujeto de aprendizaje, pero el individuo sí asume aunque sea por la vía de la intuición de inconsciencia, los mismos cambios de paradigma y con el mismo sustento conceptual que lo hiciera *la academia*.

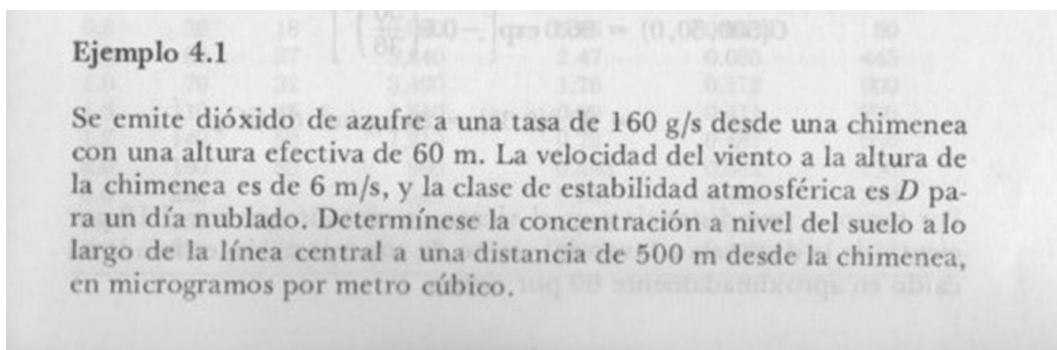
El aprendizaje profundo es constructivista o no es aprendizaje, de igual manera que el aprendizaje es algo estrictamente individual como individual es cada espíritu. ¿Cómo identificar teoría y práctica en un entorno constructivista?

La respuesta que pergeña este trabajo se basa en gran medida en la triada secuencial, modelo, caso y problema.

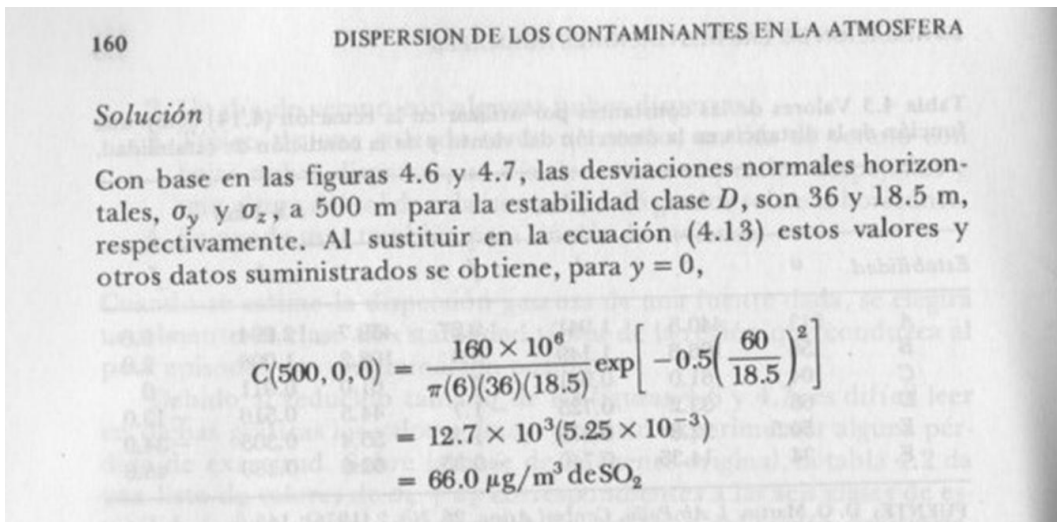
## 2 Modelo, caso y problema

La resolución clásica de los problemas en el ámbito de la docencia, gira en torno al resultado. En ocasiones el resto, *la teoría* puede convertirse en el mero proveedor de algoritmos que, convenientemente encadenados, conducen al resultado.

¿Qué planteamiento docente se utiliza habitualmente para resolver un problema? Veamos como, procede un excelente texto (Wark y Warner, 2000), con un problema sencillo en el capítulo 4, que describe el modelo gaussiano de dispersión atmosférica. El enunciado lo expresa como:



a)



b)

Figura 6.1. a) Facsímil del enunciado de un problema tipo en el texto de Wark and Warner, (2000). b) Resolución y resultado del mismo Wark and Warner, (2000).

Tras referir a unas figuras del texto para obtener gráficamente los parámetros de dispersión, efectúa la sustitución de datos en la ecuación 4.13, y calcula el resultado: 66

$\mu\text{g}/\text{m}^3$ . Es un resultado aritméticamente correcto, pero: ¿Qué aprendizaje extrae el alumno que hace el problema?

O, lo que es lo mismo:  $66 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , ¿Es mucho o poco? ¿Qué información transmite referente al comportamiento del sistema? ¿Repercute positivamente el tiempo invertido en un aprendizaje profundo del alumno?

La respuesta es constante:  $66 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . Es todo lo que hay. Y si se busca la concentración para otra distancia, se repite el problema desde el principio; o sea, se busca en las gráficas (regla y buena vista), se efectúa la sustitución de datos en la ecuación 4.13 del texto, y se repiten los cálculos para obtener otro resultado, por ejemplo,  $113 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , lo cual viene a significar eso:  $113 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

En este trabajo más arriba se ha propuesto la triada secuencial, modelo, caso y problema. ¿Qué significa eso? Veamos la secuencia de entidades aplicada al problema en cuestión.

## 2.1 Modelo, caso y problema

### 2.1.1 El modelo

La ecuación denotada 4.13 en Wark and Warner, es prácticamente la más elemental del modelo gaussiano de dispersión atmosférica. Modeliza la concentración en el suelo en la línea media a sotavento, de una emisión estacionaria e inerte,  $Q$ , con un viento constante en magnitud y dirección,  $v$ , y desde una altura constante,  $H$ .

$$C(x, 0, 0) = \frac{Q}{\pi U \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{H^2}{\sigma_z^2}\right)\right)$$

Esta ecuación es el modelo que se asocia a un sistema con una abstracción conceptual determinada, con unos conceptos que el alumno debe conocer cualitativamente, y que *describen* al propio sistema. A partir de esta conceptualización, el alumno debe identificar no sólo las variables y parámetros que intervienen en el algoritmo sino los términos, monomios y miembros en que se organizan, reconociendo e identificando en cada unidad algorítmica la entidad conceptual que representan.

Como ya se dijo en el capítulo 4, el alumno debe integrar en su aprendizaje que las dispersiones horizontal y vertical,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$ , son función de la distancia a sotavento; que el denominador de la fracción expresa el volumen instantáneo de la unidad temporal de emisión en cada situación, lo que indica que la fracción indica la concentración media del volumen de control conforme se aleja del punto emisor. Finalmente, que la función

exponencial representa la magnitud de la dispersión en sentido vertical conforme se aleja del punto emisor, por lo que es también función de la distancia,  $x$ .

Esta reflexión es relevante y debe ser previa a la resolución del problema, para evitar la sustitución mecánica de los datos en el algoritmo, en ocasiones guiada exclusivamente en *las letras*.

### **2.1.2 El caso**

El caso es la concreción del modelo en un sistema determinado. En este caso una fuente emisora de 160 g/s, a un altura de 60 m, con un viento de 6 m/s. Quedaría como variable independiente la distancia,  $x$ , que determinaría los valores de las dispersiones, que figuran tanto en la fracción, como en la exponencial.

El caso es el salto desde el modelo, abstracto al sistema concreto que se pretende modelizar. Es un salto de lo meramente matemático a la entidad física en la que, por ejemplo, la verosimilitud práctica, física, de los valores atribuidos a los parámetros y las variables tiene una prioridad absoluta sobre la corrección matemática. El algoritmo se ciñe a la realidad y no a la inversa.

### **2.1.3 El problema**

Una vez conocido el modelo y el caso particular que modeliza, encarnado el sistema, el siguiente paso es el problema. Que es una particularidad específica, como es la de conocer la concentración en el suelo a 500 metros de distancia.

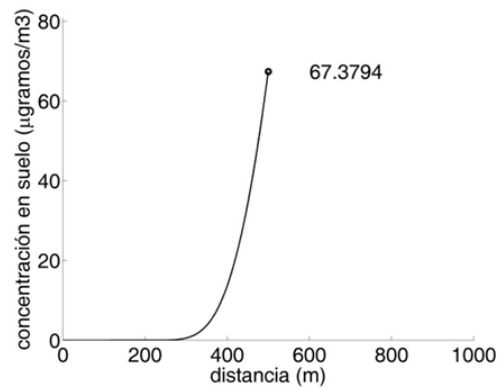
La manera de presentar la solución, es incrustar el problema en el caso, con arreglo al modelo. Esto permite ubicar el problema en el contexto del comportamiento general del caso (sistema concreto) respecto a las variaciones de la variable que desempeña en el caso el papel de variable independiente.

La herramienta que se propone en este trabajo para la realización de esta metodología es el lenguaje Matlab®, R14.

## **2.2 Un ejemplo**

Recurriendo al problema expuesto más arriba, la figura 6.2 muestra la exposición del resultado efectuada por el método tradicional en comparación con la presentación efectuada con el método propuesto.

66.0  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  de  $\text{SO}_2$



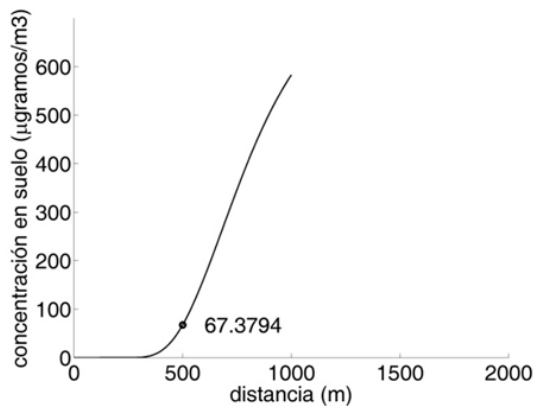
a)

b)

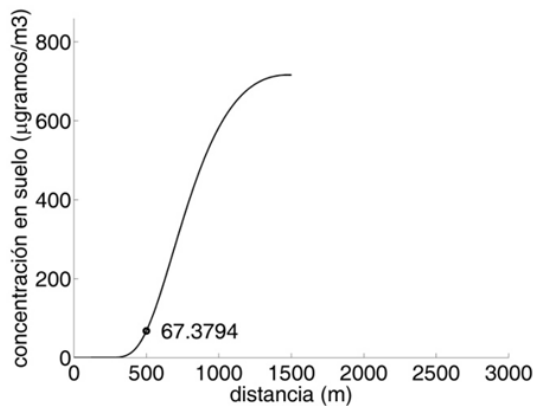
Figura 6.2. Presentación del resultado con el método tradicional y con el método propuesto en este trabajo. La solución del problema se sitúa en el contexto del modelo. Esta imagen facilita mucha más información que un simple dato.

En efecto, con la imagen anterior se tiene información relativa al valor del problema en relación a las distancias menores al foco de emisión. Pero: ¿Se prolonga mucho más el tramo creciente de los valores? ¿Dónde está el máximo (esto permite situar el problema con mayor contenido)? ¿Cómo es el descenso tras el máximo? ¿Abrupto o suave?

Lo pertinente es ir ampliando el rango de la distancia para ir conociendo la forma de la curva, la manera en que varía la concentración en la línea media a sotavento, conforme aumenta esa distancia.



a)



b)

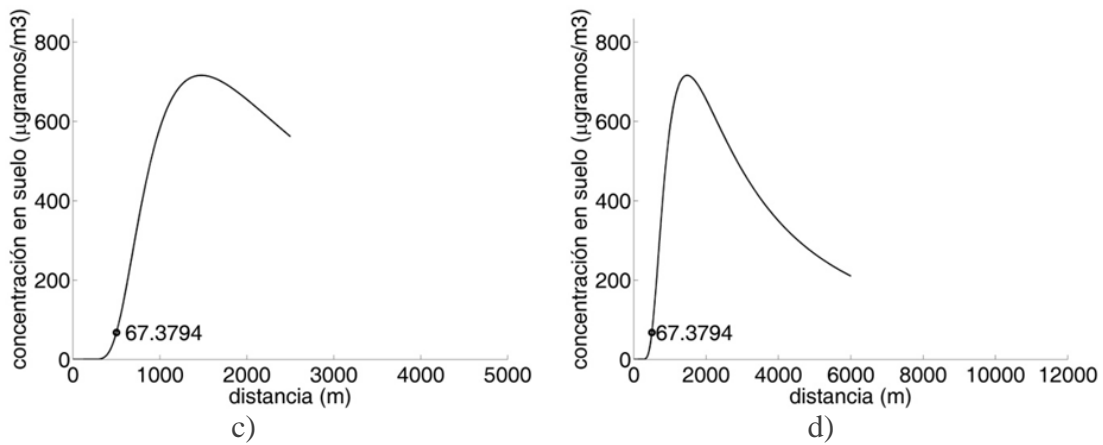


Figura 6.3. Aumento progresivo de la distancia, permitiendo asimilar la evolución de los valores de la concentración con arreglo a la distancia. El valor,  $67.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$  va cobrando entidad. Ahora podemos afirmar que se trata de un valor pequeño

Las cuatro imágenes siguientes, ampliando progresivamente el rango de la distancia para el modelo, permiten dar respuesta a estos interrogantes.

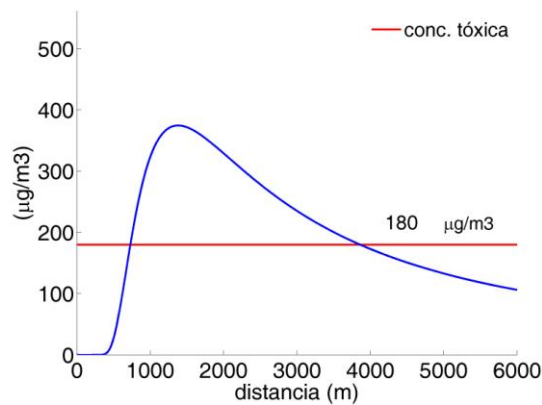


Figura 6.4. Este modo de presentar los resultados permite múltiples aplicaciones complementarias, como en esta figura, en la que el dibujo de la recta que corresponde a una concentración determinada, permite definir con rapidez el rango de distancias que supera esta concentración.

### 3 Sensibilidad de los modelos

Sensu stricto el análisis de sensibilidad de un modelo es “el estudio de cómo la incertidumbre en la salida de un modelo (numérico o no) se puede distribuir a diferentes fuentes de incertidumbre en la entrada del modelo” (Saltelli et al., 2008).

Pero el mismo autor, y en la misma obra, sostiene que “Por otra parte, si se atiende a la literatura disponible, 'sensibilidades' en muchos casos se entienden como derivados de una salida determinada frente a una entrada en particular (como las elasticidades de la economía)”. Añade que junto a la tendencia a examinar las incertidumbres generadas en el entorno de un valor determinado de un parámetro del modelo, coexiste la tendencia de considerar la influencia de todo el rango de valores de entrada. La segunda opción es la que se aplica en este trabajo.

Pero en un sentido amplio, un análisis de sensibilidad consiste en investigar el efecto que tiene sobre el comportamiento de un modelo la variación aislada en rangos posibles o reales de los parámetros y variables que lo configuran. Viene a sugerir que la sensibilidad del modelo frente al parámetro guarda correspondencia con la sensibilidad del sistema al mismo parámetro.

Es una actuación que debe calibrarse cuidadosa y reflexivamente porque la sensibilidad a un parámetro está condicionada también a los valores de los demás parámetros. Igualmente hay que tener presente es que si el modelo es muy sensible a un parámetro pero este parámetro oscila en un rango muy pequeño, esta sensibilidad no es determinante.

El análisis de sensibilidad de un modelo es el mejor método para explorar su funcionamiento y estar en disposición de un aprendizaje profundo en la medida que el modelo deja de ser un algoritmo para el alumno para convertirse en una representación funcional, más o menos simbólica, más o menos simuladora, del sistema.

Este aprendizaje profundo es la antesala para un aprendizaje metacognitivo que permita, no sólo aprovechar el rendimiento del modelo en su configuración actual, sino estar capacitado para modificarlo o aplicarlo a nuevas situaciones.



## 4 Manejo de los modelos en Matlab

Para proceder al análisis de sensibilidad es preciso previamente conocer el manejo de los modelos en Matlab. En el capítulo 4 se ha expuesto el itinerario constructivista que permite asumir en los modelos, en las ecuaciones, la carga conceptual de los sistemas. En este apartado del capítulo 6, se procede a la exposición del modo de implementar las ecuaciones ya conocidas en Matlab.

Como ejemplo se va a proceder con la ecuación más sencilla, la ya utilizada en el problema anteriormente resuelto:

$$C(x, 0, 0) = \frac{Q}{\pi U \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{H^2}{\sigma_z^2}\right)\right)$$

En donde:

- $Q$  es la emisión (g/s)
- $U$  es la velocidad del viento (m/s)
- $\sigma_y$  es la dispersión lateral (m)
- $\sigma_z$  es la dispersión vertical (m)
- $H$  es la altura efectiva de la emisión (m)

La variable independiente  $x$  está presente del modo:

$$\begin{aligned}\sigma_y &= f_1(x) \\ \sigma_z &= f_2(x)\end{aligned}$$

Y los semantemas del algoritmo son:

$Q$  la emisión por unidad de tiempo

$\frac{Q}{\pi U \sigma_y \sigma_z}$  concentración media del volumen de control

$\exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{H^2}{\sigma_z^2}\right)\right)$  factor de dispersión vertical

Y su expresión en Matlab

$$\begin{aligned}Q &= Q \\ Q ./ (\pi .* U .* \sigma_y .* \sigma_z) &= \frac{Q}{\pi U \sigma_y \sigma_z} \\ \exp(-1/2 .* (H.^2 ./ \sigma_z.^2)) &= \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{H^2}{\sigma_z^2}\right)\right)\end{aligned}$$

De modo que la ecuación queda:

$$C(x,0,0) = Q / (\pi * U * \sigma_y * \sigma_z) * \exp(-1/2 * (H.^2 / \sigma_z.^2))$$

Y como los  $\sigma$  pueden expresarse como funciones de  $x$ , de acuerdo con unos parámetros, agrupados según la estabilidad atmosférica, como por ejemplo, en este caso, con unos valores de  $F$ :

$$D = [0.128, 0.905, .20, 0.76 ]$$

$$\sigma_y = D(1) * x.^{D(2)}$$

$$\sigma_z = D(3) * x.^{D(4)}$$

Con lo que el script de Matlab es ya:

$$D = [0.128, 0.905, .20, 0.76 ]$$

$$\sigma_y = D(1) * x.^{D(2)}$$

$$\sigma_z = D(3) * x.^{D(4)}$$

$$C(x,0,0) = Q / (\pi * U * \sigma_y * \sigma_z) * \exp(-1/2 * (H.^2 / \sigma_z.^2))$$

Se define el intervalo de  $x$  en que se quiere desarrollar el modelo, de modo que sea desde el pie de la emisión hasta  $x_{\max}$ . Y consideramos que determinar 1000 veces el modelo en ese intervalo es suficiente.

$$n=1000$$

$$x = \text{linspace}(0, x_{\max}, n)$$

Con lo que el programa queda:

$$n=1000$$

$$x = \text{linspace}(0, x_{\max}, n)$$

$$D = [0.128, 0.905, .20, 0.76 ]$$

$$\sigma_y = D(1) * x.^{D(2)}$$

$$\sigma_z = D(3) * x.^{D(4)}$$

$$C(x,0,0) = Q / (\pi * U * \sigma_y * \sigma_z) * \exp(-1/2 * (H.^2 / \sigma_z.^2))$$

Y teniendo en cuenta que hay que incluir los datos y parámetros:

$$Q = 160 * 1e6 \quad \% \text{ emisión } (\mu\text{g/s})$$

$$U = 4 \quad \% \text{ velocidad del viento (m/s)}$$

$$H = 60 \quad \% \text{ altura del emisor (m)}$$

El programa completo queda:

```

Q =160*1e6    % emisión (μg/s)
U = 6         % velocidad del viento (m/s)
H = 60        % altura del emisor (m)n=1000
x_max=10
x=linspace(0,max,n)
D =[0.128, 0.905, .20, 0.76 ]
sigma_y = D(1).* x.^ D(2)
sigma_z = D(3).* x.^ D(4)
C(x,0,0) = Q./(pi.*U.* sigma_y.* sigma_z).* exp(-1/2.*(H.^2./ sigma_z.^2))
plot(x,C(x,0,0))

```

En donde,  $\text{plot}(x,C(x,0,0))$ , es el comando que construye la figura. A este programa (o *script*) se le puede añadir una rutina para configurar las imágenes, exportarlas, etc. Estas rutinas se copian y pegan porque no constituyen materia de interés y hay que evitar que desplacen el tiempo y la atención del alumno. Son elementos operativos sin contenido.

Reparando en el programa, advertimos que hay tres datos, Q, U, H, que pueden variar manteniendo inalterable el resto. Esto es, son parámetros respecto a los que cabe explorar la sensibilidad del modelo. ¿Cómo modifica el resultado la variación de la altura, de la tasa de emisión o del viento? ¿Qué repercusión tiene en el diseño de la emisión y en la determinación de las condiciones meteorológicas que puedan condicionar sus periodos de funcionamiento?

El poder maniobrar con el modelo observando la representación gráfica del resultado facilita adquirir la intuición fenomenológica derivada de la experiencia que lleva a la capacidad de innovación metacognitiva,

A continuación se desarrolla el análisis de sensibilidad del modelo de la ecuación inicial, cuya transcripción a Matlab ya hemos visto, respecto a las variaciones de la tasa de emisión, la velocidad del viento y la altura del punto de emisión.

# 5 Ejemplo de análisis de sensibilidad

## 5.1 Sensibilidad respecto a la velocidad del viento

Es cierto que a la vista de la ecuación, se puede vaticinar que en un mismo punto, la variación de la concentración en función de la velocidad del viento es lineal. Y que en puridad no es defendible que variaciones acusadas del viento no modifican los coeficientes de dispersión es un ejercicio para apreciar la facilidad para realizar este tipo de análisis. A nivel práctico, se trata de determinar los límites meteorológicos para el funcionamiento de la emisión con determinadas tasa y altura.

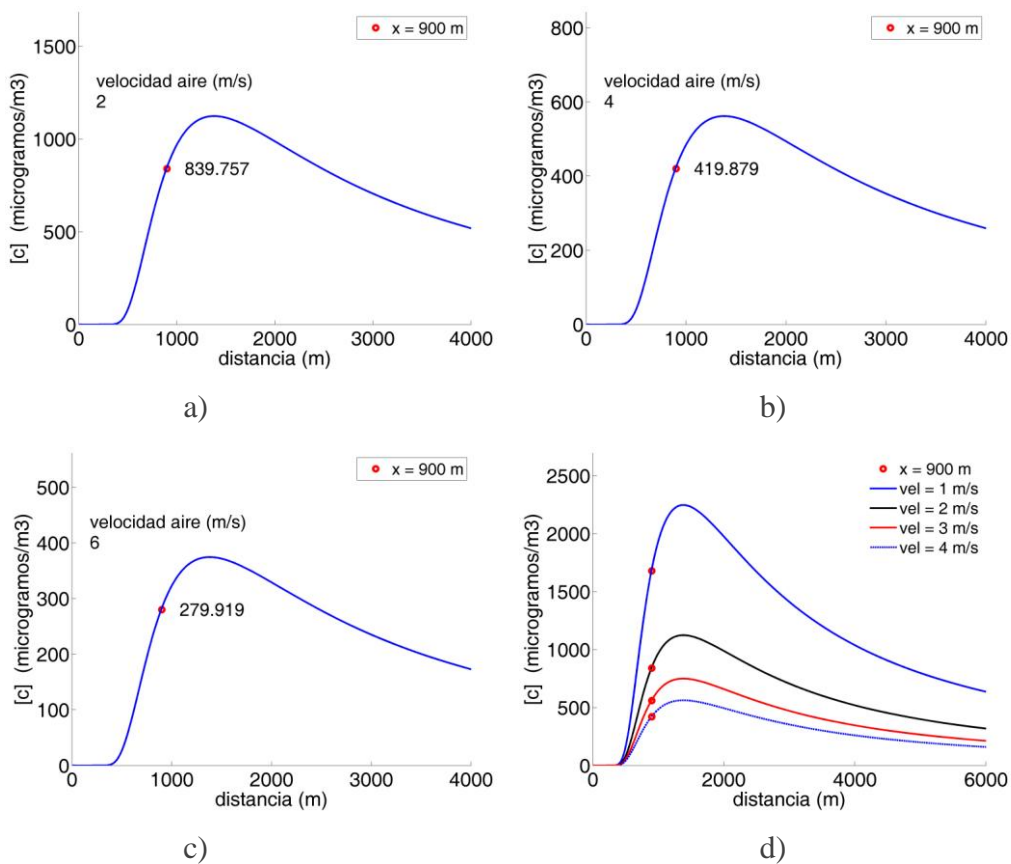


Figura 6.5. Respuesta del modelo a la variación de la velocidad del viento manteniendo constante la tasa de emisión y la altura eficaz de emisión. a) b) y c) Gráficas de las concentraciones con 2, 4 y 6 m/s de velocidad del viento. d) Gráficas superpuestas.

El punto a 900 metros de distancia es una referencia para apreciar mejor el carácter lineal de la respuesta.

## 5.2 Sensibilidad respecto a la altura de emisión

La respuesta de la concentración a la variación de la altura eficaz de emisión sí se beneficia de este método porque su variación no es lineal, al formar parte este parámetro (elevado al cuadrado) de la función exponencial que define la magnitud de la dispersión vertical al alejarse de la fuente de emisión.

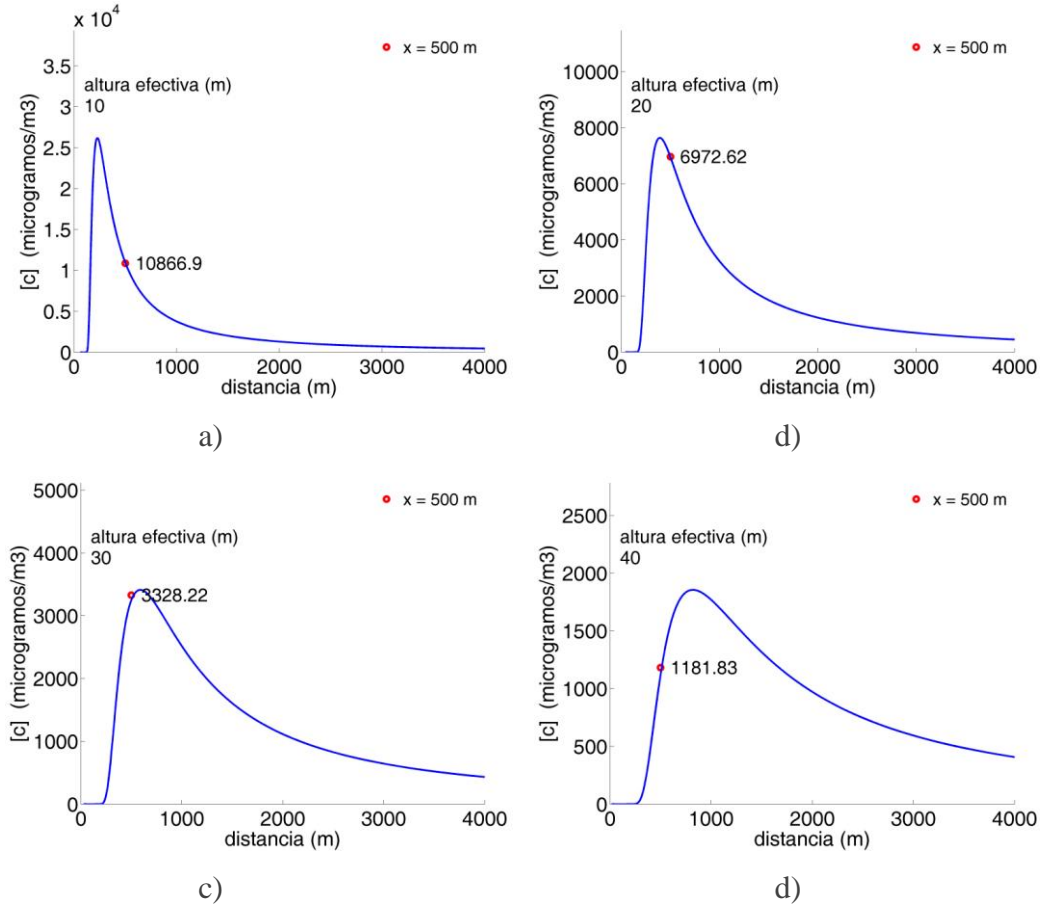


Figura 6.6. Respuesta del modelo a la variación de la altura efectiva manteniendo constante la tasa de emisión y la velocidad del viento. a), b), c) y d) Gráficas de las concentraciones con 10, 20, 30 y 40 metros de altura efectiva.

Siendo la altura efectiva, al menos en parte, previsible en la emisión, su sensibilidad tiene interés ingenieril porque, a la vista de las gráficas, se hace visible su repercusión exponencial.

La medida de modificar la altura para disminuir las concentraciones en las zonas próximas a la emisión, supone la extensión del penacho a distancias más grandes, aunque con menor concentración. Debería efectuarse una valoración bidimensional con arreglo a concentraciones frontera.

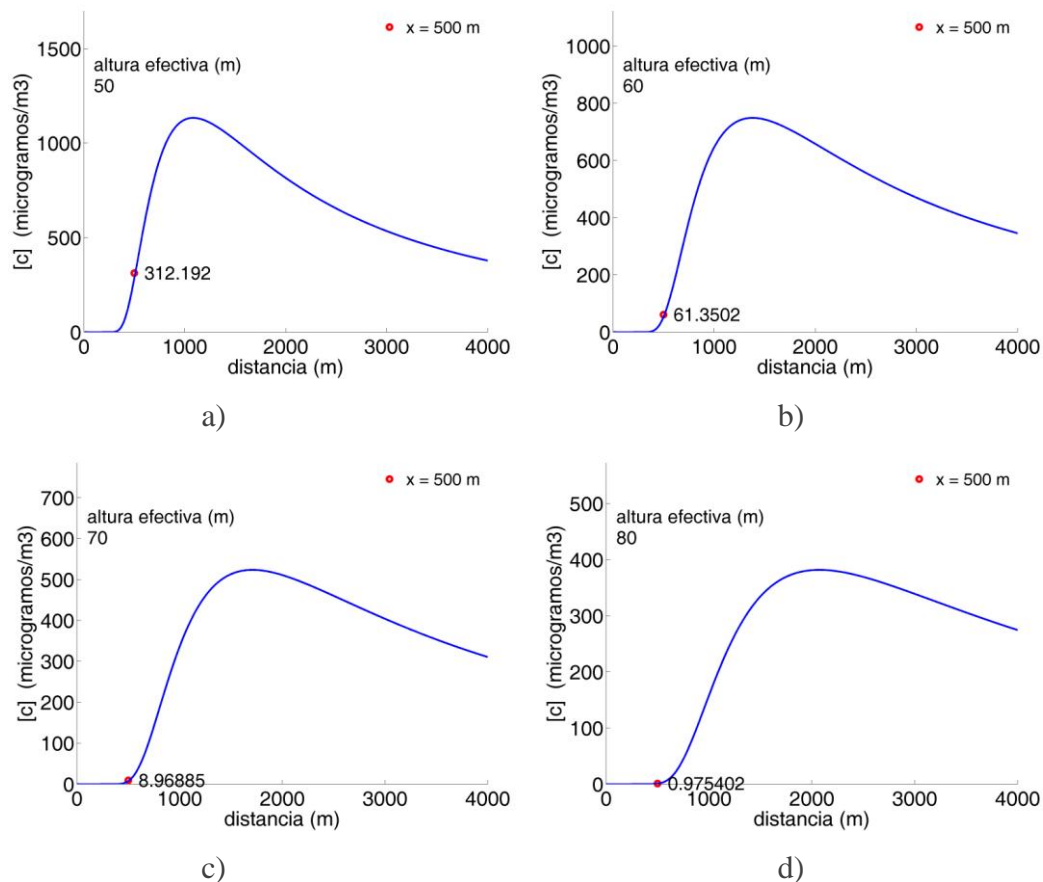


Figura 6.7. a), b) c) y d). Respuesta del modelo a la variación de la altura efectiva manteniendo constante la tasa de emisión y la velocidad del viento. Es evidente que la concentración próxima experimenta una acusada disminución, pero a expensas de la extensión del penacho.

Retomando las palabras de Saltelli, citado al comienzo del capítulo, es frecuente que el análisis de sensibilidad de un parámetro aislado resulte insuficiente. Efectivamente cuando un sistema es más complejo, cuando es, valga la redundancia, sistémico, las interacciones entre parámetros cobran especial relevancia.

Ello obliga a recurrir a las superficies de respuesta, analizando simultáneamente la repercusión en la concentración de las variaciones de dos parámetros. A este fin, el manejo de los modelos, de las ecuaciones, exige determinadas actuaciones en Matlab.

## 6 Análisis de sensibilidad simultánea de dos parámetros

En el caso de la ecuación elemental, hay tres parámetros a considerar. El parámetro viento no admite actuación ingenieril salvo la de la decisión de detener o no las emisiones según el estado del atmósfera. Sin embargo, tanto la tasa de emisión como la altura eficaz dependen del diseño de la emisión.

Lo pertinente, por tanto, es considera la superficie de respuesta de la concentración en función de la tasa de emisión y de la altura eficaz, considerando el viento como constante. Por otro lado, estas superficies de respuesta representan las concentraciones en puntos determinados, o puntos críticos. La elección de estos puntos para valorar la actuación ingenieril en el diseño es de suma importancia.

La función elemental queda convertida en una función con dos variables independientes, tasa y altura eficaz.

$$\text{concentración} = f(\text{tasa\_emision}, \text{altura\_eficaz}),$$

convirtiéndose la distancia y el viento en constantes.

La primera actuación es la de mallar el plano definido por las dos variables independientes, lo que en Matlab se lleva acabo definiendo primero las variable por separado para luego concatenarlas entre sí.

$$n = 1000$$

$$\text{tasa\_emision} = \text{linspace}(\text{tasa\_min}, \text{tasa\_max}, n)$$

$$\text{altura\_eficaz} = \text{linspace}(\text{altura\_min}, \text{altura\_max}, n)$$

$$[\text{tasa\_emision}, \text{altura\_eficaz}] = \text{meshgrid}(\text{tasa\_emision}, \text{altura\_eficaz});$$

donde  $n$  es el grado de discretización de las variables independientes y que, por tanto, va a configurar la discretización del mallado del plano definido por ambas variables.

Esta modificación es relevante conceptualmente porque exige el criterio ingenieril de determinar los valores máximo y mínimo que haya que considerar en ambas variables. Los añadidos al programa relativos a la configuración de los gráficos, es meramente operacional y se añade como una rutina que no merece la pena considerar.

El programa final, queda estructurado de la siguiente manera, :

```

x = constante_x (m)           % dato
U = constante_U (m/s)        % dato
D = [0.128, 0.905, .20, 0.76 ]
sigma_y = D(1).* x.^ D(2)
sigma_z = D(3).* x.^ D(4)
n = 1000
tasa_emision = linspace(tasa_min,tasa_max,n)
altura_eficaz = linspace(altura_min,altura_max 0,n)
[tasa_emision,altura_eficaz]= meshgrid(tasa_emision,altura_eficaz)
C = tasa_emision./(pi.*U.*sigma_y.*sigma_z)...
.*exp(-1/2.*(altura_eficaz.^2./sigma_z.^2))

```

La representación gráfica puede ser en forma de superficie de respuesta, pero el grafismo realmente útil es el de curvas de nivel de las isopletras.

Se efectúan comparaciones considerando como constante fija la distancia, o como constante el viento, para apreciar la influencia que tienen todos los parámetros y variables. Se advierte la complejidad pese a la sencillez de la ecuación elemental.

### 6.1 Distancia constante, viento como parámetro

Analiza la influencia global del parámetro que es absolutamente externo, el viento.

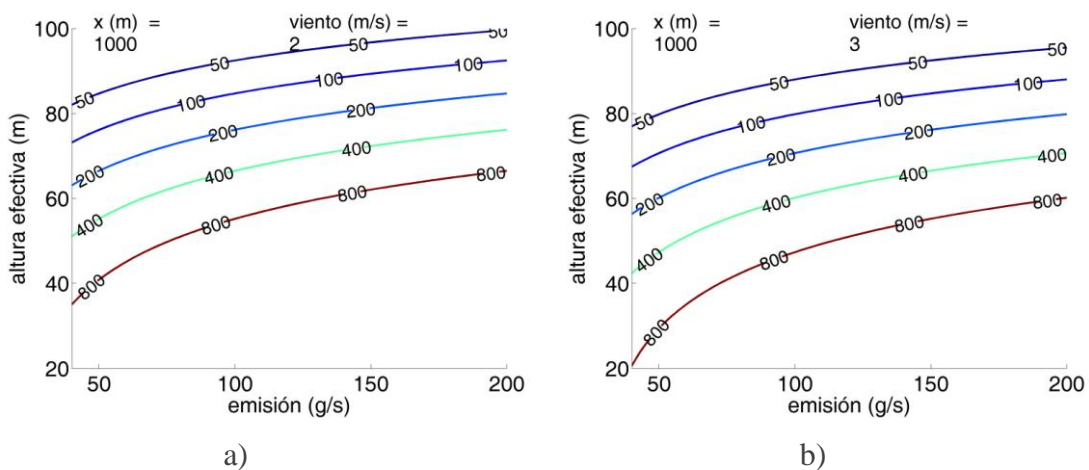


Figura 6.8. Curvas de nivel de la concentración a 1000 metros de la emisión. a) Velocidad del viento de 2 m/s. b) Velocidad de 3 m/s.



El cambio es importante porque de 2 a 3 m/s, el incremento relativo es acusado.

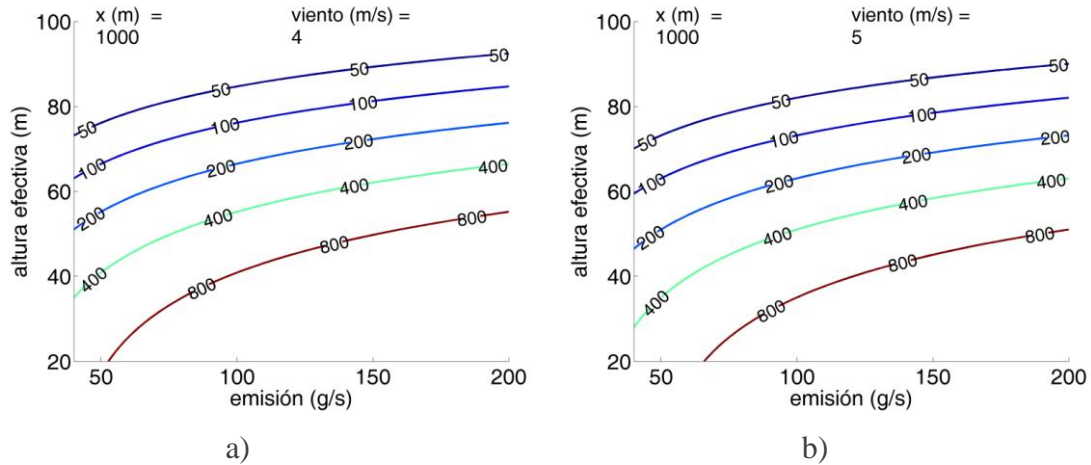


Figura 6.9. Curvas de nivel de la concentración a 1000 metros de la emisión. a) Velocidad del viento de 4m/s. b) Velocidad de 5 m/s. La diferencia es menos acusada porque la variación relativa de velocidad es menor.

## 6.2 Viento constante, distancia como parámetro

En este caso se considera una velocidad del viento relativamente alta, 6 m/s.

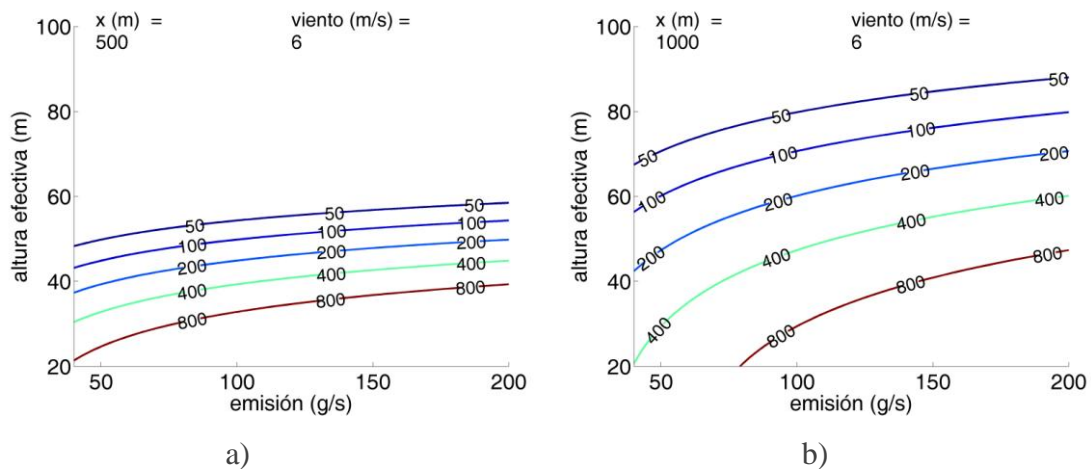


Figura 6.10. Curvas de nivel de la concentración, con una velocidad del viento de 6 m/s. a) A 500 metros de distancia. b) A 1000 metros de distancia.

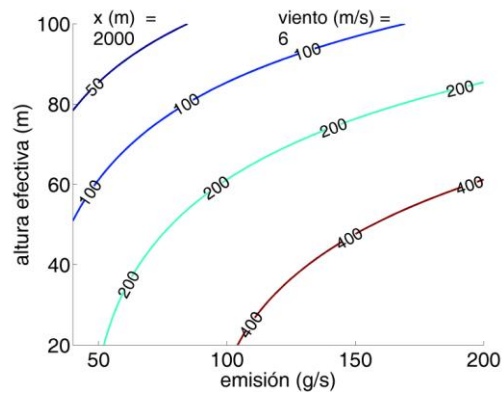


Figura 6.11. Curvas de nivel de la concentración, con una velocidad del viento de 6 m/s. a una distancia de 2000 metros. Se aprecia claramente la dispersión en relación a las imágenes anteriores.

Además de la utilidad específica para el aprendizaje del modelo gaussiano de dispersión, está la adquisición de la competencia transversal de acometer las representaciones funcionales en tres dimensiones, y asociarlas con las curvas de nivel, como herramienta habitual del alumno.

## 7 Representaciones tridimensionales

En la primera parte del capítulo se ha utilizado Matlab para un ejercicio de sensibilidad con una función al fin y al cabo con una única variable independiente, sea la distancia, la altura, o el viento.

Incluso se ha desarrollado una función de dos variables independientes, para lo que se ha definido y mallado el plano generado por ambas variables.

Pero a partir de este momento, las ecuaciones a representar o son más complejas, o van acompañadas por otras funciones. Y todavía hay un paso más, que es cuando en lugar de introducir secuencialmente las funciones en un mismo script, se sitúan en scripts externos para no configurar programas muy extensos. Al fin y al cabo es como se estructuran los programas *grandes*.

Para las funciones un poco más complicadas, el procedimiento es siempre el mismo. En primer lugar, identificar los conceptos más simples y la sintaxis matemática que los liga para configurar las expresiones más complejas. Y acto seguido, transponer este algoritmo al lenguaje Matlab.

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

Figura 6.12. Las expresiones complejas se analizan con arreglo a lo visto en el capítulo 4. Y sólo entonces se traducen a Matlab.

Es relevante insistir en que Matlab no constituye objeto de aprendizaje. Matlab es simplemente una herramienta para el fin del aprendizaje del modelo gaussiano de dispersión. Lo que ocurre es que en esta propuesta se intenta que el hecho de operar con un lenguaje no desvincule las operaciones matemáticas del contenido conceptual, de modo que el uso de los scripts, recordemos que se recorren secuencialmente para introducir los datos, refuerce el hilo conceptual.

La identificación del algoritmo ordinario con el concepto, y la translación de esta identidad a Matlab es esencial para que, más adelante, el alumno sienta y lleve a cabo la opción de modificar o explorar las posibilidades de los modelos.

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

C\_x\_y\_z=

```
emision./(2*pi.*dispersion_y.*dispersion_z.*velocidad_viento_altura)...
.*exp(-(distancia_linea_central.^2./2./dispersion_y.^2))...
.*(exp(-((z-altura_efectiva).^2./2./dispersion_z.^2))...
+ exp(-((z+altura_efectiva).^2./2./dispersion_z.^2))).*1e6;
```

Figura 6.13. La transcripción a Matlab debe corresponderse exactamente con la biunivocidad entre conceptos y algoritmos. Todo elemento semántico en Matlab debe tener su correlato conceptual.

Para descargar los programas de líneas accesorias y que le argumento capital no se enmascare, se elaboran rutinas o funciones realicen cálculos y determinaciones, como por ejemplo las dispersiones, de modo que desde el script *se llama* a esta función externa, que recibe los datos y proporciona los resultados.

```
% Se indica la estabilidad climatológica según Martin.
estabilidad=4
% Se inidica si se trata de medio rural o urbano.
medio=1
% Se calculan las dispersiones en el eje y y el eje z , y el parámetro p
% para el cálculo exponencial de la velocidad con arreglo a los
% algoritmos de Briggs, en un programa externo que hemos elaborado
% y llamado disperbrig.
%
[dispersion_y,dispersion_z,p] = disperbrig(medio,estabilidad, x);
%
```

Figura 6.14. Como ejemplo, de cómo simplificar los scripts para no enmarañarlos, en la figura se observa como al introducir los valores de la variable x, la estabilidad y la tipología del terreno, la función que hemos elaborado y llamado disperbrig, proporciona el valor del exponente, p, y las dispersiones horizontal y vertical para todos los puntos.

Las funciones externas que se asocian a las ecuaciones, son a su vez scripts que el alumno debe conocer, porque no son sino trasuntos de cálculos que obedecen a demandas conceptuales, y no pueden constituir cajas negras.

## 8 Reflejo en el suelo y en la capa de inversión

En el capítulo 4 se han expuesto las ecuaciones correspondientes al caso en que el agente disperso es reflejado por el suelo, como si rebotara. Conceptualmente no presenta problema alguno; pero no es fácil imaginar, visualizar cómo quedan las concentraciones tanto en superficie como en la atmósfera con esta reflexión en comparación con que no la haya. Mediante el uso de Matlab, es posible representar estas ecuaciones con determinados parámetros.

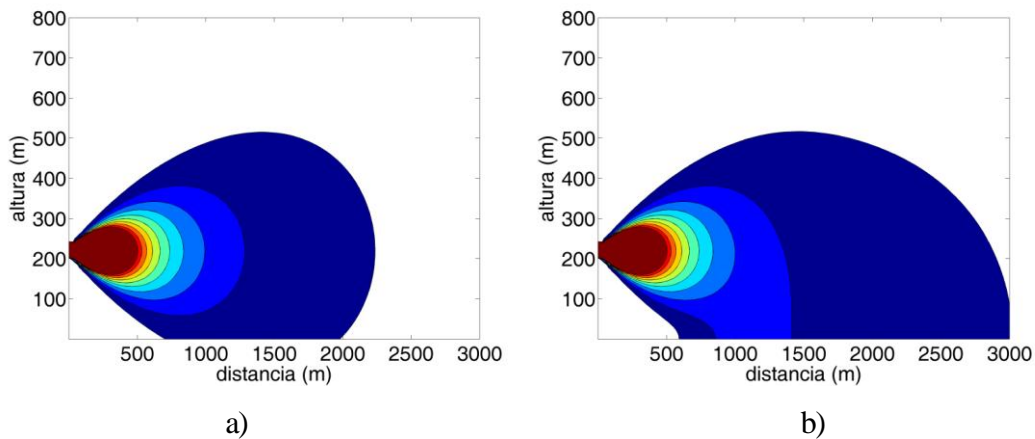


Figura 6.15. Sección en el plano X0Z del penacho gaussiano. a) Cuando no hay reflexión en el suelo ni capa de inversión que detenga la ascensión. b) Cuando hay reflexión en el suelo. En este caso es total, pero puede ser parcial según el agente disperso y el terreno.

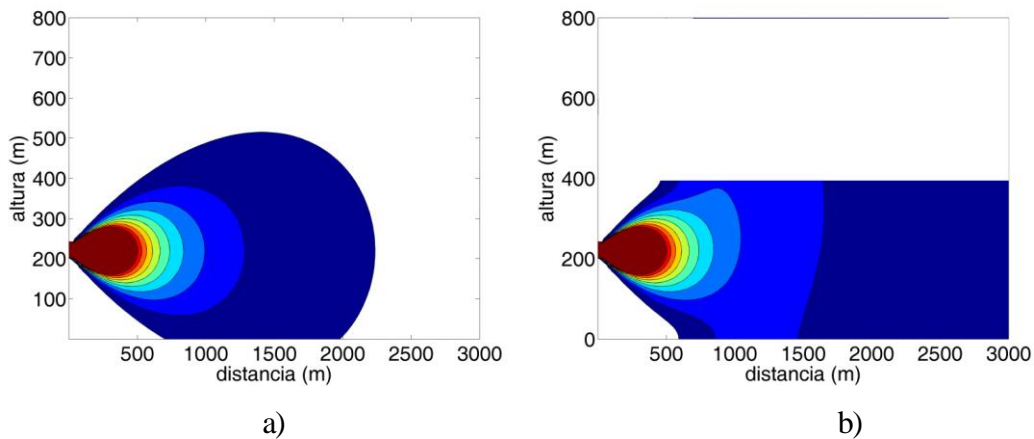


Figura 6.16. Sección en el plano X0Z del penacho gaussiano. a) Cuando no hay reflexión en el suelo ni capa de inversión que detenga la ascensión. b) Cuando hay reflexión en el suelo y rebote total por capa de inversión a 400 m...

En las tres simulaciones de las figuras 63.1 y 63.2 se han utilizado los mismos parámetros de emisión, y de estabilidad atmosférica. Se ha mantenido una proporción entre las escalas de los ejes, que *abomba* los penachos, para reforzar visualmente el concepto.

Analizando las imágenes se aprecia que en el caso de la reflexión total en el suelo, los valores en la cercanía del suelo son mayores que en el caso sin reflexión, y además se extienden a bastante más distancia. Y en el caso de la capa de inversión junto a la reflexión en el suelo, el resultado es que el estrato entre el suelo y la capa presenta unas concentraciones bastante más elevadas que en los otros casos. El espacio en cuestión aparece como *lleno*.

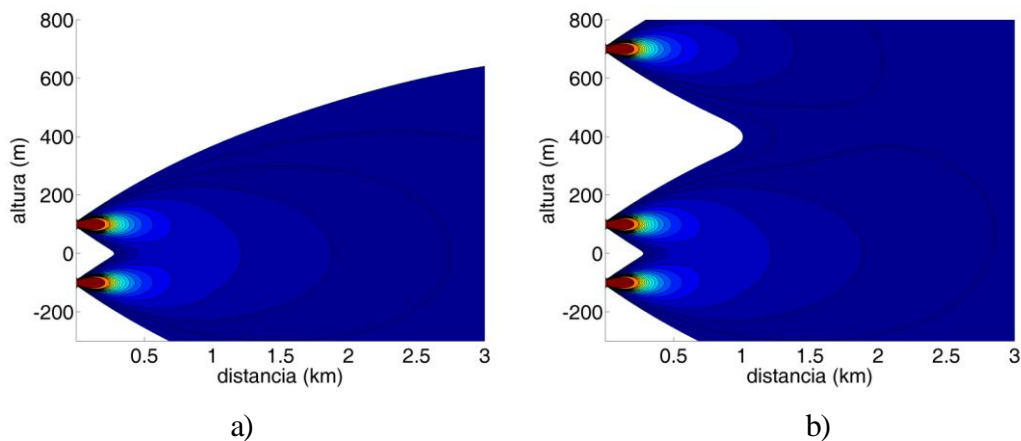


Figura 6.17. a) Altura de emisión de 100 m. Reflexión total. El foco emisor virtual está situado a menos 100 metros, simétrico con la cota cero (-H). b) Altura de emisión 100 m. y capa de inversión a 400 m. El foco virtual de la capa de inversión está en la cota  $400 + 400 - 100$ , o, lo que es lo mismo,  $(2L-H)$ .

En interés de estas simulaciones radica en que la realidad presenta grados de absorción muy diversos y en este sentido los terrenos son heterogéneos. De igual modo las capas de inversión no son estáticas ni totalmente impermeables, y su grado de permeabilidad no es constante ni homogéneo. En ese sentido los modelos más elaborados proceden describiendo las irregularidades en ambos sentidos. El procedimiento es configurar la variable  $z$  no como un continuo ordenado, sino como una función polinomial de  $x$  e  $y$  que describe la morfología del terreno.

Para completar la casuística, se efectúan unas simulaciones con diversos grados de permeabilidad de la capa de inversión.

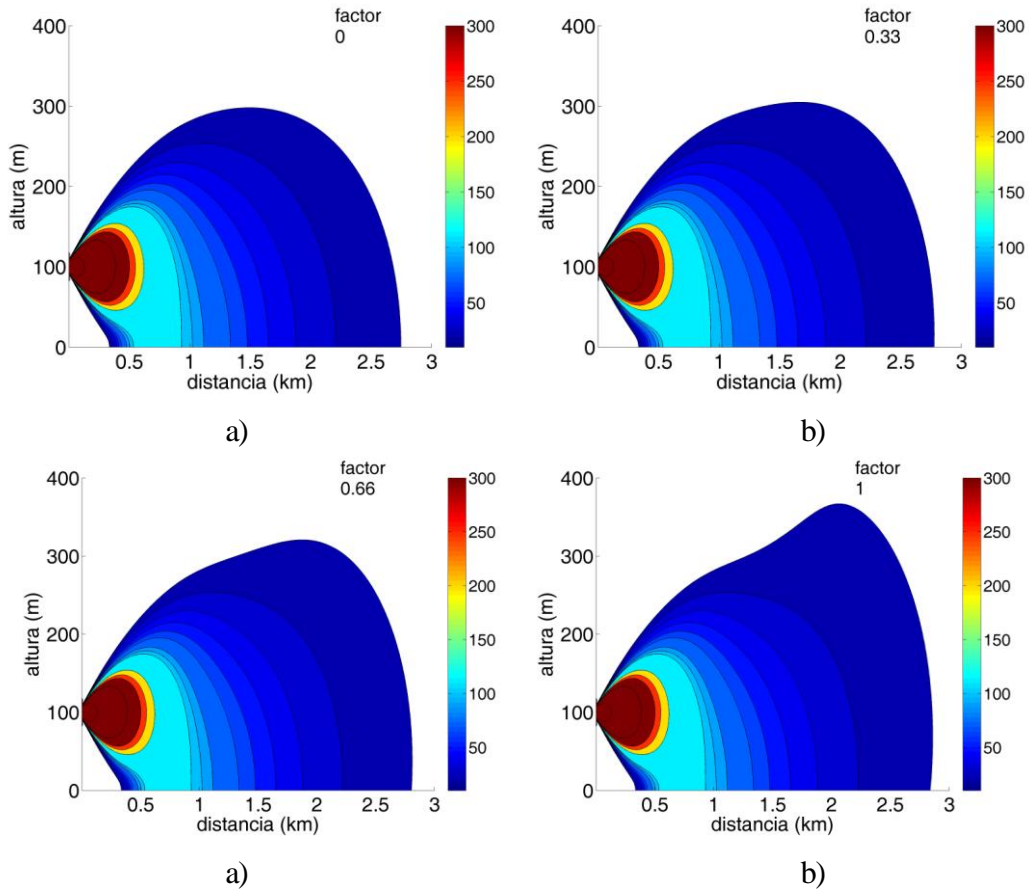


Figura 6.18. Concentraciones en el plano X0Z según el coeficiente de rechazo de n la capa de inversión. a) Coeficiente cero, no hay rebote. b) Coeficiente 0.33. c) Coeficiente 0.66. d) Coeficiente 1, la opacidad es total. La altura de la capa de inversión es de 400 m. Se mantiene una reflexión del suelo total.

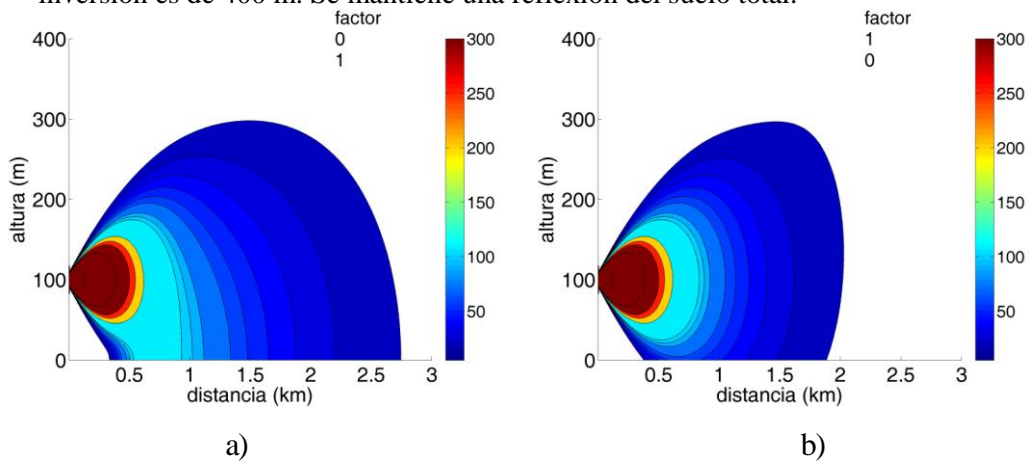
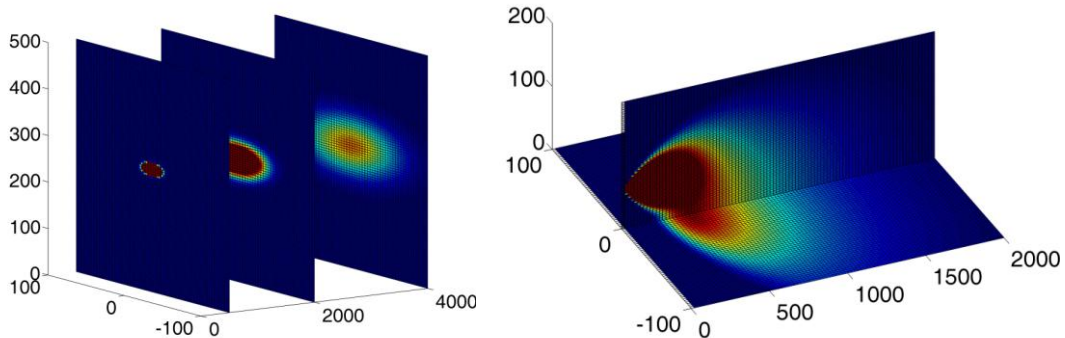


Figura 6.19. Concentraciones en el plano X0Z según el coeficiente de rechazo de n la capa de inversión y reflexión del suelo. a) Inversión inexistente, reflexión total. b) Capa de inversión opaca y reflexión nula.

## 9 Otras opciones gráficas

Se ha citado la dificultad para la visualización tridimensional, de forma que los alumnos encuentran dificultades para concebir la corporeidad de los penachos de dispersión atmosférica.

La especial naturaleza de los penachos, aconseja la representación de los penachos con un criterio cuatridimensional, o 4D a partir de ahora. Las cuatro dimensiones están constituidas por las tres espaciales (x,y,z) y la cromática, de modo que es posible representar el penacho (el modelo del penacho) en su aspecto real.



### Bibliografía para el capítulo 6

Los scripts utilizados en este capítulo y en los demás, se han elaborado para este TFM. Muchos de ellos, sin duda, están inspirados o basados en programas ya publicados. Sin embargo, todos ellos están especialmente diseñados o adaptados para un aprendizaje en que Matlab sea sólo la herramienta. En este sentido son más sencillos y asequibles, más *blandos*, que aquellos ya establecidos. Las fuentes utilizadas son:



- Bien, H. (2009). Gaussianplume. <https://es.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/13279-gaussianplume>. Consultada 20 Septiembre 2016.
- Connelly, P. (2014). Computer Practical: Gaussian Plume Model. [http://personalpages.manchester.ac.uk/staff/paul.connolly/teaching/practicals/gaussian\\_plume\\_modelling.html](http://personalpages.manchester.ac.uk/staff/paul.connolly/teaching/practicals/gaussian_plume_modelling.html)
- Holzbecher, E.( 2007 ). Environmental Modeling using MATLAB®, Springer
- Saltelli, A., Ratto, M., Andres, T., Campolongo, F., Cariboni, J. atelli, D. Saisana, M. and Tarantola, S. (2008).Global Sensitivity Analysis. The Primer. John Wiley & Sons Ltd.
- Stockie, J. (2011). The Mathematics of Atmospheric Dispersion Modelling.Siam Review.Vol. 53, No. 2, pp. 349–372.

## Capítulo 7

# 1 Ecuación de Ermak

En este trabajo las simulaciones relativas a las partículas se efectúan con la ecuación de Ermak, ya conocida.

El programa consta, al margen de las rutinas operacionales y no conceptuales (características de las figuras, pasos previos, etc) de:

La parte común a las simulaciones con las ecuaciones del modelo gaussiano de dispersión, compuesta por los datos y parámetros fijos, la definición de los rangos y discretización del espacio, y los cálculo de las dispersiones horizontal y vertical.

La parte propia de la ecuación de Ermak, compuesta por tres partes.

La primera parte contiene la definición de cálculo de la velocidad de sedimentación, con la simplificación de considerar válida la aplicación de la ley de Stokes, el valor de la velocidad de deposición (se determina de manera experimental, careciendo de expresión analítica y sin que se hayan establecido correlaciones). Y con ambas, la velocidad interna,  $w_0$ .

La segunda parte es la expresión del cálculo del coeficiente de difusividad turbulenta,  $K_z$ , utilizando las mismas constantes que para el cálculo de las dispersiones horizontal y vertical.

La tercera está constituida por la propia ecuación de Ermak.

El núcleo del programa, queda pues como:

```
% velocidades específicas
Wdep = dato
Wset = 2*rho*grav*R^2 / (9*mu)
Wo = Wdep - 0.5*Wset;
% difusividad turbulenta
Kz = 0.5*D(3)*D(4)*U*abs(x).^(D(4)-1) .* (x > 0);
% ecuación de Ermak
C = Q ./ (2*pi*U*sigma_y.*sigma_z) .* exp( -0.5*y.^2./sigma_y.^2 ) .* ...
    exp( -0.5*Wset*(z-H)./Kz - Wset^2*sigma_z.^2/8./Kz.^2 ) .* ...
    ( exp( -0.5*(z-H).^2./sigma_z.^2 ) + ...
    exp( -0.5*(z+H).^2./sigma_z.^2 ) - sqrt(2*pi)*Wo*sigma_z./Kz .* ...
    exp( Wo*(z+H)./Kz + 0.5*Wo^2*sigma_z.^2./Kz.^2 ) .* ...
    erfc( Wo*sigma_z/sqrt(2)./Kz + (z+H)./sqrt(2)./sigma_z ) ) * 1e6;
```

En donde realmente, salvo algunos elementos ya vistos, no es fácil asociar con exactitud concepto y algoritmo.

Las simulaciones con la ecuación de Ermak, que se presentan en este trabajo, pretenden fundamentalmente visualizar la tipología que estableció el propio Ermak relativa a las posibles combinaciones entre los valores de la velocidad de sedimentación y la velocidad de deposición. Tipología que comprende cinco opciones:

1. Velocidad de deposición y velocidad de sedimentación, ambas nulas. Lo que convierte la ecuación en la ecuación gaussiana convencional.
2. Velocidad de deposición distinta de cero, y velocidad de sedimentación nula.
3. Velocidad de deposición y velocidad de sedimentación distintas de cero e iguales.
4. Velocidad de deposición distinta de cero y mayor que la velocidad de sedimentación, igualmente distinta de cero.
5. Velocidad de sedimentación distinta de cero y velocidad de deposición nula.

Dado el pequeño valor que tienen estas velocidades, la representación gráfica a las escalas habituales, no permite apreciar las conductas distintas según la tipología de las velocidades, por lo que se recurre a utilizar velocidades unas cien veces las reales, para magnificar la reacción del modelo.

Los valores de las concentraciones corresponden al plano XOY, plano del suelo, en donde tiene lugar la deposición y hacia donde lleva la velocidad de sedimentación.

Se han elegido las curvas de nivel por su expresividad, y las representaciones tipo *surf* o *mesh*, por su impacto visual.

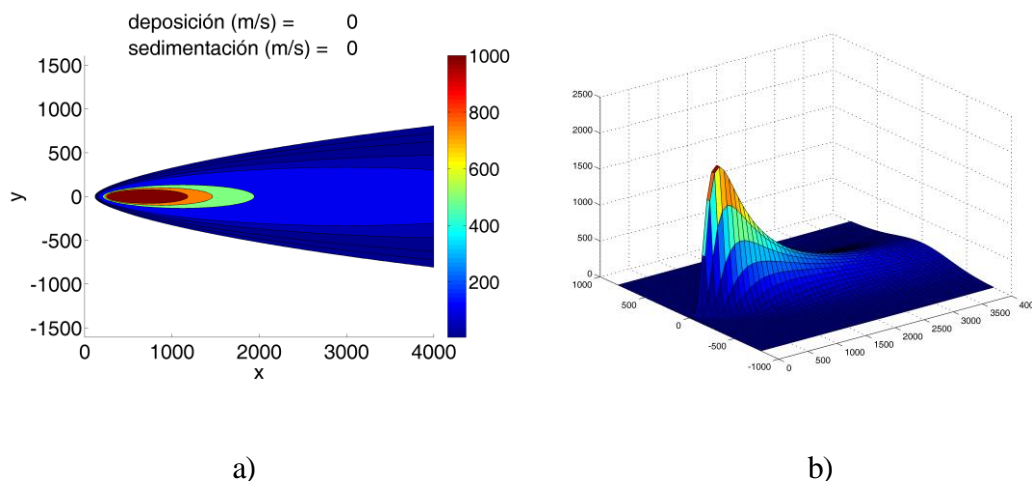


Figura 7.1. Ausencia de deposición y sedimentación. a) Curvas de nivel. b) Mesh.

La figura 7.1 muestra una distribución de concentraciones coincidente con la ecuación gaussiana de dispersión, ya que ambas velocidades son iguales a cero.

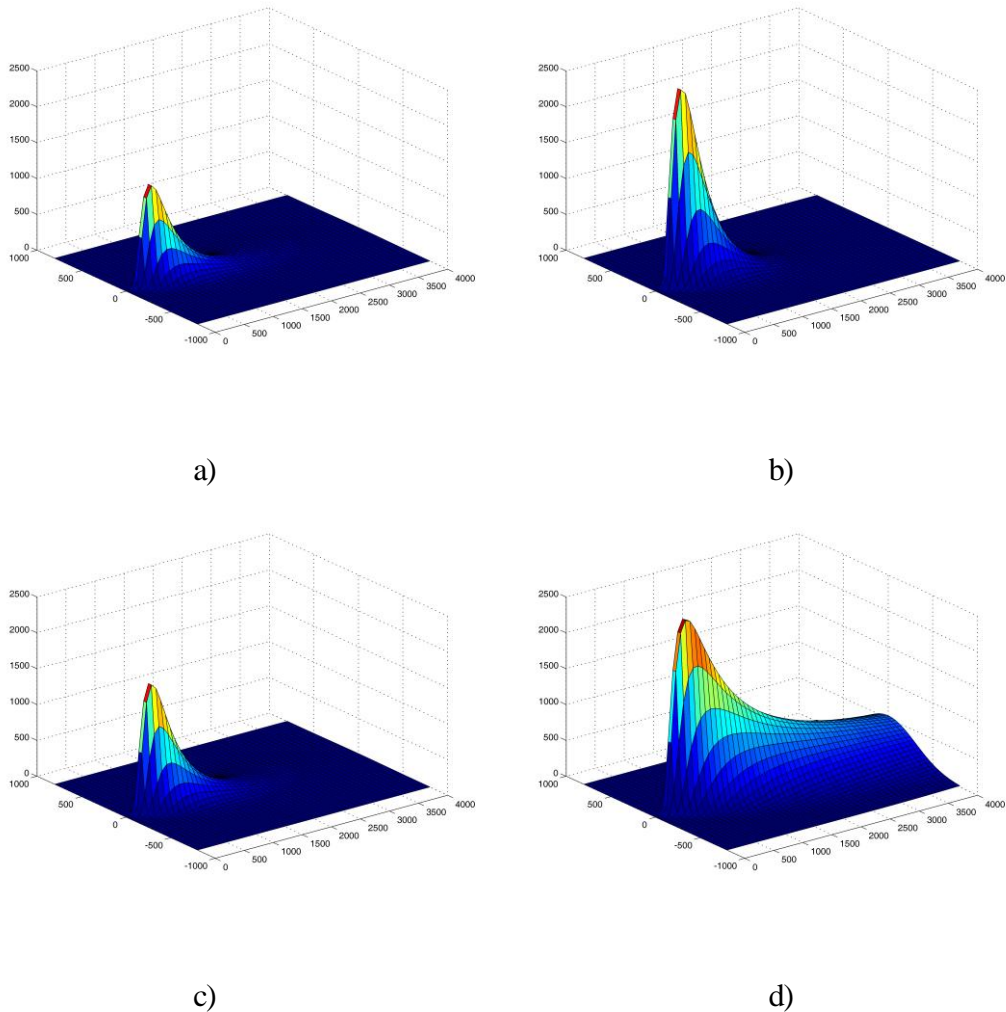


Figura 7.2. Tipología de Ermak representada por medio de superficies. a) Velocidad de de deposición distinta de cero y velocidad de sedimentación igual a cero. b) .Ambas velocidades distintas de cero e iguales. c) Ambas velocidades distintas de cero, y la velocidad de deposición superior a la velocidad de sedimentación. d) Velocidad de sedimentación distinta de cero y velocidad de deposición igual a cero.

En la figura 7.2 se aprecia la desigual distribución según las relaciones de los valores de las dos velocidades. En particular, la imagen d), correspondiente a la *tormenta de polvo* que es la situación en que las partículas caen por la acción de la gravedad, pero no son fijadas por el suelo, de modo que permanecen en una suspensión turbulenta.

Lo expuesto corresponde al caso hipotético de una emisión homogénea de partículas del mismo tamaño. Pero lo habitual es que la emisión contenga partículas de diversos

tamaños, y deba procederse a un cálculo por separado para cada tamaño, o fracción probable de cada tamaño.

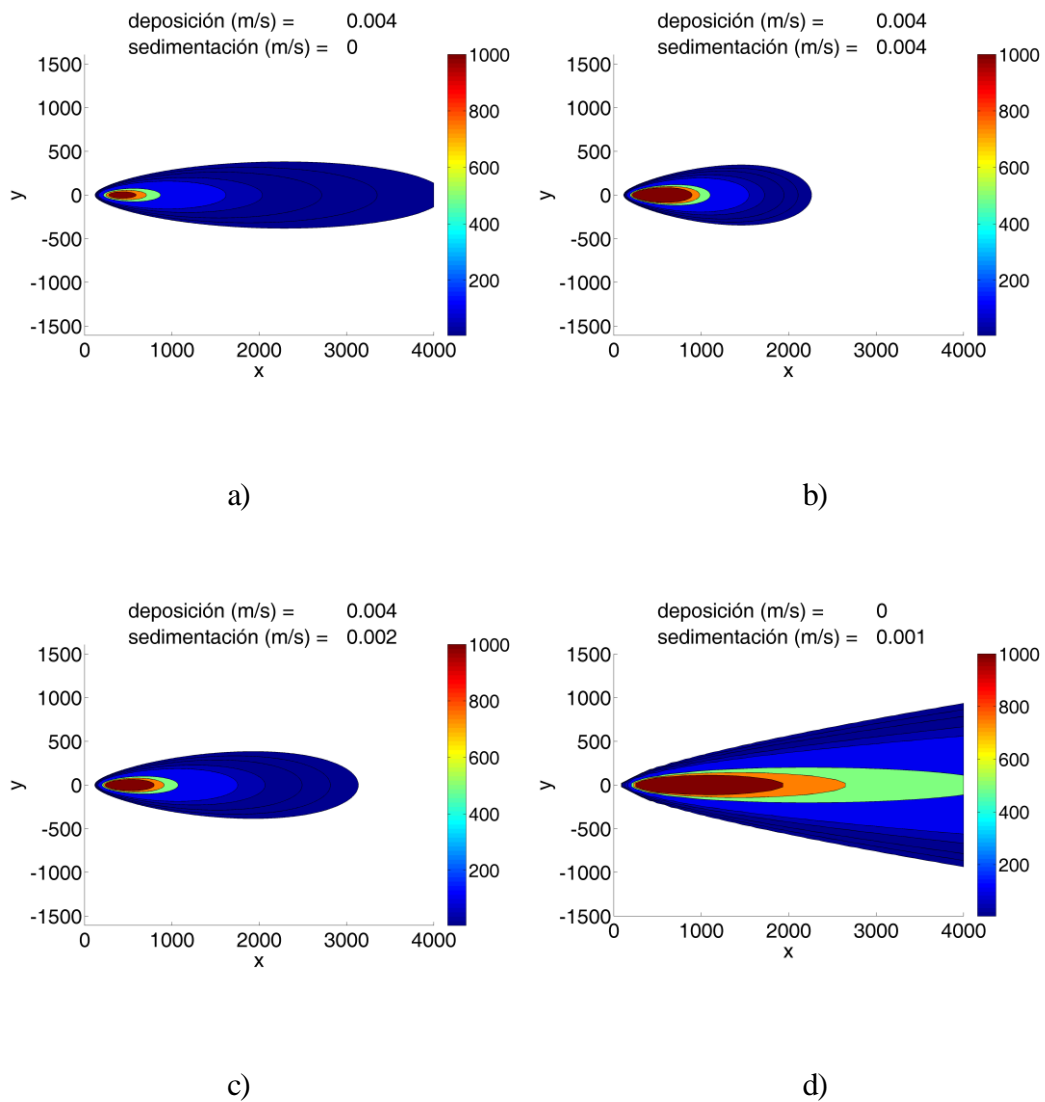


Figura 7.3. Tipología de Ermak representada por medio de curvas de nivel. a) Velocidad de deposición distinta de cero y velocidad de sedimentación igual a cero. b) .Ambas velocidades distintas de cero e iguales. c) Ambas velocidades distintas de cero, y la velocidad de deposición superior a la velocidad de sedimentación. d) Velocidad de sedimentación distinta de cero y velocidad de deposición igual a cero.

A un nivel menos detallado, cabe también aplicar ecuaciones más sencillas en consonancia con lo expuesto en el capítulo 5, como se expone en el siguiente apartado.

Lo que se pretende es facilitar el aprendizaje por vía de la visualización de una entidad espacial tridimensional, como es el penacho gaussiano.

## 2 Ecuaciones convencionales

Se utilizan las expresiones publicadas por (Wark y Warner, 2000). Básicamente consideran la velocidad terminal (o de deposición según su terminología) de las partículas como el factor determinante y lo introducen en las ecuaciones generales afectando el componente vertical, que consideran minorado con el paso del tiempo por dicha velocidad. El tiempo figura implícito en la medida que la distancia es lineal con el tiempo, en el supuesto gaussiano de la velocidad del viento como constante. La simplicidad de las ecuaciones facilita el grafismo por tener menor consumo de memoria.

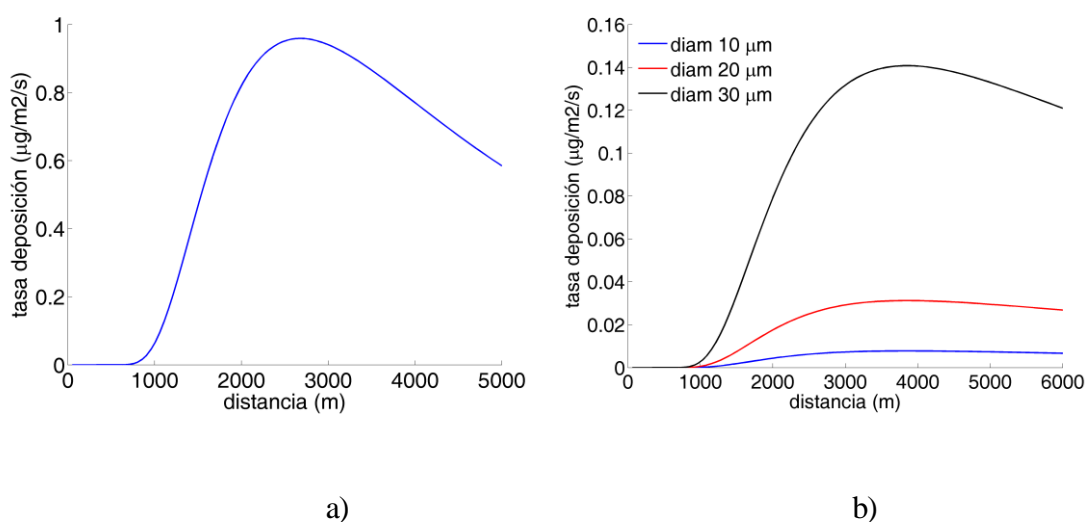


Figura 7.4 a) Ejemplo de tasa de deposición en la línea central para material particulado de un solo diámetro. b) En realidad lo pertinente es que se trate de la deposición de una mezcla de partículas de varios tamaños. En esta imagen se aprecia como a igualdad de emisión, el diámetro condiciona la deposición.

Según muestra figura 7.4 en la mezcla que es cualquier emisión particulada, hay que saber determinar las partículas más lesivas bien su tamaño, y establecer su deposición específica.

En las imágenes siguientes se ha exagerado la velocidad terminal para enfatizar las desviaciones de la normalidad la naturaleza másica de las partículas. En concreto de  $\mu$  se ha multiplicado por doscientos.

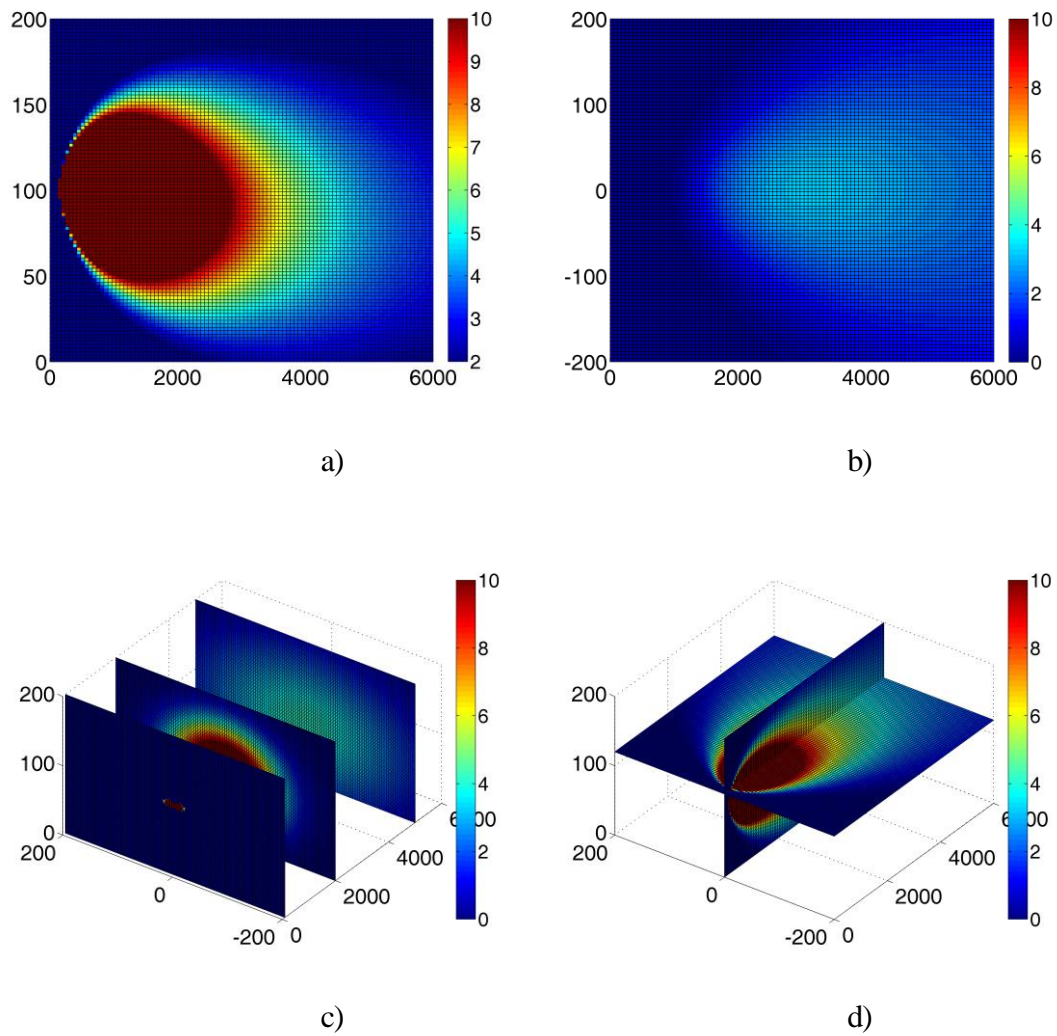


Figura 7.5. a) Plano X0Z de un penacho de partículas con elevada velocidad de deposición (exagerada para evidenciar el efecto). Se advierte la inclinación del eje del penacho. b) Plano X0Y. c) Aspecto tridimensional del penacho, en concreto tres *rodajas* perpendiculares al eje X. d) Secciones perpendiculares para apreciar la estructura del penacho.



### 3 Representaciones de los puffs

La evolución de un puff es su expansión guardando mientras se desplaza.

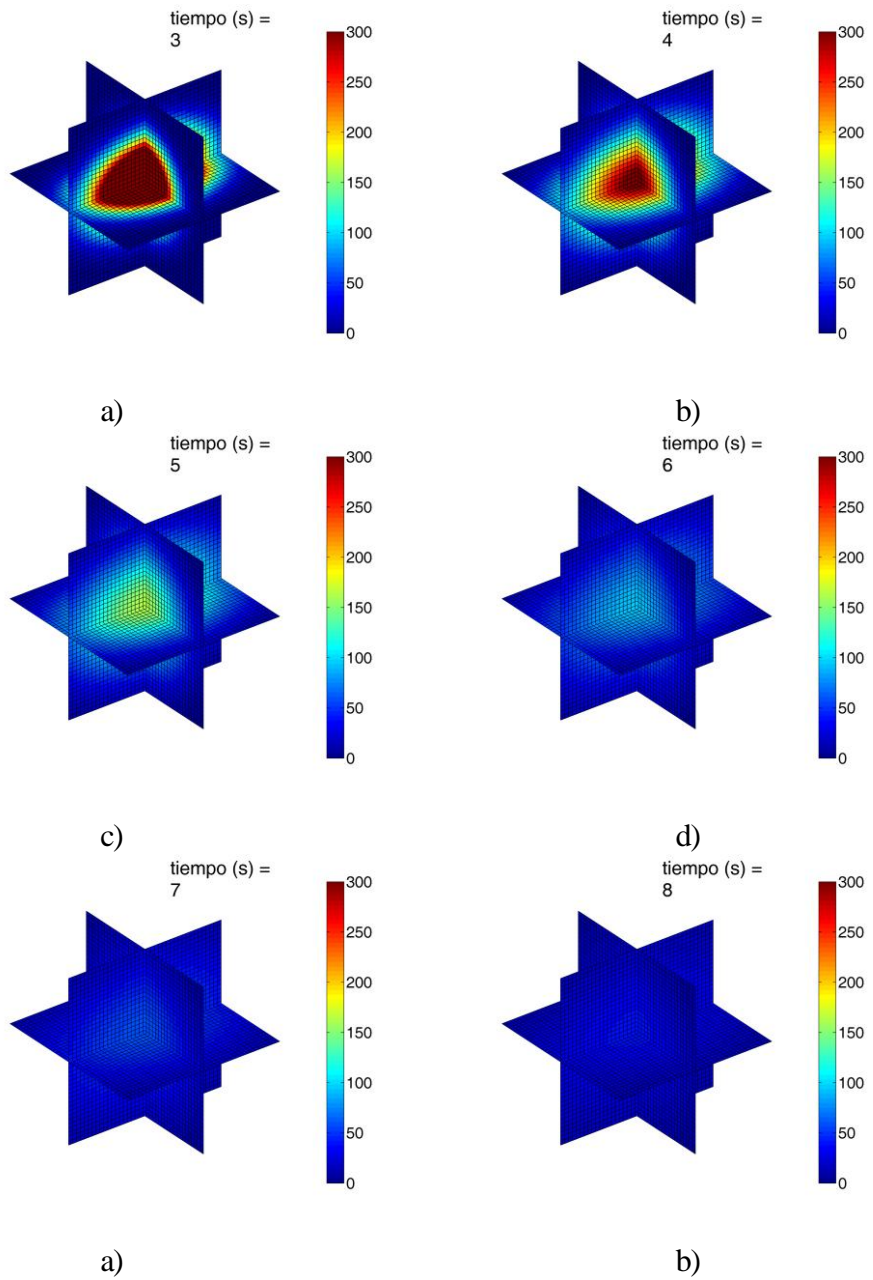


Figura 7.6. Estado del núcleo de un determinado puff conforme el paso del tiempo lo va expandiendo en tanto se desplaza advertidamente. a) 3 s. b) 4s. c) 5. d) 6s. e) 7 s. y f) 8 s. Se ha mantenido la escala cromática para comparación visual.

En la figura 7.6. se observa como la expansión del puff va haciendo disminuir la concentración. Para apreciar mejor la dilución, una vez visualizada la secuencia para captar el progreso es preferible valorar las concentraciones utilizando escalas cromáticas variables. Es lo que muestra la figura 66.2.

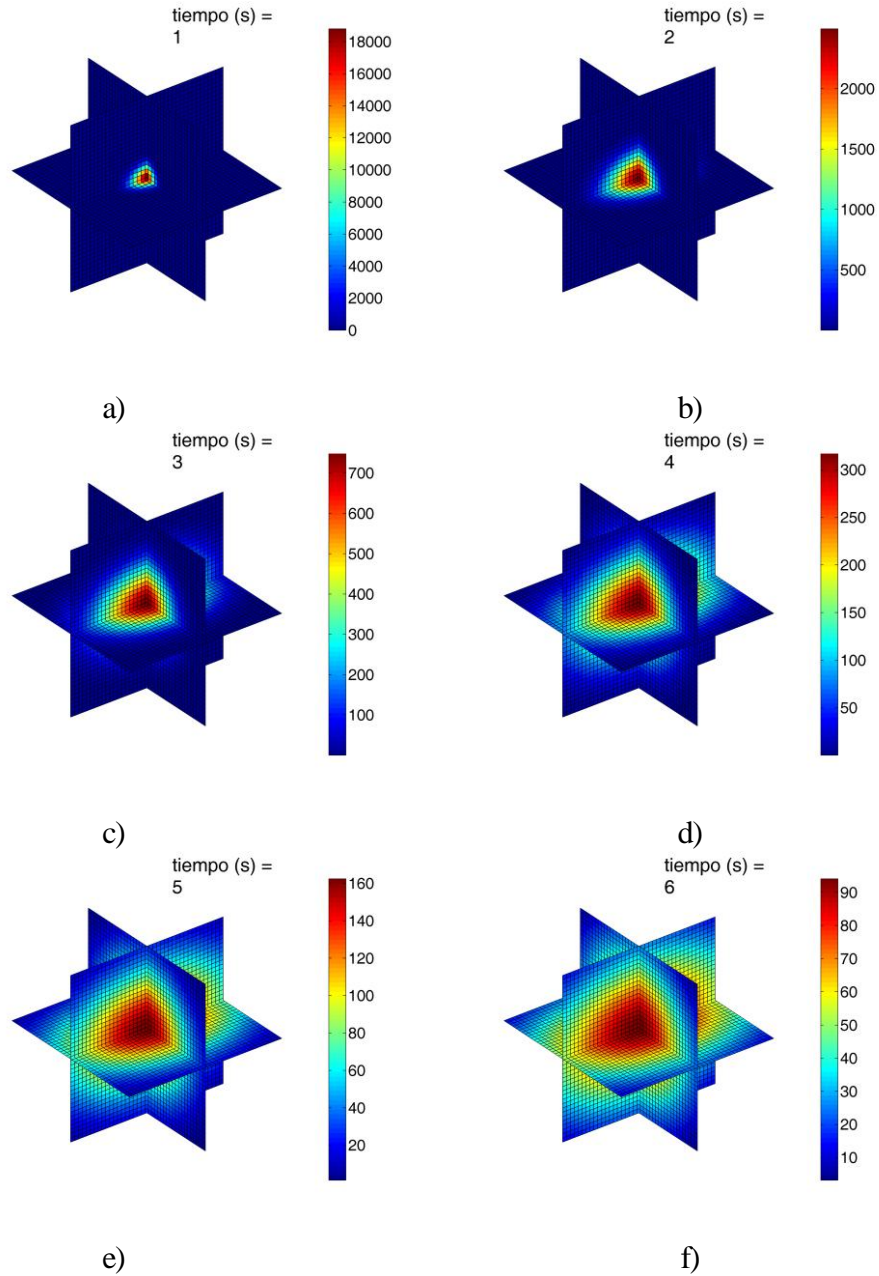


Figura 7.7. Estado del núcleo de un determinado puff con escala propia en cada instante. a) 1 s. b) 2 s. c) 3. d) 4 s. e) 5 s. y f) 6 s.

En la figura 7.8. se completa la secuencia.

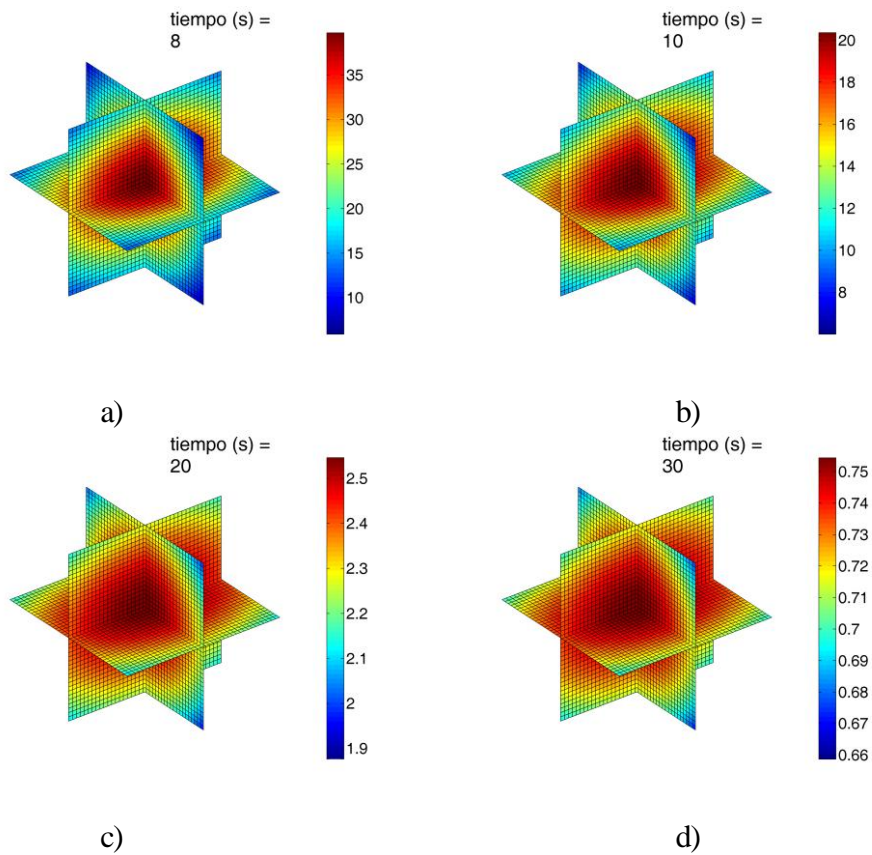


Figura 7.8. Continuación de la secuencia de la figura 66. Estado del núcleo de un determinado puff conforme el paso del tiempo lo va expandiendo en tanto se desplaza advertidamente. a) 8 s. b) 10 s. c) 20. d) 30 s.

En las figuras 7.6, 7.7 y 7.8 se ha visualizado la evolución del puff bajo el punto de vista de las concentraciones en la *nube*. ¿Cómo tiene lugar esta evolución mientras se desplaza?

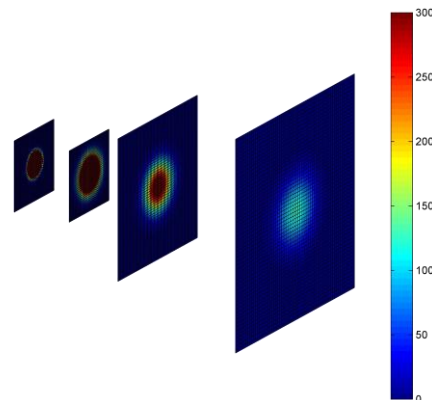


Figura 7.9. Ubicación espacial del puff, en distancia al emisor.

La representación de la situación espacio temporal del puff es lo que realmente tiene interés para el aprendizaje visual. Se ha visto en la figura anterior la evolución en el espacio, lo inmediato es situar cada puff en su *situación real*, habida cuenta de que los puffs son más erráticos y son más sensibles a los cambios de viento y aun de la flotabilidad del propio puff al ir igualándose su temperatura con la de la atmósfera que lo soporta. Por ello es importante determinar numéricamente la posición del puff en cada instante. Es lo que se muestra en las siguientes figuras.

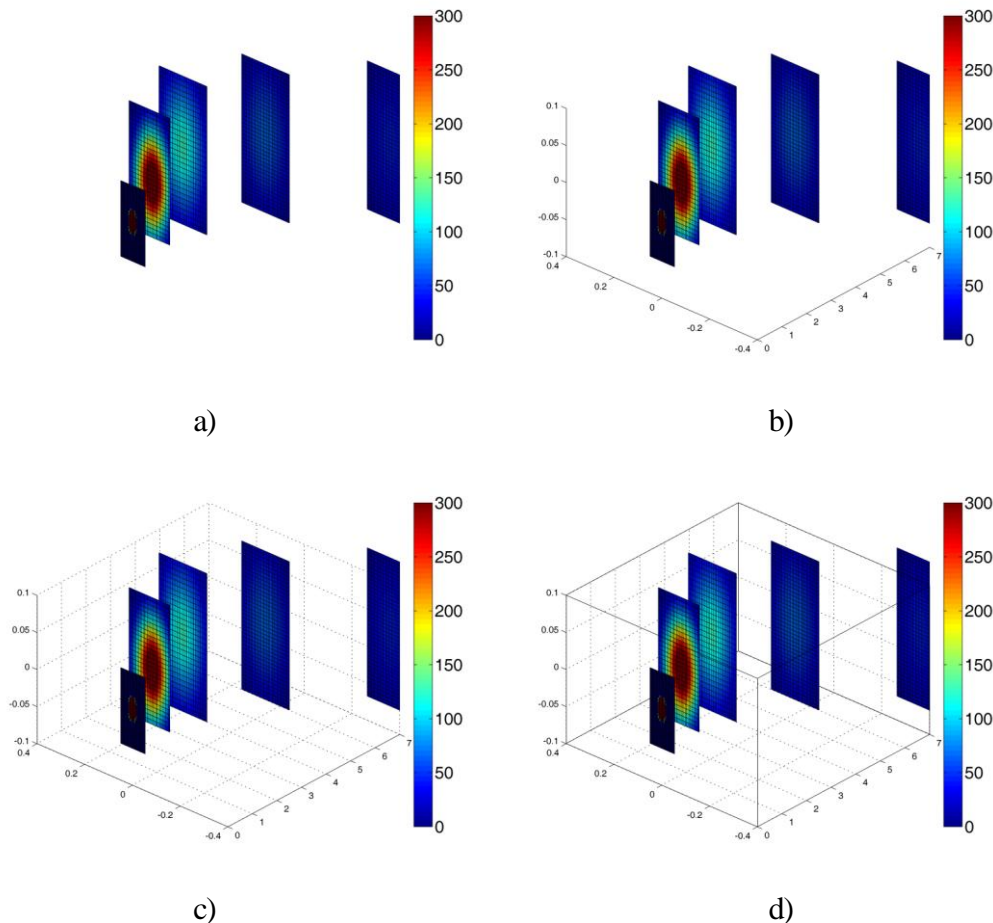


Figura 7.10. a) Las imágenes de la evolución del puff en el espacio se han ubicado en los puntos de lateralidad (coordenada  $y$ ) deseada (dados por el viento y el tiempo transcurrido). b) Encuadre dentro de los ejes con que se han configurado los puffs. c) La malla de los planos de referencia añade información visual. d) Finalmente, la caja de ejes, permite situar con exactitud.

En la figura 7.10. los puffs están con su ecuador en el plano  $XOY$ . Es un referente geométrico (que no de ubicación) para modelizar la expansión, este plano pertenece al sistema de referencia propio del puff. El siguiente paso es un cambio de coordenadas, efectuando una translación en el eje de las  $Z$ , altura, para cada puff, según a la altura a la que el viento y la flotabilidad haya situado el puff con el transcurso del tiempo. Aplicando la transformación, se llega a la figura 7.11.

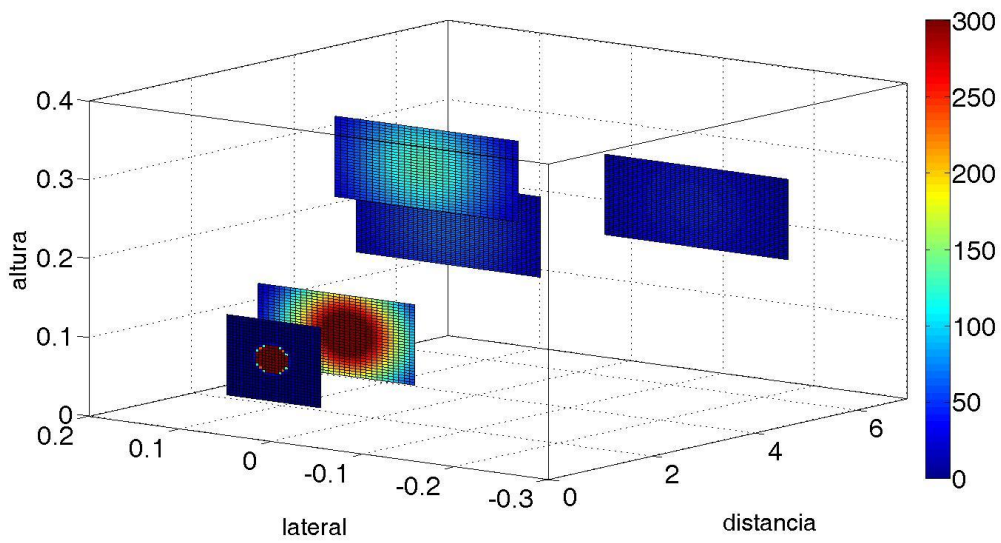


Figura 7.11.. Combinando la evolución temporal de las concentraciones en el puff con la trayectoria del centro del propio puff, se puede llegar a un aprendizaje visual del comportamiento de los puffs, facilitando el conocimiento que en ocasiones se denomina intuitivo y no es sino un destilado inconsciente de la experiencia.

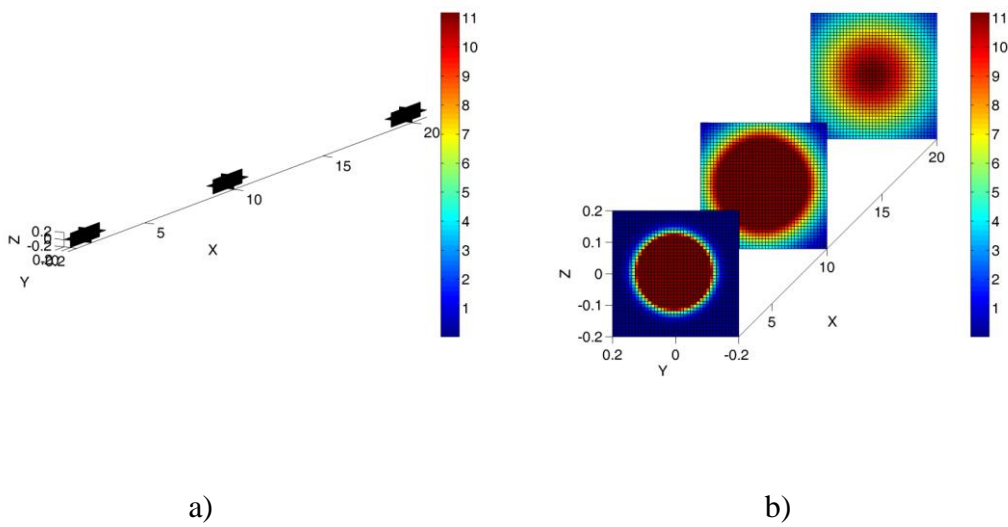


Figura 7.12. a) Ubicación realista de un puff con la misma escala en las tres dimensiones. b) Orientación gráfica para visualizar los estados del puff.

## Capítulo 8

# 1 El cálculo inverso de la dispersión atmosférica de contaminantes

Es indudable que existe un interés creciente en desarrollar métodos para la detección, localización y caracterización de fuentes de emisiones de agentes a la atmósfera (Hirst et al, 2013). Ante la medida de unas cifras de contaminación en determinados puntos del suelo o a otra altura, puede presentarse la necesidad de responder a todos o a algunos de los interrogantes siguientes: ¿dónde está el foco emisor?, ¿qué elevación tiene?, ¿qué tasa emite?

Suponiendo que el contaminante es emitido con tasa constante, transportado por aire en campo de velocidades estacionario, y que no experimenta transformaciones químicas o físicas durante su transporte, la ecuación de advección difusión puede ser resuelta por un método numérico cuando las condiciones iniciales y de contorno y la información de la fuente contaminante son conocidos (Liping et al., 2013).66

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(\vec{u}C) = \nabla(\text{disp} \cdot \text{grad}C) + \text{emis}$$

Este planteamiento, riguroso, ofrece grandes inconvenientes prácticos en el entorno de una capa límite atmosférica claramente turbulenta.

## 1.1 Métodos de determinación de los parámetros de la emisión

Según expone Ma et al. (2013) los múltiples métodos propuestos para para determinar los parámetros de la emisión, pueden dividir en dos grupos, los de forma directa y los de forma indirecta.

En el modo directo, por medio de sensores de punto o instrumentos móviles que detectan niveles de agentes, se determinan los parámetros de la fuente de acuerdo con la información obtenida por los instrumentos. Ya que los instrumentos deben gozar de gran movilidad o, si son fijos, deben ser numerosos en un área muy grande, la información originará grandes costos, además de que la intensidad de la fuente será de difícil determinación.

El método indirecto consiste en resolver un problema inverso. Para ello hay tres grandes grupos de procedimientos: la solución inversa directa, la aproximación estocástica y los métodos de optimización.

La solución inversa directa, es el método más inmediato, pero parece dar resultados inexactos. El método estocástico, más ajustado, está basado en la teoría de las inferencias bayesianas, por la que los bajos resultados de la distribución de probabilidad de algunos niveles de confianza pueden ser razonables asumiendo los errores de los instrumentos y el modelo de dispersión. El problema es que requiere la utilización de Cadenas de Markov Monte Carlo (MCMC). Finalmente, el método de optimización utiliza las medidas y un modelo numérico para obtener una simulación correcta. En este trabajo no se utiliza el método estocástico.

## 1.2 Planteamiento matemático general

El planteamiento general del cálculo inverso es el de determinar las fuentes de emisión a partir de medidas de concentraciones en la atmósfera.

$$conocido = J \times estimado + \varepsilon$$

En donde  $J$  es el Jacobiano que contiene el modelo de dispersión (Fereczi, 2014).

El algoritmo genérico para calcular los parámetros de la emisión a partir de las medidas de campo de las concentraciones, se reduce al planteamiento de optimización:

$$\min f = \sum_{i=1}^N [C_{medida,i} - C_{pronosticada,i}(Q, x, y, z, disp)]^2$$

$$Q > 0; x > 0; -\infty < y < \infty; z > 0$$

En donde  $C_{medida,i}$  es la concentración medida en g/m<sup>3</sup> en el punto  $i$ ,  $C_{pronosticada,i}$  es la concentración calculada con el modelo, que es función de  $Q$ , tasa de emisión en g/s,  $x$ , distancia a sotavento en m,  $y$ , distancia lateral en m,  $z$ , cota medida en m, y  $disp$ , condiciones ambientales y en especial la dispersión (Ma et al., 2013). Como veos el objetivo de la optimización es reducir las desviaciones de la predicción de resultados con el modelo matemático a partir de mediciones a un mínimo. Por lo tanto, es un problema de minimización restringida.

El análisis de la ecuación de advección difusión sugiere que un proceso de identificación de la fuente contaminante,  $emis$ , por estimación inversa, es posible cuando la velocidad  $u$ , y los coeficientes de difusión,  $disp$ , son conocidos (Liping, 2013).



En este trabajo se va a considerar que el campo de velocidades es constante, que los parámetros de dispersión son función de la distancia a la emisión y que la tasa de emisión es constante.

### **1.3 Herramienta concreta de optimización y resolución**

En este trabajo se utiliza Matlab®, en su versión 2014<sup>a</sup>, de libre acceso en la UPCT. La siguiente introducción está extraída de la guía del usuario de la *caja de herramientas* referente a Ajuste de Curvas.

Para la resolución del algoritmo de optimización de minimización restringida, se va a utilizar el método de ajuste no lineal de mínimos cuadrados.

Un modelo no lineal se define como una ecuación que es no lineal en los coeficientes, o una combinación de lineales y no lineales en los coeficientes. Las funciones gaussianas son el claro exponente de una función no lineal. En forma de matriz, los modelos no lineales son dados por la fórmula

$$y = f(X, \beta) + \varepsilon$$

donde,  $y$  es el vector n-por-1 de las respuestas,  $f$  es una función de  $\beta$  y  $X$ . Además,  $\beta$  es un vector m-por-1 de coeficientes,  $X$  es la matriz de diseño n-por-m para el modelo, y  $\varepsilon$  es un vector de n-por-1 de errores.

Los modelos no lineales son más difíciles de encajar que los modelos lineales debido a que los coeficientes no pueden estimarse utilizando las técnicas sencillas de cálculo matricial, sino que se requiere un enfoque iterativo. Este enfoque pasa por utilizar unos valores de partida como valores iniciales de los parámetros. De hecho los modelos no lineales pueden ser particularmente sensibles a los puntos de partida, por lo que ésta debe ser la primera opción de ajuste.

### **1.4 Pasos del ajuste**

- 1 Comprobar que el número de datos de determinaciones de concentración y el número de datos de las coordenadas, es el mismo.
- 2 Disponer los datos en columnas que, lógicamente, serán de igual número de elementos.
- 3 Expresar el algoritmo del modelo en la ortografía de Matlab.

4 Determinar los valores de partida, máximos y mínimos de cada parámetro.

5 Construir la siguiente sentencia.

## 1.5 Valoración del resultado

La valoración del resultado viene dada por una serie de outputs, que indican si se ha completado un ajuste válido, o si se deben modificar los valores máximos, mínimos y de partida para obtener una convergencia en el cálculo iterativo.

- SSE es la suma de cuadrados de los errores del ajuste. Un valor más cercano a cero indica un ajuste útil para la predicción.

$$SSE = \sum_{i=1}^n w_i (y_i - \hat{y}_i)^2$$

- R-cuadrado es el cuadrado de la correlación entre los valores de respuesta y los valores de respuesta previstos. Un valor más cercano a 1 indica que una mayor proporción de la varianza se explica por el modelo, luego el ajuste puede ser bueno.

$$SSR = \sum_{i=1}^n w_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2$$

$$SST = \sum_{i=1}^n w_i (y_i - \bar{y})^2$$

$$R\text{-square} = \frac{SSR}{SST} = 1 - \frac{SEE}{SST}$$

- DFE es el grado de libertad del algoritmo. Es la diferencia entre el número de datos y el número de parámetros.

$$DFE = n - m$$

- Adj R-cuadrados es R-cuadrado ajustado a los grados de libertad. Un valor cercano a 1 indica un buen ajuste.

$$adj\text{-}R\text{-square} = 1 - \frac{SSE(n-1)}{SST(v)}$$

- RMSE es la raíz del error cuadrático medio o el error estándar. Un valor más cercano a 0 indica un ajuste que es más útil para la predicción. Es un parámetro muy importante porque matiza el valor de R-cuadrado. Ya que puede haber una buena correlación y grandes errores.

$$RMSE = s = \sqrt{MSE}$$

- MSE es el error cuadrático medio o residual cuadrático medio. Debe ser lo menor posible.

$$MSE = \frac{SSE}{v}$$

- Coef es el número de coeficientes en el modelo.

## 1.6 Estructura de la sentencia tipo

La estructura *nuclear* de los programas que se han elaborado es la que se muestra.

```

% se expresan las coordenadas como columnas
x=[coordenadas x]
y=[coordenadas y]
% y las concentraciones medidas en los puntos
% con esas coordenadas.
z=[concentraciones]
% se establecen las opciones del ajuste,
% tanto en el método, como en las condiciones
% iniciales y de contorno de los parámetros a y b
s = fitoptions('Method','NonlinearLeastSquares',...
    'Lower',[am,bm],...
    'Upper',[aM,bM],...
    'Startpoint',[a0,b0]);
% Nótese que como hay dos parámetros, a y b
% se proporcionan dos valores iniciales, máximos
% y mínimos.
%
% Se ajustan los datos x e y con el modelo
% f(x,y,a,b)
f = fitype('f(x,y,a,b)',options,s);
% se representa el resultado y se analizan
% los valores de R2, adj-R2, MSE, RMSE, SSE
% que vienen empaquetados en gof
[ff,gof] = fit(x,y,f)

```

A partir de estos resultados se puede proceder al pos proceso para el fin adecuado.

El capítulo se completa con unas aplicaciones prácticas de cálculos inversos en diferentes situaciones:

1. Determinación de la tasa de emisión de un foco del que se conoce la altura, así como las medidas de la concentración detectada por receptores situados en la línea media.
2. Determinación en el caso de que las medidas de la concentración no estén en la línea media.
3. Determinación cuando se desconoce la ubicación del foco, su altura, la emisión.

Para cada determinación se han elaborado programas en Matlab, al que se pueden cambiar los datos de entrada para adaptarlos a diversas situaciones, en la línea cómo funcionan los *programas grandes*.

Los programas se presentan como *scripts* sin *interface* ni *inputs* previos, con la finalidad de que el usuario los recorra secuencialmente cada vez que quiera utilizarlos con sus datos, reconociendo las etapas conceptuales que suponen la resolución del problema. Se trata esencialmente de evitar el uso como caja negra.

## 2 Calculo inverso de la emisión a partir de datos de concentración en la línea media

Se conoce la altura del foco de emisión, y su situación, igualmente el estado de estabilidad atmosférica y la velocidad del viento. Lo que se pretende es determinar la tasa de emisión.

El proceso se lleva a cabo en una serie de etapas que son similares en el resto de las determinaciones.

### 2.1 Procedimiento y resultados con tres receptores

Se realiza una simulación con el modelo gaussiano de dispersión considerando una emisión de 160 g/s desde una altura de 60 m., en condiciones de estabilidad atmosférica 4, nublado, con un viento de 6 m/s (los datos pueden cambiarse para cada simulación).

Una vez obtenida la serie de concentraciones en la línea media, se les aplica un ruido aleatorio de mediana intensidad para dar lugar a una serie de concentraciones que puedan corresponder a medidas experimentales. Cada vez que se corre el programa se modifica el ruido aleatorio., En la figura 8.1 se observan los valores del modelo y sus equivalentes como de campo tras la adición del ruido.

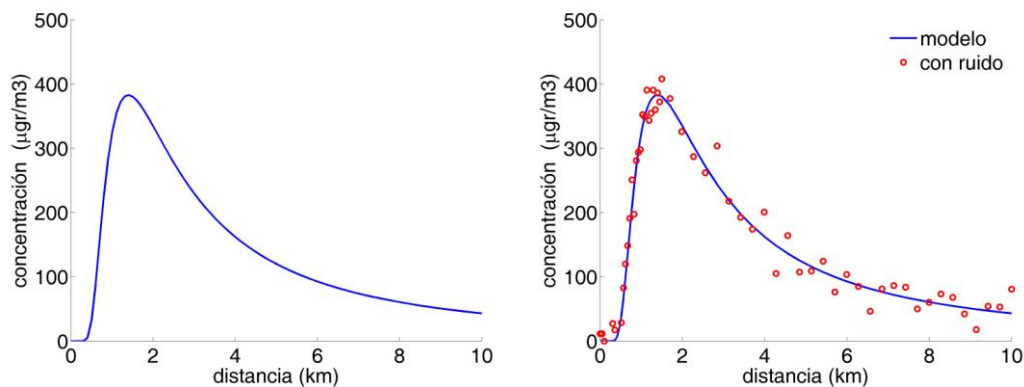


Figura 8.1. En azul las concentraciones en la línea media calculadas con el modelo. En rojo los valores con ruido incorporado que se tomas como valores de campo.

Posteriormente se escogen algunos valores de campo, y su distancia  $x$  al emisor en sotavento. Es determinante el número de receptores escogido. La simulación concreta de estas figuras, corresponde a tres receptores, número claramente insuficiente, pues es el mínimo. Lo que ocurre es que en este caso sólo hay un parámetro por determinar y el método iterativo alcanza a cumplir el objetivo.

En la figura 8.2 se muestran los valores seleccionados en la línea media, y la ubicación de los receptores.

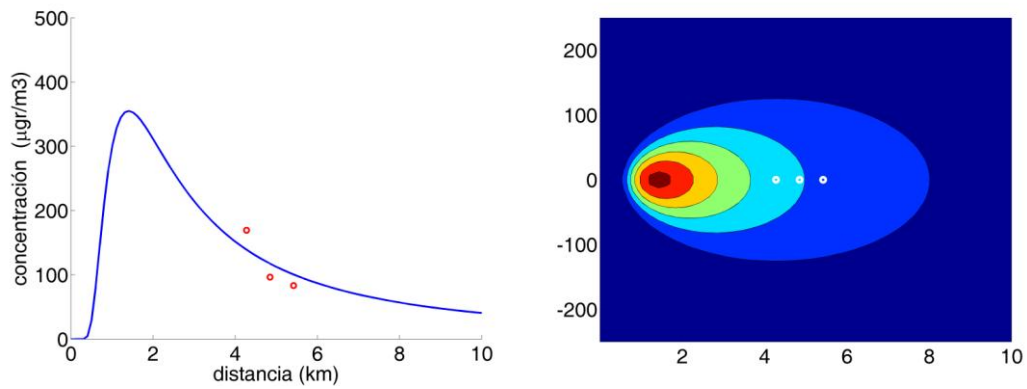


Figura 8.2. Ubicación de los receptores escogidos tanto en magnitud como en situación. En azul las concentraciones en la línea media calculadas con el modelo. En rojo los valores con ruido incorporado que se tomas como valores de campo. Los puntos blancos en el plano X0Y son los receptores.

Acto seguido se ejecuta el programa obteniéndose los resultados que se aprecian en la figura 8. 3.

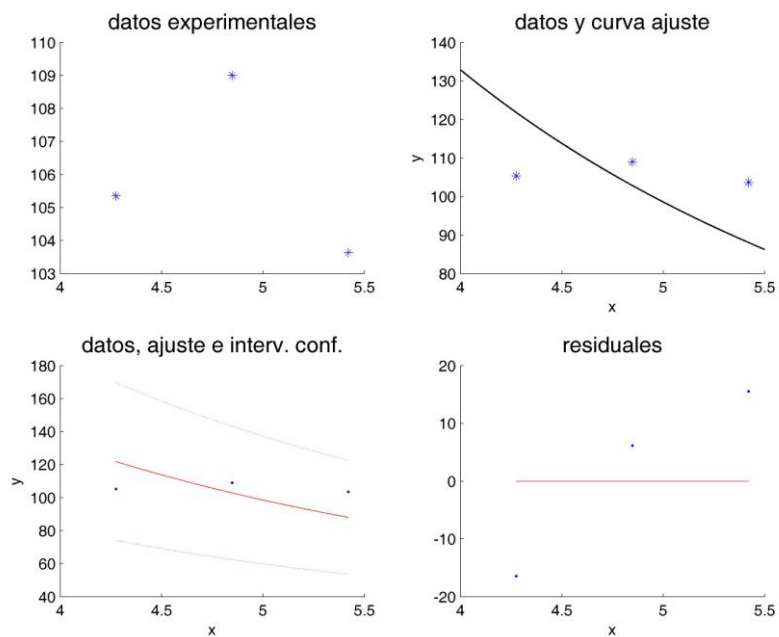


Figura 7.3. Se ha configurado el programa para que ofrezca esta imagen compuesta y expresiva.

Finalmente se vuelve a ejecutar el modelo gaussiano de dispersión con el valor de emisión encontrado con el ajuste.

Y se representan las dos curvas simultáneamente en los mismo ejes para para valorar el ajuste en la figura 8.4.

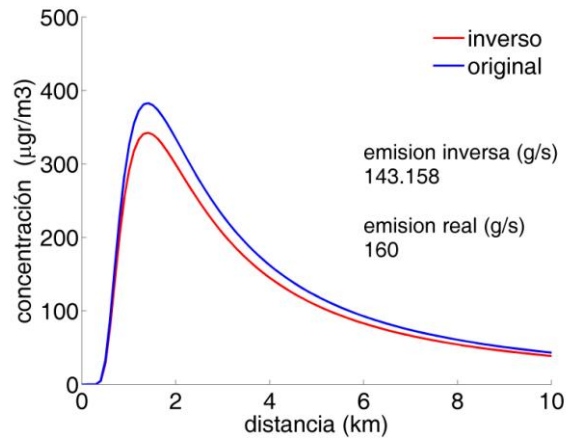


Figura 8.4. Comparación de los valores en la línea media y comparación de la emisión real y la emisión calculada. La mediocridad del resultado se explica por tratarse de sólo tres receptores.

## 2.2 Resultados con 6 receptores

Ejecutado el programa pero con seis receptores, los resultados son:

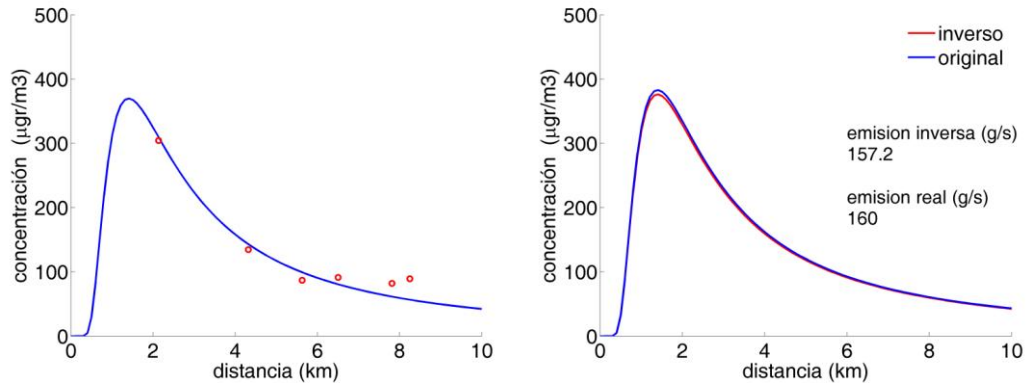


Figura 8.5. Comparación de los valores en la línea media y comparación de la emisión real y la emisión calculada, en esta ocasión con seis receptores. La coincidencia es manifiesta.

Lo que expresa una clara mejoría. Lo pertinente es valorar el grado de ajuste en función del número de receptores hasta encontrar el planteamiento más económico.

### 3 Calculo inverso de una emisión a partir de datos de concentración dispersos

En este caso los receptores están ubicados en cualquier punto dentro o fuera de la línea media. Inicialmente se aplica un ruido de  $100 \cdot \text{rand}(1)$ , que supone desviaciones de hasta 100 unidades. Esto equivale a obtener valores de receptores.

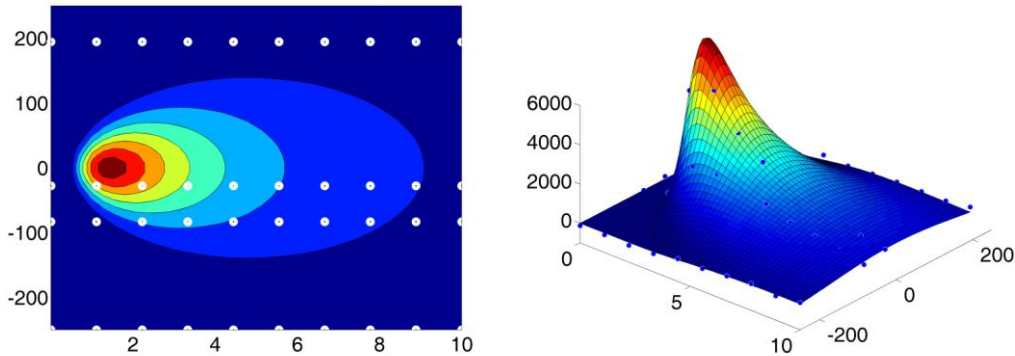


Figura 8.6 a) Ubicación de los receptores en el plano. XOY. b) Apreciación de la discordancia entre los valores de receptores y los exactos.

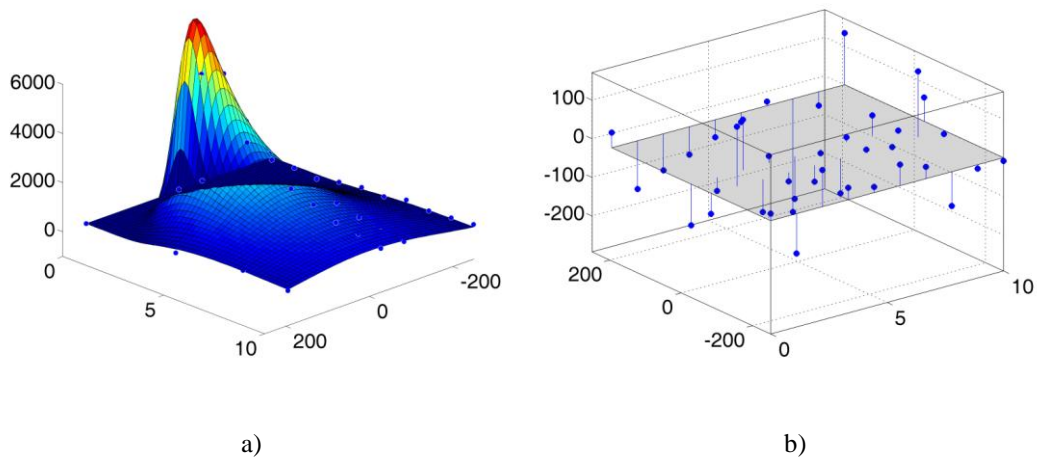


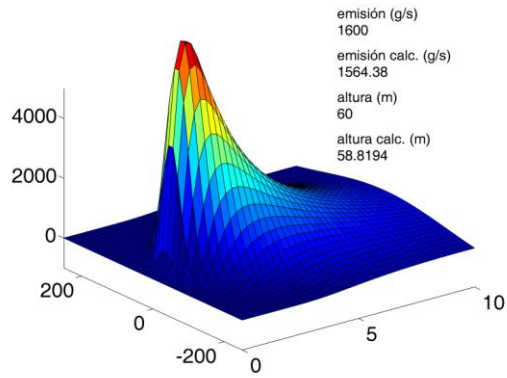
Figura 8.7. a) Rotaciones en la figura para advertir las diferencias entre valores de receptor y valores del modelo. b) Residuales del ajuste.

Ejecutado el script, hay que verificar si el programa ha obtenido buenos resultados. Ello se comprueba comparando los valores calculados de los parámetros (tasa de emisión y altura efectiva) con los valores reales de estos mismos parámetros.

En la figura 8.8 se presentan los valores de los parámetros, tanto los reales como los calculados. También se presentan los parámetros numéricos de la bondad del ajuste, que evidencian un ajuste excelente.



sse: 2.9488e+05  
rsquare: 0.9959  
dfe: 38  
adjrsquare: 0.9957  
rmse: 88.0906



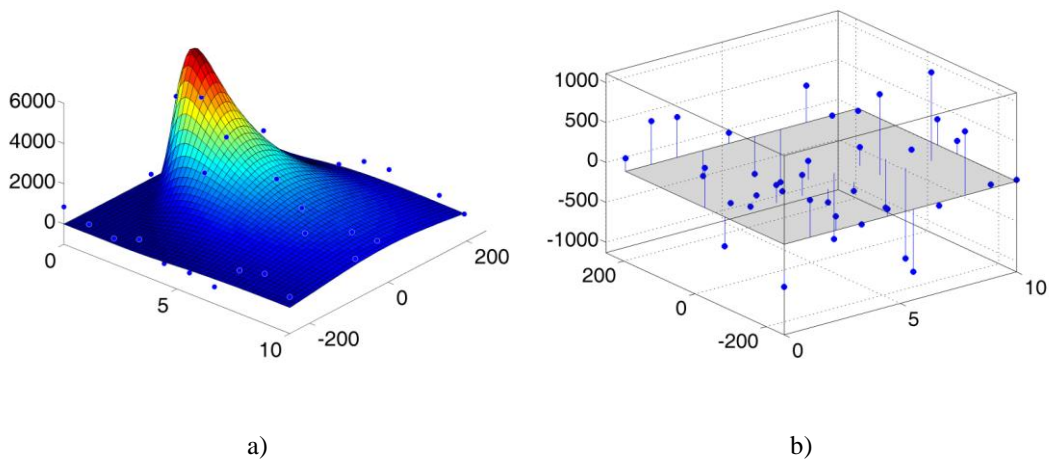
a)

b)

Figura 8.8. a) Indicadores numéricos del ajuste. b) Comparación de los valores reales y calculados de los parámetros de la emisión.

### 3.1 Aumento de la imprecisión de los receptores

Veamos ahora qué ocurre cuando incrementamos la intensidad del ruido, cuando las medidas de los receptores están más distorsionadas. Vamos a aumentar el ruido hasta  $500 * \text{rand}(1)$ , que equivale a aceptar diferencias de hasta de 500 unidades.



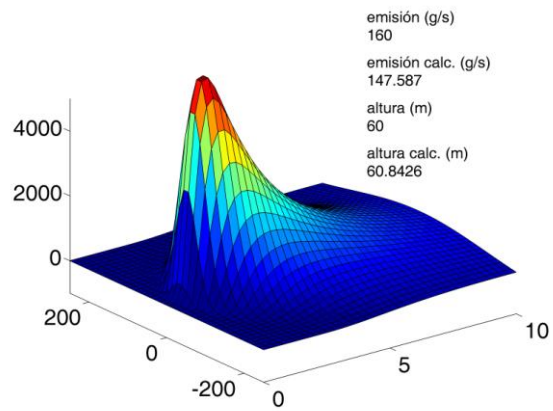
a)

b)

Figura 8.9 En el caso de un ruido de hasta 500 unidades.. a) Rotaciones en la figura para advertir las diferencias entre valores de receptor y valores del modelo. b) Residuales del ajuste.

Hay un ajuste de peor calidad, aunque está en valores que aún pueden tomarse en cuenta en el contexto.

sse: 8.7562e+06  
rsquare: 0.8668  
dfe: 38  
adjrsquare: 0.8633  
rmse: 480.0268



a)

b)

Figura 8.10. a) Indicadores numéricos del ajuste con un ruido de hasta 500 unidades. b) Comparación de los valores reales y calculados de los parámetros de la emisión, cuando la intensidad del ruido es de hasta 500 unidades.

## 4 Cálculo inverso de una emisión de ubicación desconocida a partir de datos de concentración de línea media dispersos

Una cuestión de interés, sobre todo porque la dispersión atmosférica no conoce de fronteras políticas, es la de situar exactamente dónde se encuentra un foco emisor. Este interés aumenta en el caso de los olores en los que no hay una imagen visible del penacho que pueda orientar inicialmente.

En este caso, el planteamiento del problema consiste en que, al efectuar la simulación para añadir el ruido y considerar los datos de receptores, no se toman referencias desde  $x=0$ , sino desde un punto a una distancia  $d$ , más allá, al que consideramos  $x+d$ , y que convierte las coordenadas en relativas desde ese punto.

El problema inverso en este caso consiste en, además de determinar la altura de emisión y la tasa de la misma, en conocer su ubicación.

El algoritmo a ajustar será:

$$\text{con} = \frac{a}{2\pi \cdot (68 \cdot (x+d)^{0.892} \cdot (33.2 \cdot (x+d)^{0.725-1}) \cdot 6) \dots \cdot (\exp(-((c)^2 / 2 / (33.2 \cdot (x+d)^{0.725-1.7})^2)) \cdot 1e6)}$$

que es el habitual de las concentraciones en el suelo y en la línea media, sustituyendo las dispersiones por sus algoritmos de cálculo respecto a  $x$ , y sustituyendo además  $x$ , por  $x+d$ .

De este modo se tiene que determinar tres parámetros: el parámetro  $a$ , que es la tasa de emisión, el parámetro  $c$ , que es la altura eficaz de la emisión, y el parámetro  $d$ , que es la distancia real desde la primera coordenada respecto a la que se han referido las demás., que es un origen transitorio.

La importancia de establecer los valores iniciales, máximos y mínimos para el ajuste, cobra una especial relevancia en este caso por la posibilidad de obtener valores imaginarios que bloquearían la iteración.

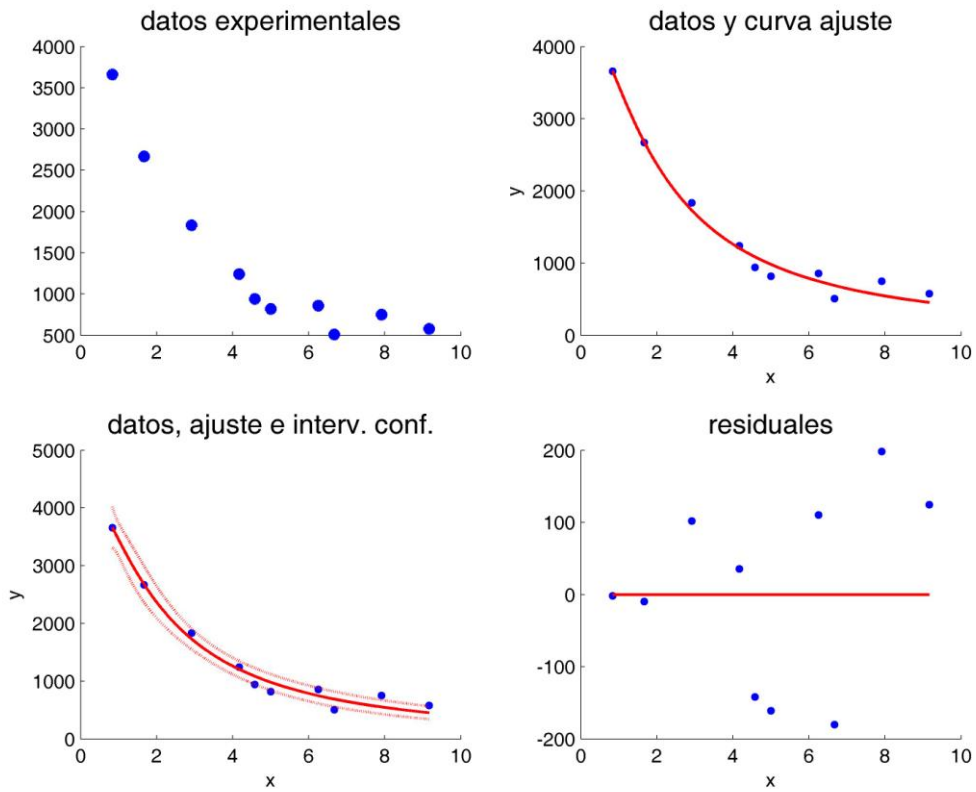
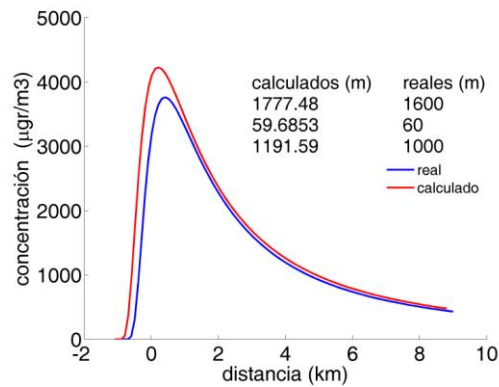


Figura 8.11. Expresión gráfica de la ubicación de los receptores el ajuste obtenido, así como el intervalo de confianza para los valores calculados de los parámetros. Los residuales son pequeños y el número de grados de libertad es correcto. El ajuste es excelente.

sse: 1.5723e+05  
rsquare: 0.9837  
dfe: 7  
adjrsquare: 0.9791  
rmse: 149.8706



a)

b)

Figura 8.12. a) Bondad del ajuste. b) Imagen comparativa de los parámetros calculados y la superposición de gráficas. La diferencia de distancias es del 12 %.

Sin embargo, los residuales son muy pequeños, lo que es un indicio de que el ruido no tiene suficiente relevancia como para exigir más al ajuste.

La siguiente simulación tiene lugar aumentando el ruido, para comprobar como los ajustes no siempre resultan tan rápidos y acertados, exigiendo no pocos tanteos en los valores iniciales y máximos o mínimos.

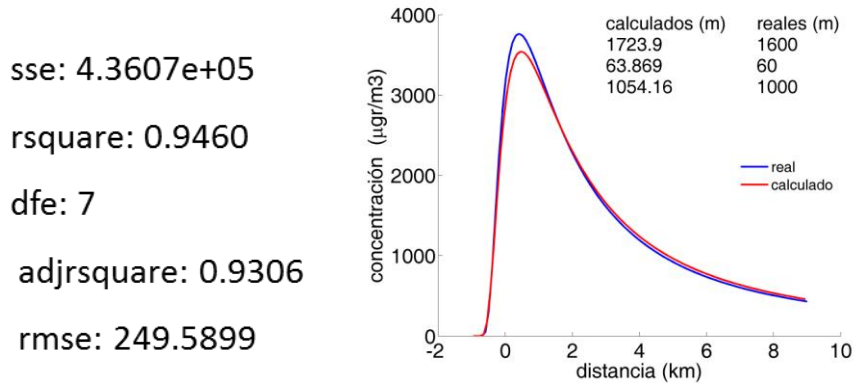


Figura 8.13. Duplicando el ruido, los parámetros del ajuste no merman. Los parámetros ligados al R-cuadrado no deben ser valorados aisladamente de otros indicadores y, desde luego, deben contrastarse con la visualización de los resultados.

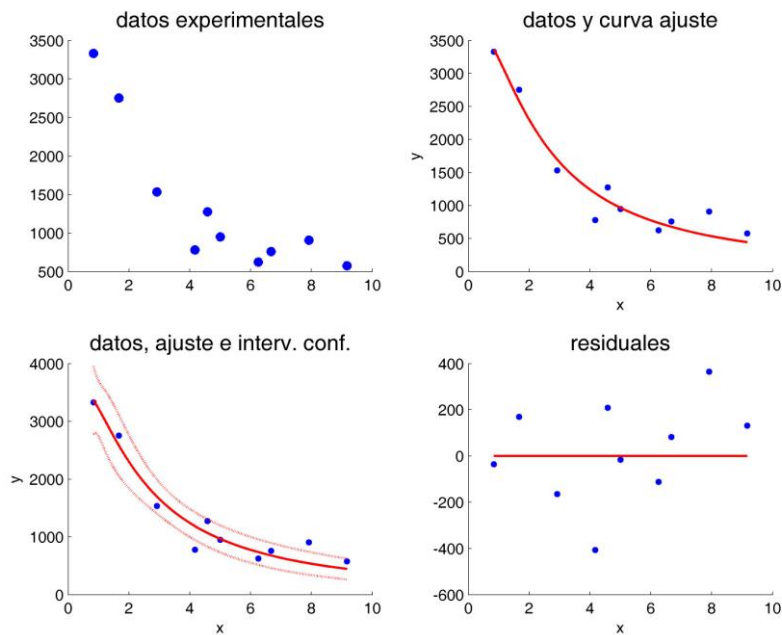


Figura 8.14. Duplicando el ruido las imágenes sugieren un buen ajuste.

Finalmente se expone la determinación con un factor de ruido de 400 unidades, que corresponde a desviaciones importantes de los valores de los receptores en relación a los valores *reales*.

Sigue siendo interesante valorar el comportamiento de los parámetros de ajuste en relación al valor de las imágenes.

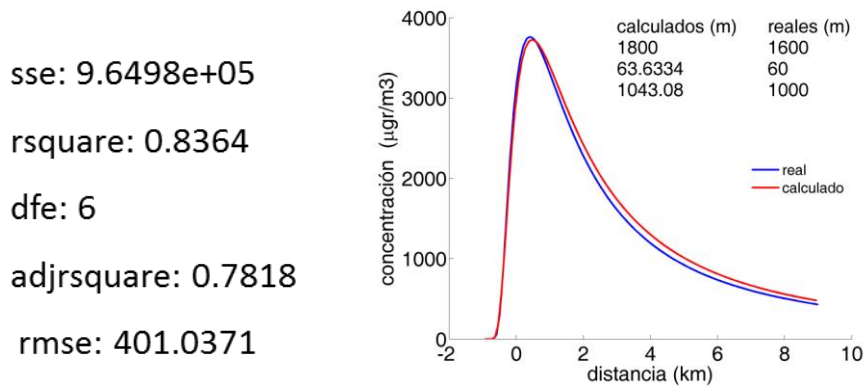


Figura 8.15. Duplicando una vez más el ruido la disparidad no aumenta excesivamente, y los parámetros del ajuste no merman tampoco excesivamente.

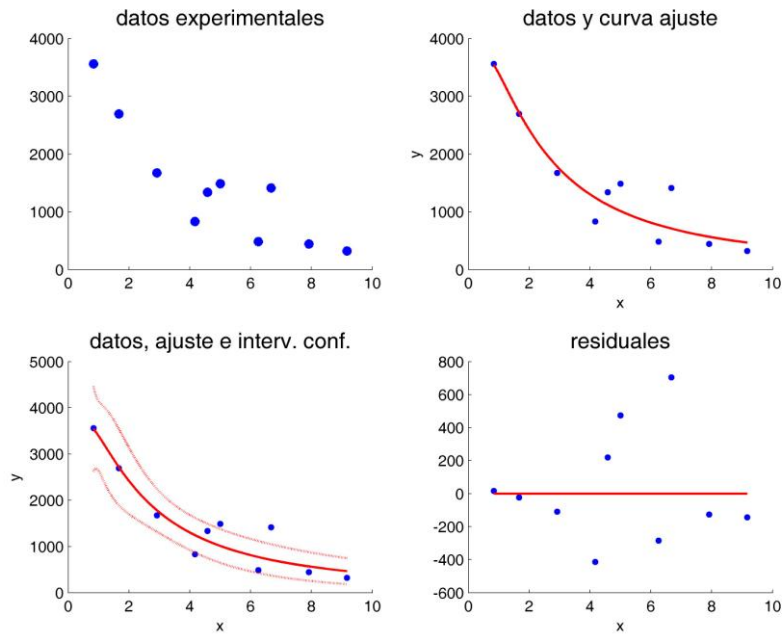


Figura 8.16. Duplicando una vez más el ruido, los residuales son llamativos. Pero el ajuste no es malo.

## **Bibliografía para el capítulo 7**

- Ferenczi, Z. (2014). General overview on the mathematical problems of the air pollution modelling. [http://ecmisig-num.elte.hu/workshop/ecmi\\_ws\\_abstracts.html#ferenczi](http://ecmisig-num.elte.hu/workshop/ecmi_ws_abstracts.html#ferenczi)
- Hirst, B., Jonathan, P., González del Cueto, F., Randell, D. and Kosut, O. (2013). Locating and quantifying gas emission sources using remotely obtained concentration data. Atmospheric Environment, Volume 74, p. 141-158.
- Liping, P., Yu, Z., Hongquan, Q., Wei, W. (2013). Approach to identifying pollutant source and matching flow field. Atmospheric Environment 73 (2013) 1e10
- Ma, D., Deng, J. and Zhang, Z. (2013). Comparison and improvements of optimization methods for gas emission source identification. Atmospheric Environment 81 (2013) 188e198
- Matworks. (2014). Curve Fitting Toolbox™. User's Guide .R2014a
- Matworks. (2014). Optimization Toolbox™. User's Guide. R2014a
- Singh, S.K. , Rani, R. (2015). Assimilation of concentration measurements for retrieving multiple point releases in atmosphere: A least-squares approach to inverse modelling. Atmospheric Environment 119 (2015) 402e414

## Capítulo 9



# Conclusiones

## Conclusiones de índole competencial específica

El procedimiento puede ser de utilidad para facilitar el aprendizaje del modelo gaussiano de dispersión atmosférica por diversas razones:

1. Procede secuencialmente desde la ecuación de difusión advección hasta algoritmos complejos.
2. Mantiene en su desarrollo la identidad conceptual frente al aparato matemático.
3. Expone las posibilidades abiertas del modelo hacia una progresiva complejidad.
4. Facilita la visualización interna del modelo mediante una iconicidad brillante que acompaña al concepto y al algoritmo en todo momento.
5. Gratifica el manejo de ecuaciones de por si hostiles para el manejo manual, haciéndolas *cercanas*.
6. Motiva la exploración personal del modelo, como antesala de la metacognición.

## Conclusiones de índole competencial transversal

Además de para el aprendizaje del modelo gaussiano de dispersión atmosférica, esta propuesta docente es útil para el bagaje competencial trasversal del alumno ya que:

1. Familiariza al alumno con el manejo de la tridimensionalidad tanto algorítmica como gráficamente, habilidad que le puede ser de gran utilidad en numerosas competencias específicas en otras disciplinas ingenieriles.
2. Propicia un acercamiento amistoso a Matlab como herramienta de indiscutible utilidad para un alumno de ingeniería.

## Conclusiones en torno al aprendizaje

En la esfera del aprendizaje como actitud ante la realidad, esta propuesta puede repercutir positivamente en el aprendizaje futuro de los alumnos ya que:

1. Fomenta el valor de la imagen personalmente elaborada como herramienta de transmisión de contenidos y mecanismo de evaluación del aprendizaje profundo.
2. Desincentiva el uso de cajas negras como herramientas facilitadoras, en realidad sustitutivas de la participación activa del alumno; sembrando la conveniencia de utilizar herramientas moldeables.
3. Propicia el aprendizaje reflexivo.
4. Acerca al aprendizaje *learning doing*.
5. Propicia el enfoque del modelo/caso/problema en el análisis de los sistemas, evitando el particularismo del usuario pasivo y el generalismo tan ajeno a la ingeniería.