



industriales
etsii

**Escuela Técnica
Superior
de Ingeniería
Industrial**

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA

**Escuela Técnica Superior de Ingeniería
Industrial**

Comparación de los distintos modelos para la difusión de contaminantes emitidos por fuentes puntuales

TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN INGENIERÍA INDUSTRIAL MECÁNICA

Autor: Gonzalo García Martín
Director: Juan Francisco Sánchez Pérez
Codirector: Laura María González de Ángel



**Universidad
Politécnica
de Cartagena**

Cartagena, Julio de 2017

Agradecimientos:

Quiero dar las gracias al Doctor Juan Francisco y a Laura María, por su apoyo y atención durante la realización de este proyecto, sin cuya paciencia no podría haberlo acabado. Y a mis padres. Gracias.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

- 1.1. INTRODUCCIÓN 1
- 1.2. OBJETIVOS DEL PROYECTO 3

CAPÍTULO 2: FUNDAMENTOS TEÓRICOS

- 2.1. INTRODUCCIÓN 5
- 2.2. EMISIÓN DE CONTAMINANTES EN LA INDUSTRIA 5
- 2.3. MODELO DIFUSIÓN PASIVA 6
 - 2.3.1. Ecuación de gobierno 6
 - 2.3.2. Condiciones de contorno 8
 - 2.3.3. Tratamiento de los parámetros meteorológicos 9
 - 2.3.3.1. Turbulencia de origen mecánico del aire 9
 - 2.3.3.2. Estabilidad atmosférica y turbulencia de origen térmico 13
 - 2.3.3.3. Coeficientes de difusión de Eddy 20
- 2.4. MODELOS DE DIFUSIÓN PREVIOS Y SIMPLIFICACIONES 23

CAPÍTULO 3: DESARROLLO EXPERIMENTAL

- 3.1. MÉTODO DE SIMULACIÓN POR REDES (MESIR) 31
- 3.2. MODELO EN RED 33
- 3.3. COMPONENTES DEL MODELO EN RED 33
 - 3.3.1. Monopuertas pasivas 33
 - 3.3.2. Monopuertas activas 35
- 3.4. EL MESIR COMO MÉTODO NUMÉRICO 36
- 3.5. SIMULACIÓN MEDIANTE EL PROGRAMA NGSPICE 36

CAPÍTULO 4: RESULTADOS

- 4.1. RESULTADOS SIMULACIONES Y GRÁFICAS 41
 - 4.1.1. Condiciones estables 43
 - 4.1.2. Condiciones neutras 48
 - 4.1.3. Condiciones inestables 54
- 4.2. COMPARACIÓN Y RELACIÓN CON MODELOS ANTERIORES 60
 - 4.2.1. Condiciones estables 61
 - 4.2.2. Condiciones neutras 64
 - 4.2.3. Condiciones inestables 68
- 4.3. DATOS DIARIOS DE PRESENCIA DE CONTAMINANTES DE LA COMUNIDAD AUTÓNOMA DE LA REGIÓN DE MURCIA 71

CAPÍTULO 5: CONCLUSIONES 77

BIBLIOGRAFÍA 79

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

1.1. INTRODUCCIÓN

El problema de la difusión pasiva de contaminantes atmosféricos también conocido en la literatura como dispersión pasiva de contaminantes atmosféricos, ha sido investigado desde principios del siglo XX. Los primeros modelos fueron desarrollados por *Roberts (1923)* y *Sutton (1953)*, más tarde se desarrollaron los modelos de *Pasquill* y *Pasquill-Gifford (1961)*. Todos ellos modelos sencillos, para el cálculo de la concentración de contaminantes mediante ecuaciones empíricas. Estos son empleados en los programas de predicción de concentración de contaminantes a (ALOHA, 2002) y constan de numerosas limitaciones.

Son muchos los efectos a corto y a largo plazo que la contaminación atmosférica puede ejercer sobre la salud de las personas. En efecto, la contaminación atmosférica urbana aumenta el riesgo de padecer enfermedades respiratorias agudas, como la neumonía, y crónicas, como el cáncer del pulmón y las enfermedades cardiovasculares. La contaminación del aire representa un grave problema de higiene del medio que afecta a los habitantes de los países en desarrollo y desarrollados. Los residentes de las ciudades donde hay niveles elevados de contaminación atmosférica padecen más enfermedades cardíacas, problemas respiratorios y cánceres de pulmón que quienes viven en zonas urbanas donde el aire es más limpio.

La mejora del aire que respiramos puede disminuir considerablemente la cantidad de personas que padecen enfermedades respiratorias y cardiovasculares. La aplicación de normas y reglamentos destinados a cuantificar y controlar las emisiones de contaminantes atmosféricos puede mejorar la calidad del aire y, a su vez, aminorar la carga de morbilidad y mejorar la salud. (*Organización Mundial de la Salud, 2017*)

En este proyecto se ha empleado el modelo matemático ofrecido por el *autor Yeong Ku (1987)*, ya que se trata de un modelo más completo que incluye aspectos como las reacciones químicas de los contaminantes emitidos y se ha implementado el Método de Simulación por Redes para el cálculo de la concentración.

El Método de Simulación por Redes (MESIR) ya había sido aplicado con éxito en varios campos de la ingeniería, tales como la transferencia de calor, la química de la oxidación, consolidación de suelos, transporte a través de membranas, reacciones electroquímicas, problemas acoplados de flujo y transporte, y otros, lo que prueba su efectividad y precisión.

La primera etapa de la investigación, fue la búsqueda en la literatura de todo lo escrito hasta la actualidad del problema de difusión pasiva de contaminantes.

La segunda etapa constó del desarrollo del modelo por medio del MESIR, utilizando como herramienta el programa MATLAB.

La tercera etapa de la investigación, fue la simulación de resultados y comparación con modelos anteriores, estableciendo las relaciones entre unos y otros.

Este proyecto avanza en un tema de gran peso en la actualidad, y que tiene un impacto claro sobre aspectos como la salud, la alimentación y agricultura incluyendo las ciencias del mar, la energía, el transporte, el clima.

La Ley 33/2011, de 4 de octubre, General de Salud Pública establece en su artículo 30 “De la Sanidad Ambiental” que se debe proceder a “la vigilancia de los factores ambientales de carácter físico, químico o biológico y de las situaciones ambientales que afectan o pueden afectar a la salud” y en su artículo 35 “1. Las Administraciones públicas deberán someter a evaluación del impacto en salud, las normas, planes, programas y proyectos que seleccionen por tener un impacto significativo en la salud, en los términos previstos en esta ley. 2. La evaluación de impacto en salud es la combinación de procedimientos, métodos y herramientas con los que puede ser analizada una norma, plan, programa o proyecto, en relación a sus potenciales efectos en la salud de la población y acerca de la distribución de los mismos”.

Por otro lado, el proyecto encaja con la filosofía del Programa denominado Horizonte 2020 (H2020), establecido según la Decisión número 1386/2013/UE DEL PARLAMENTO EUROPEO Y DEL CONSEJO de 20 de noviembre de 2013 relativa al Programa General de Acción de la Unión en materia de Medio Ambiente hasta 2020, en el que La Unión Europea concentra gran parte de sus actividades de investigación e innovación. En el período 2014-2020 y mediante la implantación de tres pilares, contribuye a abordar los principales retos sociales, promover el liderazgo industrial en Europa y reforzar la excelencia de su base científica.

Horizonte 2020 integra por primera vez todas las fases desde la generación del conocimiento hasta las actividades más próximas al mercado: investigación básica, desarrollo de tecnologías, proyectos de demostración, líneas piloto de fabricación, innovación social, transferencia de tecnología, pruebas de concepto, normalización, apoyo a las compras públicas pre-comerciales, capital riesgo y sistema de garantías (EUCO 13/10 CONSEJO EUROPEO, 17 de junio de 2010.)

1.2. OBJETIVOS DEL PROYECTO

El objetivo principal de este proyecto es la comparación de la ecuación general de difusión de contaminantes junto a sus ecuaciones acopladas (ecuaciones de viento, radiación solar, etc) con los software que implementan los modelos simplificados de *Roberts*, *Sutton*, *Pasquill* y *Gifford*.

Como objetivos parciales se tiene:

- En primer lugar, el estudio de las desviaciones de los modelos simplificados con respecto al modelo de estudio.
- En segundo lugar, los efectos para la contaminación atmosférica.
- En tercer lugar, demostración de las limitaciones a largo plazo de los modelos simplificados utilizados actualmente.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1. INTRODUCCIÓN

Se entiende por contaminación atmosférica a la presencia en la atmósfera de sustancias en una cantidad que implique molestias o riesgo para la salud de las personas y de los demás seres vivos, vienen de cualquier naturaleza, *Martínez Ataz y Díaz de Mera Morales (2014)*. Así como que puedan atacar a distintos materiales, reducir la visibilidad o producir olores desagradables.

El nombre de la contaminación atmosférica se aplica por lo general a las alteraciones que tienen efectos perniciosos en los seres vivos y los elementos materiales. Los principales mecanismos de contaminación atmosférica son los procesos industriales que implican combustión, tanto en industrias como en automóviles y calefacciones residenciales, que generan dióxido y monóxido de carbono, óxidos de nitrógeno y azufre, entre otros contaminantes. Igualmente, algunas industrias emiten gases nocivos en sus procesos productivos, como cloro o hidrocarburos que no han realizado combustión completa.

La contaminación atmosférica puede tener carácter local, cuando los efectos ligados al foco se sufren en las inmediaciones del mismo, o planetario, cuando por las características del contaminante, se ve afectado el equilibrio del planeta y zonas alejadas a las que contienen los focos emisores. Los contaminantes atmosféricos pueden ser primarios, los que se emiten directamente a la atmósfera como el dióxido de azufre SO_2 , que daña directamente la vegetación y es irritante para los pulmones o secundarios que son aquellos que se forman mediante procesos químicos atmosféricos que actúan sobre los contaminantes primarios o sobre especies no contaminantes en la atmósfera (*Stanley E., 2007*).

Como es habitual en las memorias de trabajo de final de grado, los fundamentos teóricos de esta investigación se recogen en un capítulo inicial, permitiendo así hacer referencia al mismo en cualquier parte del texto. En este capítulo, pues, se presentan las ecuaciones que definen el

modelo matemático del proceso de difusión de contaminantes. La solución numérica de estos problemas mediante el método de simulación por redes es uno de los objetivos principales de esta memoria.

Para desarrollar el modelo matemático comenzamos con una relación de ecuaciones básicas necesarias para el cálculo de los diferentes parámetros que constituyen el punto de partida para el diseño de los modelos en red.

2.2. EMISIÓN DE CONTAMINANTES EN LA INDUSTRIA

Entre los diferentes accidentes graves que pueden producirse en las industrias que, almacenan, utilizan o procesan sustancias químicas, las emisiones y la formación de nubes están consideradas, como los de mayor peligrosidad respecto a sus consecuencias y complejidad en cuanto a su modelización (*San Nicolás y Ballesta, 2003*).

La peligrosidad viene determinada por el nivel de toxicidad de las sustancias involucradas y por la persistencia y alcance de las nubes. Una gran parte de las sustancias habituales en la industria presentan elevada toxicidad, provocando efectos crónicos a largo plazo o efectos agudos, incluso letales, en cortos períodos de tiempo; en muchos casos estos efectos se manifiestan a concentraciones muy pequeñas como consecuencia de su elevada reactividad con componentes biológicos esenciales, que alteran los equilibrios que sustentan la vida. Las características de las emisiones, fundamentalmente las cantidades involucradas, la dinámica atmosférica y las condiciones del entorno, determinan la dirección, persistencia y alcance de las nubes, cuyas consecuencias finales dependen de los elementos vulnerables presentes, pudiendo afectar a zonas muy extensas.

La modelización de las emisiones de sustancias tóxicas constituye un aspecto básico de la prevención y protección, permitiendo establecer la proporcionalidad de las medidas necesarias para evitar o mitigar estas emisiones. Debido a la variedad de escenarios posibles y a la complejidad de los mecanismos, parámetros y variables implicados, los modelos informáticos utilizados en la actualidad, como: *Mazzola y Addis (1995)*, *Less (2001)* y ALOHA, desarrollado por la Environmental Protection Agency de EEUU (EPA, 2002), tienen muchas limitaciones ya que utilizan las simplificaciones de los modelos Gaussianos, como son el modelo de *Sutton (1953)* o el de *Paquill y Gifford (1961)* (siendo algunas de las limitación: dispersión de

nubes limitada a 60 minutos y a 10 Km del origen de emisión, determinación de concentración únicamente a nivel de suelo, no tienen en cuenta las reacciones químicas de las diferentes sustancias...), explicados con posterioridad en este proyecto.

El modelo desarrollado en este proyecto, el cual se ha resuelto por medio del método de simulación por redes, resuelve las limitaciones de los modelos anteriores, siendo más preciso al obtener resultados y abarcando escenarios más complejos y fieles a la realidad.

2.3. MODELO DIFUSIÓN PASIVA

Los modelos de difusión atmosférica (*Jia-Yeong, 1986*) han sido extensamente usados para estudiar la complicada relación entre la calidad del aire y la fuente de emisión en función de las condiciones meteorológicas y de la fuente de emisión. En general estos modelos están basados en una ecuación de gobierno de la concentración de contaminante acorde con el principio físico de conservación de masas.

Estos procesos de difusión se producen en la denominada *capa límite atmosférica*, cuya altura puede oscilar entre 200 y 1000 m, que desde el punto de vista fluidodinámico es la más compleja por su interacción con la litosfera e hidrosfera. Los parámetros más significativos a la hora de estudiar los fenómenos de difusión de contaminantes son los siguientes:

- La magnitud, dirección y persistencia del viento.
- La temperatura y la presión.
- La humedad y la pluviosidad.
- La radiación solar.
- La turbulencia.

En este modelo también se han implementado las reacciones químicas de los contaminantes, habiéndose estudiado en concreto la transformación del dióxido de azufre (SO_2) a partículas de sulfato (SO_4^{2-}).

2.3.1. Ecuación de gobierno

Las bases matemáticas para el modelo de contaminación atmosférica urbana es la ecuación de la conservación de masas, la cual describe advección, difusión turbulenta,

reacciones químicas y eliminación y emisión del contaminante. El conjunto de la ecuación puede ser expresado de la siguiente expresión (Jia-Yeong, 1986):

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial(uC_i)}{\partial x} + \frac{\partial(vC_i)}{\partial y} + \frac{\partial(wC_i)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_v \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) + R_i + Q_i$$

$i=1 y 2$ [2.3.1]

Donde:

i = número de especies.

C₁ = SO₂ (especie 1)

C₂ = SO₄²⁻. (especie 2)

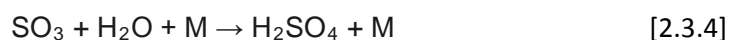
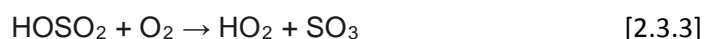
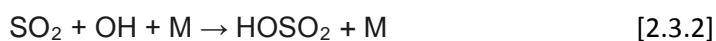
K_H, K_v = Coeficiente horizontal y vertical de difusión de Eddy.

u, v, w = componentes de la media del viento a lo largo de los ejes x, y, z.

Q_i = Caudal de emisión de la especie i.

R_i = termino característico de la reacción química de la especie i.

La combustión de los combustibles fósiles es la mayor fuente de dióxido de azufre y sulfato en las áreas urbanas (Miyakawa, 2007). El SO₂ puede afectar al sistema respiratorio y las funciones pulmonares, y causa irritación ocular. La inflamación del sistema respiratorio provoca tos, secreción mucosa y agravamiento del asma y la bronquitis crónica; asimismo, aumenta la propensión de las personas a contraer infecciones del sistema respiratorio. Los ingresos hospitalarios por cardiopatías y la mortalidad aumentan en los días en que los niveles de SO₂ son más elevados. En combinación con el agua, el SO₂ se convierte en ácido sulfúrico, que es el principal componente de la lluvia ácida que causa la deforestación. El SO₄²⁻ antropogénico es producido en su mayoría mediante la oxidación del SO₂ a ácido sulfúrico (H₂SO₄).



M es un tercer cuerpo. En la formación del H₂SO₄, la ecuación [2.3.2] es el paso limitante. El resultado H₂SO₄ se condensa casi irreversiblemente sobre los aerosoles preexistentes. También se nuclea con vapor de agua (H₂O) y / o H₂O y Amoníaco gaseoso (NH₃) para formar un aerosol de sulfato.

La transformación química del dióxido de azufre al ión sulfato puede ser expresada de la siguiente forma:

$$R_1 = -k_a C_1 \quad [2.3.5]$$

$$R_2 = \gamma k_a C_1 \quad [2.3.6]$$

Donde C_1 y C_2 son las concentraciones de dióxido de azufre y sulfato respectivamente, γ es la relación de peso molecular del SO_2 y k_a es la constante de velocidad de reacción. Los valores son $k_a=0.03\pm 0.05 \text{ h}^{-1}$ y $\gamma=0.03-0.28$ (Miyakawa, 2007).

2.3.2. Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno son:

$$z = 0 \rightarrow \frac{\partial C_i}{\partial z} = F_i(x, y, z) \quad [2.3.7]$$

$$z = H \rightarrow K_v \frac{\partial C_i}{\partial z} = 0 \quad [2.3.8]$$

$$x = x_w \text{ or } x_e \rightarrow K_H \frac{\partial C_i}{\partial x} = 0 \quad [2.3.9]$$

$$y = y_n \text{ or } y_s \rightarrow K_H \frac{\partial C_i}{\partial y} = 0 \quad [2.3.10]$$

$$F_i = v_{di} C_i(0) \quad [2.3.11]$$

Donde:

F_i = Flujo de deposición en superficie.

y_s, y_n = Límites sur y norte del dominio del modelo.

x_w, x_e = Límites este y oeste del dominio del modelo.

v_{di} = Velocidad de deposición seca de los contaminantes.

H = altura del límite superior del dominio.

H varía en función de la altura de la capa límite atmosférica. H es siempre mayor o igual que la altura de la capa límite en la formulación del modelo para permitir que la pluma atrapada en la capa estable entre en la capa límite durante las últimas horas de la mañana cuando esta

asciende rápidamente. Los valores de la velocidad de deposición seca son de $v_{di}=0.02$ m/s para SO_2 y $v_{di}=0.002$ m/s para SO_4^{2-} .

Como condiciones iniciales la concentración inicial de los contaminantes de estudio en el ambiente es igual a 0. Se ha dado un valor predeterminado a los siguientes parámetros: velocidad de referencia a 10 metros, dirección del viento, caudal de salida, temperatura ambiente, nubosidad y estabilidad atmosférica en función del día del año y la hora del día.

2.3.3. Tratamiento de los parámetros meteorológicos

A continuación se describirán las ecuaciones acopladas que se utilizaron para el cálculo de la velocidad del viento, la estabilidad atmosférica y los coeficientes de difusión del viento.

2.3.3.1. Turbulencia de origen mecánico del aire

En cualquier fluido, la turbulencia puede definirse como las fluctuaciones continuas y aleatorias de la velocidad, tanto en dirección como en magnitud, que originan movimientos circulares internos (remolinos) que provocan la mezcla del propio fluido o con otros componentes.

La teoría de la turbulencia aplicada a la capa de aire más próxima al suelo se debe a *Sutton* (1953) y *Pasquill* (1962), desarrollada a partir del comportamiento de los fluidos en contacto con superficies sólidas (Figura 2.3.1.), de donde surge la denominada Teoría de la capa límite, propuesta por *Prandtl* (1933) y *Schlichting* (1936).

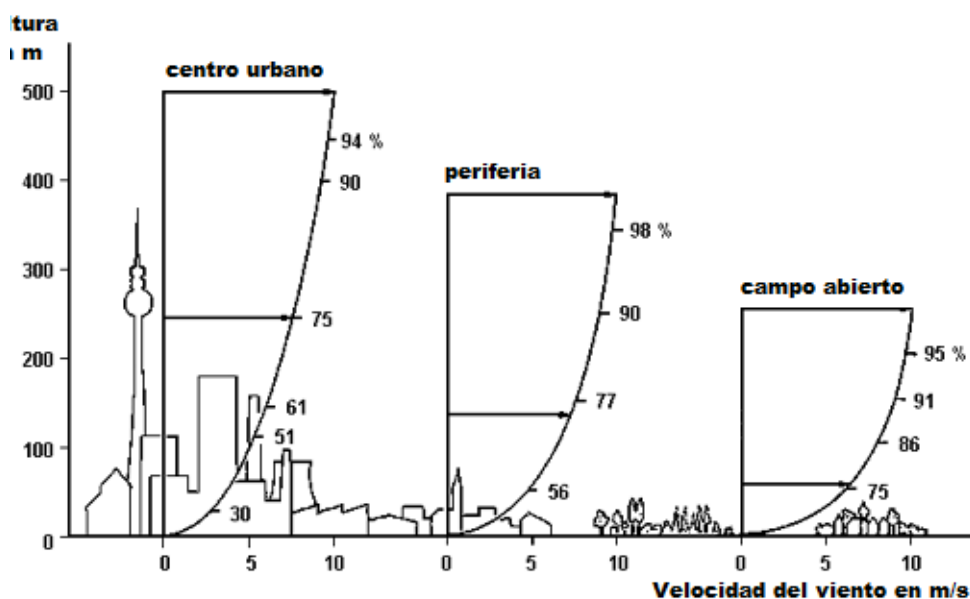


Figura 2.3.1. Perfiles de velocidad del viento en función de obstáculos presentes. Davenport (1936)

- **Velocidad de fricción del aire y velocidad del viento**

La turbulencia de origen mecánico se comprende al analizar el comportamiento del aire que se mueve sobre el suelo (Figura 2.3.1.), observándose la formación permanente de un gradiente de velocidad. Dependiendo de los obstáculos del suelo y de otros parámetros que se comentan más adelante, la velocidad del viento por debajo de los primeros 200-500 metros disminuye progresivamente y es nula en la superficie del suelo.

Según lo anterior, debe aceptarse la actuación de una fuerza de rozamiento, F_R , paralela al suelo y con dirección contraria al movimiento, que es la responsable del efecto de “frenado” del aire provocado por el suelo. Dicha fuerza se transmite verticalmente a toda la capa donde se manifiesta el gradiente de velocidad citado.

Cuando la velocidad es pequeña, y en ausencia de otros efectos, el aire se mueve horizontalmente sin apenas distorsiones, en forma de “láminas”, de ahí la denominación de comportamiento o régimen laminar. En este caso, la fuerza de rozamiento por unidad de área de las “láminas” citadas, F_R/A , denominado esfuerzo cortante, τ , está relacionada con el gradiente vertical de velocidad, du/dz , mediante:

$$\frac{F_R/A}{\rho_a} = \frac{\tau}{\rho_a} = \nu \frac{du}{dz} \quad [2.3.12]$$

donde ρ_a y ν son la densidad y viscosidad cinemática del aire en la zona considerada.

Conforme crece la velocidad, las “láminas” se distorsionan, se rompen y se mezclan, formándose los remolinos característicos de la turbulencia. Entonces la ecuación 2.3.12 se transforma en la siguiente:

$$\frac{F_R/A}{\rho_a} = \frac{\tau}{\rho_a} = (\nu + K_m) \frac{du}{dz} \quad [2.3.13]$$

donde K_m se denomina viscosidad turbulenta o de remolino, cuyo valor es mucho mayor que ν , de manera que esta última llega a ser irrelevante:

$$\frac{F_R/A}{\rho_a} = \frac{\tau}{\rho_a} \approx K_m \frac{du}{dz} \quad [2.3.14]$$

El cociente $(\tau/\rho_a)^{1/2}$ tiene dimensiones de velocidad, y, por ello, recibe la denominación de velocidad de fricción, aumenta u_* , que es un parámetro utilizado para definir otras características fluidodinámicas del aire, comentadas más adelante. Así pues, teniendo en cuenta la ecuación 2.3.13, se verifica:

$$u_*^2 = \frac{\tau}{\rho_a} = (\nu + K_m) \frac{du}{dz} \quad [2.3.15]$$

Conforme aumenta u_* , lo hace también la turbulencia y, por consiguiente, la intensidad de la mezcla asociada a ella.

De la ecuación 2.3.14 y la relación $u_*^2 = \tau/\rho_a$ se puede deducir lo siguiente:

$$K_m = \frac{u_*^2}{du/dz} \quad [2.3.16]$$

Por consiguiente de la ecuación anterior y de la ecuación que define la “ley del muro” 2.3.18 se obtiene:

$$K_m = k u_* z \quad [2.3.17]$$

Esta se llama “ley del muro” se deduce asumiendo que el flujo en la superficie depende solo del esfuerzo cortante y la distancia desde el muro, ecuación 2.3.17.

$$\frac{du}{dz} = \frac{u_*}{kz} \quad [2.3.18]$$

De la ecuación 2.3.15 y la integración de la 2.3.18 se obtiene

$$u_*^2 = kpu \quad [2.3.19]$$

Una relación empírica extensamente usada para el cálculo del perfil de vientos (Figura 2.3.1. y Figura 2.3.2.) es la ecuación de viento potencial, que puede estar expresada de las siguientes formas:

$$u = u_r \left(\frac{z}{z_r} \right)^p \quad [2.3.20]$$

$$u = u_r \frac{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right)}{\ln\left(\frac{z_r}{z_0}\right)} \quad [2.3.21]$$

Donde u_r es la velocidad de referencia a una altura de referencia z_r , en este proyecto se ha tomado la velocidad de referencia a 10 metros de altura. El exponente p es un índice que depende de la clase de estabilidad atmosférica de Pasquill (Tabla 2.3.1.).

Tabla 2.3.1. Valores del exponente p de la expresión potencial de la velocidad del viento en función de las clases de estabilidad atmosférica de Pasquill.

Paquill stability category	Index p
A	0.33
B	0.26
C	0.20
D,E	0.38
F	0.42
G	0.57

z_0 es la longitud o altura de rugosidad, que sirve para definirla influencia de los obstáculos del terreno en el perfil de velocidad y, por consiguiente, en la turbulencia. Se han publicado diferentes valores de z_0 indicados en la Tabla 2.3.2., que fueron propuestos por *Lettau* (1969).

Tabla 2.3.2. Valores de la longitud de rugosidad, z_o , propuestos por *Lettau* (1969).

Tipo de superficie	z_o (m)
Terreno muy llano	10^{-5}
Arena llana	10^{-4}
Terreno con hierba de 1 cm de altura	10^{-3}
Terreno con hierba de 5 cm de altura	10^{-2}
Terreno con hierba fina de 50cm de altura	$5 \cdot 10^{-2}$
Terreno con hierba gruesa de 50 cm de altura	10^{-1}
Bosque	$2 \cdot 10^{-1}$
Ciudad	1-3

En definitiva, la turbulencia de origen mecánico está provocada por la velocidad horizontal del aire, su interacción con el suelo y la geometría, distribución y altura de los obstáculos presentes, como podemos apreciar en las figuras 2.3.1.

2.3.3.2. Estabilidad atmosférica y turbulencia de origen térmico

La turbulencia de origen térmico provoca los movimientos verticales del aire. La turbulencia térmica resulta de la convección debido al calentamiento en superficie por la insolación del suelo. Por tanto, esta turbulencia dependerá tanto de la nubosidad presente como de la radiación solar.

- Criterios para establecer la dinámica atmosférica

La Longitud de Monin-Obukhov, L , es un módulo que contiene parámetros que definen con mayor representatividad los mecanismos mecánico, a través de u^* , y térmico, mediante el denominado flujo vertical de calor, H_s . Siendo ρ_a y C_a la densidad y calor específico del aire y k la constante de von Karman.

$$L = - \frac{\rho C_p T u_*^3}{k g H_s} \quad [2.3.22]$$

El flujo vertical de calor se obtiene mediante un balance de energía en el suelo, considerando positiva la energía recibida del exterior y negativa la emitida.

$$H_s = 0.4(S - 100) \quad [2.3.23]$$

Donde S es la radiación solar entrante, para el cálculo de S se ha utilizado la Figura 2.3.2. Donde la insolación dependerá del mes y la hora del día, en España la hora es GTM+1 en invierno y GTM+2 en verano. Para el cálculo de la radiación se ha aproximado cada curva a la ecuación de una elipse(2.3.22), y se han interpolado los valores. A la radiación resultante se le ha multiplicado un factor de corrección en función de la nubosidad (Tabla 2.3.4.). Donde t_d es la hora del día M es el mes y R el radio de cada elipse (Tabla 2.3.3.). De esta forma se puede conocer el tipo de insolación cualquier día del año a cualquier hora.

$$\frac{(t_d-12)^2}{9} + \frac{(M-5.5)^2}{9} = R \quad [2.3.24]$$

$$Radiación = Rad_{Mayor} - \frac{(Rad_{Mayor}-Rad_{Menor})(R_{Mayor}-R_{Calculada})}{(R_{Mayor}-R_{Menor})} \quad [2.3.25]$$

Tabla 2.3.3. Radio de cada elipse y su radiación correspondiente.

R	Radiacion (W/m ²)
<1/9	>750
1/9	750
45/4	600
32/9	400
8	200
>8	100

Tabla 2.3.4. Radio de cada elipse y su radiación correspondiente.

Cantidad de nubes	%	Multiplicador
0	0	1.07
1	12.5	0.89
2	25	0.81
3	37.5	0.76
4	50	0.72
5	62.5	0.67
6	75	0.59
7	87.5	0.45
8	100	0.23

$$Multiplicador = Mult_{Mayor} - \frac{(Mult_{Mayor}-Mult_{Menor})(\%_{Mayor}-\%_{Calculada})}{(\%_{Mayor}-\%_{Menor})} \quad [2.3.26]$$

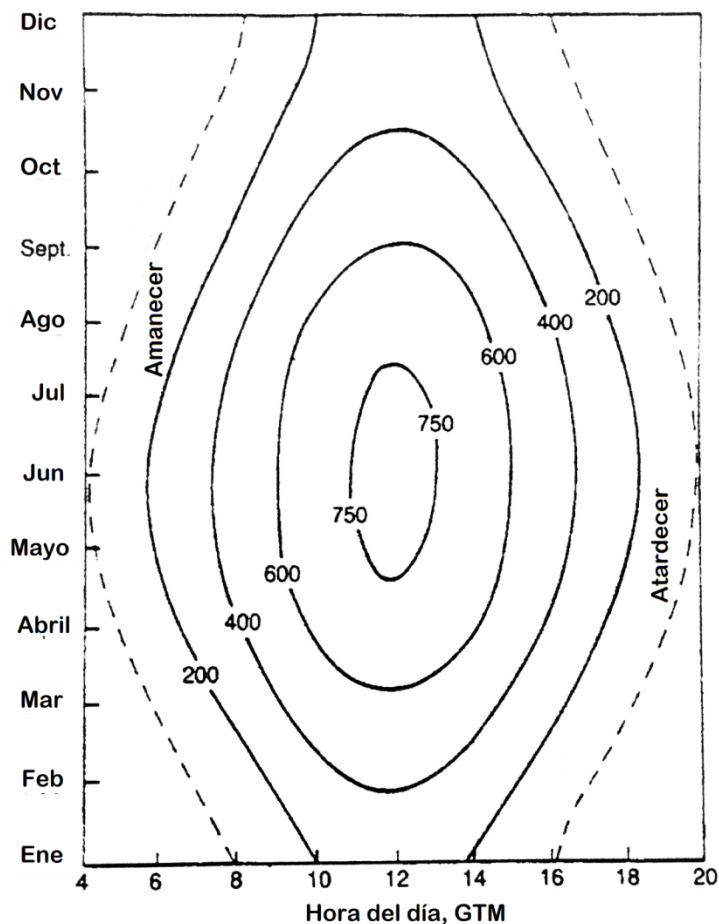


Figura 2.3.2. Radiación solar entrante sin nubosidad (W/m^2), Cambridge (1979).

Con la radiación obtenida se puede conocer si la insolación es fuerte, moderada o ligera en la tabla 2.3.5.

Tabla 2.3.5. Insolación en función de la Radiación Solar Entrante.

Insolación	Radiación Solar Entrante (W/m^2)
Fuerte	>500
Moderada	500-300
Ligera	<300

Existen 7 categorías de estabilidad atmosférica, seis de ellas propuestas por Pasquill (1961 y 1962): tres (A, B, C) para la superadiabática, una (D) para la adiabática y dos (E y F) para la subadiabática, relacionándolas con los intervalos de los gradientes térmicos verticales que se indican en la tabla 2.3.6., donde se incluye también otra clase, G, utilizada por otros autores.

Tabla 2.3.6. Clases de estabilidad según Pasquill, ampliada con la clase G.

CATEGORÍA ATMOSFÉRICA	CLASE	DENOMINACIÓN	GRADIENTE TÉRMICO (K/hm)
Superadiabática	A	Muy inestable	<-1.9
	B	Inestable	-1.9 a -1.7
	C	Ligeramente inestable	-1.7 a -1.5
Adiabática	D	Neutra	-1.5 a -0.5
Subadiabática	E	Ligeramente estable	-0.5 a +1.5
	F	Estable	+1.5 a +4
	G	Muy estable	>+4

Por otro lado, Golder (1972) combinó el inverso de la Longitud de Monin-Obukhov con la longitud de rugosidad superficial, lo que permite delimitar las diferentes clases de estabilidad, tal y como se indica en la figura 2.3.3.

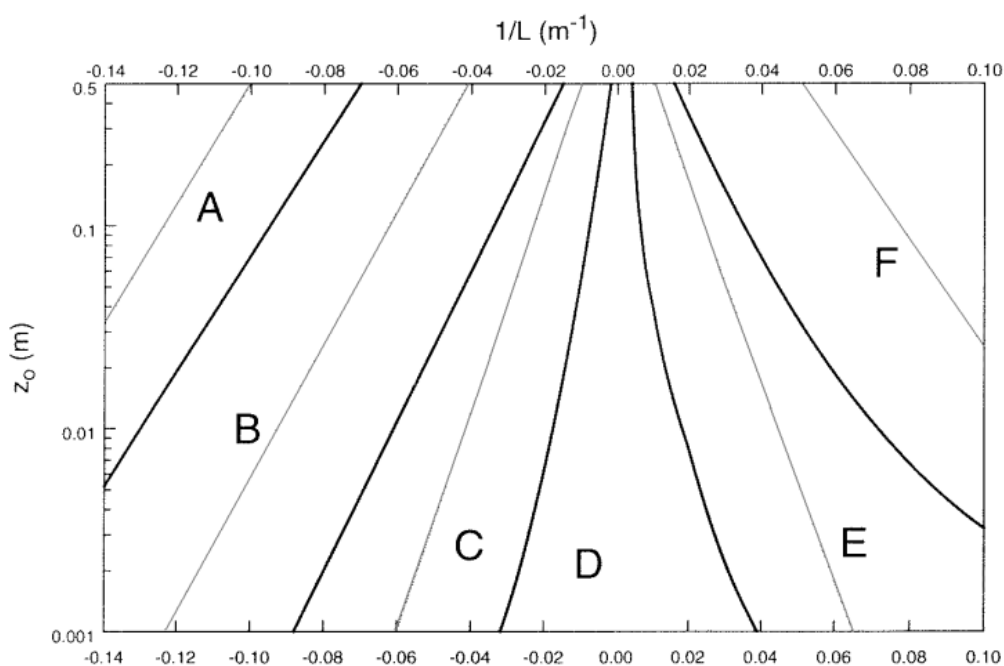


Figura 2.3.3. Clases de estabilidad en función del inverso de la Longitud de Monin-Obukhov y la longitud de rugosidad superficial, según Golder (1972).

Una vez conocido el tipo de Insolación, la nubosidad y el viento de referencia a 10 metros, resultan de gran utilidad procedimientos de predicción sencillos basados en

observaciones y parámetros de fácil medida; en este sentido destaca la metodología dada por Pasquill (1961), tal y como se indica en la tabla 2.3.7.

Tabla 2.3.7. Clases de estabilidad de Pasquill en función de la velocidad del viento de referencia a 10 metros, nivel de insolación y nubosidad

Velocidad viento a 10 m (m/s) (u_r)	Insolación (Nota 1)			Noche (Nota 2)	
	Fuerte	Moderada	Ligera	Cubierto 4/8 o más	Cubierto 3/8 o menos
<2	A	A-B	B	G	G
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Nota 1: Insolación fuerte corresponde a las horas centrales de los días de verano. Ligera corresponde a las horas centrales de los días de invierno

Nota 2: se entiende por noche desde una hora antes de la puesta de sol hasta una hora después de la salida.

El grado de estabilidad atmosférica y la altura de mezcla resultante tienen un importante efecto en las concentraciones de contaminantes en el aire ambiental (*Hanna, 1982*). La combinación de los movimientos verticales y horizontales del aire influye en el comportamiento de las plumas de fuentes puntuales (chimeneas).

2.3.3.3. Coeficientes de difusión de Eddy

La estimación de los parámetros de difusión K_H Y K_V es fundamental para la determinación del proceso de la difusión turbulenta descrita en la ecuación de gobierno descrita por *Jia-Yeong*.

La parametrización del flujo turbulento usando el coeficiente ficticio K está basado en la teoría de las capas mixtas. Por el contrario, en este modelo se los coeficientes de difusión se determinan a partir de parámetros disponibles como la longitud de Monin-Obukhov (L), la velocidad de fricción u_* y la fricción superficial Z_0 .

(a) Coeficientes de difusión verticales de Eddy para condiciones inestables. El transporte de contaminantes en dirección vertical bajo condiciones de convección está determinado por la difusión turbulenta. K_v aumenta con la altura en mayor medida en los niveles bajos, mientras que tiende a cero en la parte más alta de la capa de mezcla (*Crane al, 1976*)

Por encima de la capa superficial, la variación de los coeficientes de Eddy respecto la altura se mantienen inciertos. Existen ciertas limitaciones para K_v , como los puntos muy elevados, en los que este coeficiente tiende a cero.

En la ecuación 2.3.22. se muestran los valores de K_v según las relaciones de z y Z_i :

$$K_v = \begin{cases} w_* Z_i [2.5(kz/Z_i)^{4/3}(1 - 15z/L)^{1/2}] & \text{si } 0 \leq z/Z_i \leq 0.05 \\ w_* Z_i (0.021 + 0.408(z/Z_i) + 1.352(z/Z_i)^2 - 4.096(z/Z_i)^3 + 2.56(z/Z_i)^4) & \text{si } 0.05 \leq z/Z_i \leq 0.6 \\ w_* Z_i [0.2 \exp(6 - 10z/Z_i)] & \text{si } 0.6 \leq z/Z_i \leq 1.1 \\ w_* Z_i (0.001) & \text{si } 0z/Z_i \geq 1.1 \end{cases} \quad [2.3.27.]$$

Donde Z_i es la altura de la capa límite, w^* es la velocidad convectiva, enunciadas en las ecuaciones 2.3.28., 2.3.29., 2.3.30. y 2.3.31.:

$$Z_i = \frac{ku_*}{f} \quad \text{Condiciones neutras} \quad [2.3.28.]$$

$$Z_i = c_z \left(\frac{u_* L}{f} \right)^{1/2} \quad \text{Condiciones estables} \quad [2.3.29.]$$

donde

$$c_z = 0.4 - 0.7$$

Mientras que la 2.3.30. para condiciones estables de noche para vientos altos:

$$Z_i = 2300 u_*^{3/2} \quad [2.3.30.]$$

$$w^* = u_x \cdot \left(-\frac{1}{k} \cdot \frac{Z_i}{L} \right)^{1/3} \quad [2.3.31.]$$

(b) Coeficiente de difusión verticales de eddy para condiciones neutras. La fórmula dada por *Shir* (1973) se enuncia en la ecuación 2.3.32. que se muestra a continuación:

$$K_v = u_* l \text{ (m}^2\text{/s)} \quad (l = kz e^{-\frac{4z}{H}}) \quad [2.3.32.]$$

donde H es la altura de la capa límite.

(c) Coeficiente vertical de difusión de Eddy para condiciones estables. Para condiciones estables, normalmente por la noche existe una mezcla menor entre las distintas capas que en los casos anteriores. *Rao y Snogross* (1979) establecen en la ecuación 2.3.33. la fórmula para calcular K_v en esta situación, sacada a partir de experimentos realizados en condiciones estables en Kansas y Minnesota:

$$K_v = \frac{ku_*z}{0.74+4.7z/L} e^{-b_k\eta} \text{ (m}^2\text{/s)} \quad [2.3.33]$$

donde

$$\eta = (z/L)\mu^{-1/2}$$

$$\mu = u_* / |fL|$$

$$b_k = 0.91$$

(d) Por último queda hablar del coeficiente horizontal de difusión de Eddy, K_H . En el plano horizontal, el transporte debido a la difusión turbulenta es mucho menor que el debido a la advección. Se descubrió que la distribución de la concentración apenas cambia al variar este coeficiente (*McRae et al*, 1982) Se adopta por lo tanto el valor de $50 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ en este modelo.

2.4. MODELOS DE DIFUSIÓN PREVIOS Y SIMPLIFICACIONES

Las emisiones de las sustancias que tienen una densidad inicial mayor que la del aire, originan nubes pesadas, pero la mezcla continuada hace que la densidad de la interfase nube-aire disminuya hasta que las fuerzas gravitatorias son compensadas por las fuerzas de la turbulencia atmosférica. Es aquí cuando las nubes adquieren la dinámica del viento, siendo arrastradas y dispersadas por él. Otra situación posible es que la emisión tenga una densidad menor o igual a la del aire, en cuyo caso se compensaría el efecto de la mayor masa molecular (*San Nicolás y Ballesta, 2003*). Estas últimas, las nubes neutras, son las objeto de estudio en nuestro caso.

Sea cual sea el caso, la nube acaba difundiéndose de forma pasiva, es decir, sin mostrar ninguna dinámica propia que afecte al aire de su alrededor. En este tema, la mayoría de la información bibliográfica se refiere a emisiones a través de chimeneas, y sigue los criterios siguientes:

1. Se considera que el foco de emisión está próximo al suelo
2. Los modelos analíticos para hallar concentraciones de sustancias fugadas en el aire parten de la ecuación general de difusión:

$$\frac{dc}{dt} + u_x \frac{dc}{dx} + u_y \frac{dc}{dy} + u_z \frac{dc}{dz} = k_x \frac{d^2c}{dx^2} + k_y \frac{d^2c}{dy^2} + k_z \frac{d^2c}{dz^2} \quad [2.4.1]$$

en la cual se desprecian las reacciones químicas y el caudal de emisión de la especie i ,

donde:

x, y, z : coordenadas del punto del que se quiere averiguar la concentración.

u_x, u_y, u_z : velocidad del viento en cada dirección, m/s.

k_x, k_y, k_z : coeficientes de difusión de las sustancias en el aire en las direcciones

$x, y, z, m^2/s$.

c : concentración en el punto deseado, $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

t : tiempo, s.

Esta fórmula, debido a su complejidad, se simplifica considerando los vientos laterales constantes y nulos, y los coeficientes de difusión iguales en las tres direcciones:

$$k_x = k_y = k_z = k^* \quad [2.4.2]$$

obteniendo:

$$\frac{dc}{dt} + u_a \frac{dc}{dx} = k^* \cdot \left(\frac{d^2c}{dx^2} + \frac{d^2c}{dy^2} + \frac{d^2c}{dz^2} \right) \quad [2.4.3]$$

3. Se consideran dos tipos de emisiones, las instantáneas o de corta duración, y las continuas y de larga duración.
4. La difusión corresponde a un comportamiento Gaussiano, moviéndose la nube de contaminantes en la dirección del viento, alcanzando valores máximos en el eje central de la trayectorias, presentándose distribuciones normales en las direcciones transversales (y, z).

O.F.T. Roberts (1923) es el primero en analizar el comportamiento del humo para distintos tipos de descargas, proponiendo, para la descarga de una fuente elevada y continua:

$$X(x, y, z) = \frac{Q}{4\pi Kx} e^{\left(-\frac{uy^2}{4Kx}\right)} \cdot \left(e^{-\frac{u}{4Kx}(z-h_c)^2} + e^{-\frac{u}{4Kx}(z+h_c)^2} \right) \quad [2.4.4]$$

donde:

h_c : es altura de la fuente, m.

u : velocidad del viento, m/s.

x : distancia radio a la fuente, m.

y: distancia vertical a la fuente, m.

Q: tasa continua de liberación (Flujo másico (kg/s)

K: coeficiente de difusión ficticio.

X: concentración de la sustancia, $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

*condición de contorno ($t \geq x/u$)

Que para una liberación discontinua, se modifica a:

$$X(x, y, z) = \frac{Q'}{8(\pi t)^{3/2}(K_x K_y K_z)^{1/2}} e^{-\frac{1}{4t}\left(\frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{z^2}{K_z}\right)} \quad [2.4.5]$$

donde:

Q' : masa liberada por unidad de longitud, Kg/ms.

K_x, K_y, K_z : coeficientes de difusión de las sustancias en las direcciones x, y, z, m^2/s .

Para simplificar, se considera que las velocidades del viento en x e y son nulas ($V=W=0$)

También se acepta la igualdad de los coeficientes en dos de las dimensiones, constantes por isotropía ($K_x = K_y$)

El modelo de Sutton parte del propuesto por Roberts, pero sustituye los coeficientes de difusión k^* antes citados, por parámetros de difusión (C), mediante la ecuación 2.4.6.:

$$C^2 = \frac{4k}{u} \quad [2.4.6]$$

e integra la ecuación general simplificada de la difusión, obteniendo:

Para nubes "continuas" cuyo foco emisor se encuentra a cierta altura:

$$X(x, y, z) = \frac{\dot{Q}}{\pi C_y C_z u x^{(2-n)}} \cdot e^{-x^{n-2} \frac{y^2}{C_y^2}} \cdot \left\{ e^{-x^{n-2} \frac{(z-h_c)^2}{C_z^2}} + e^{-x^{n-2} \frac{(z+h_c)^2}{C_z^2}} \right\}$$

[2.4.7]

Para nubes “instantáneas”;

$$X(x, y, z) = \frac{2Q}{\pi^{3/2} C_x C_y C_z (u_a t)^{3/2(2-n)}} \cdot e^{-(u_a t)^{n-2} \left(\frac{x^2}{C_x^2} + \frac{y^2}{C_y^2} + \frac{z^2}{C_z^2} \right)} \quad [2.4.8]$$

donde:

Q: masa fugada del contaminante, g.

\dot{Q} : caudal másico de contaminante, $\mu\text{g/s}$.

t: tiempo desde el inicio de la fuga, s.

n: índice de difusión.

Sutton (1953) discute y propone valores para n y C, que varían según las condiciones atmosféricas de estabilidad y altura de la emisión sobre el nivel del suelo. n varía entre 0 para muy baja turbulencia y 1 para muy poca turbulencia, tomándose 0.25 para la categoría neutra. Los valores más probables para C_x y C_z son 0.21 y 0.12 respectivamente.

Cuando se asumen condiciones isoentrópicas, los parámetros de difusión pasan a ser, según la ecuación 2.4.9.:

$$C_x = C_y = C_z = C \quad [2.4.9]$$

En la tabla 2.4.1. se muestran los valores dados por Sutton:

Tabla 2.4.1. Parámetros meteorológicos para el modelo de Sutton (*O.G. Sutton, 1947*)

Altura de emisión (m)	n	$C_y(m^{1/8})$	C	$C_z(m^{1/8})$
0	0.25	0.21		0.12
10	0.25	0.21		0.12
25	0.25		0.12	
30	0.25		0.10	
75	0.25		0.09	
100	0.25		0.07	

Pasquill (1961, 1962, 1965) formula otra ecuación general de dispersión, una modificación de la ecuación de Sutton, conocida como el modelo de Pasquill. Para un flujo continuo con emisor elevado, la concentración en el eje de la nube es:

$$C_c = \frac{2.8 \times 10^{-3} Q F_1}{u d h_p \theta} \quad [2.4.10]$$

con

$$F_1 = e^{-2.303 \left(\frac{h_c}{h_p} \right)^2} \quad [2.4.11]$$

donde:

C_c : concentración a nivel del suelo en el eje de la nube para fuente elevada, unidades/m³.

Q : tasa másica de liberación, unidades/min.

d : distancia en la dirección del viento, km.

u : velocidad del viento, m/s.

h_c : altura de la chimenea, m.

h_p : propagación vertical, m.

θ : dispersión lateral para una liberación corta, grados.

Los parámetros θ y h son funciones de la distancia y la estabilidad atmosférica, y pueden obtenerse de la gráfica 2.4.1. y de la tabla 2.4.2., según estabilidades de Roberts y distancia a la fuente:

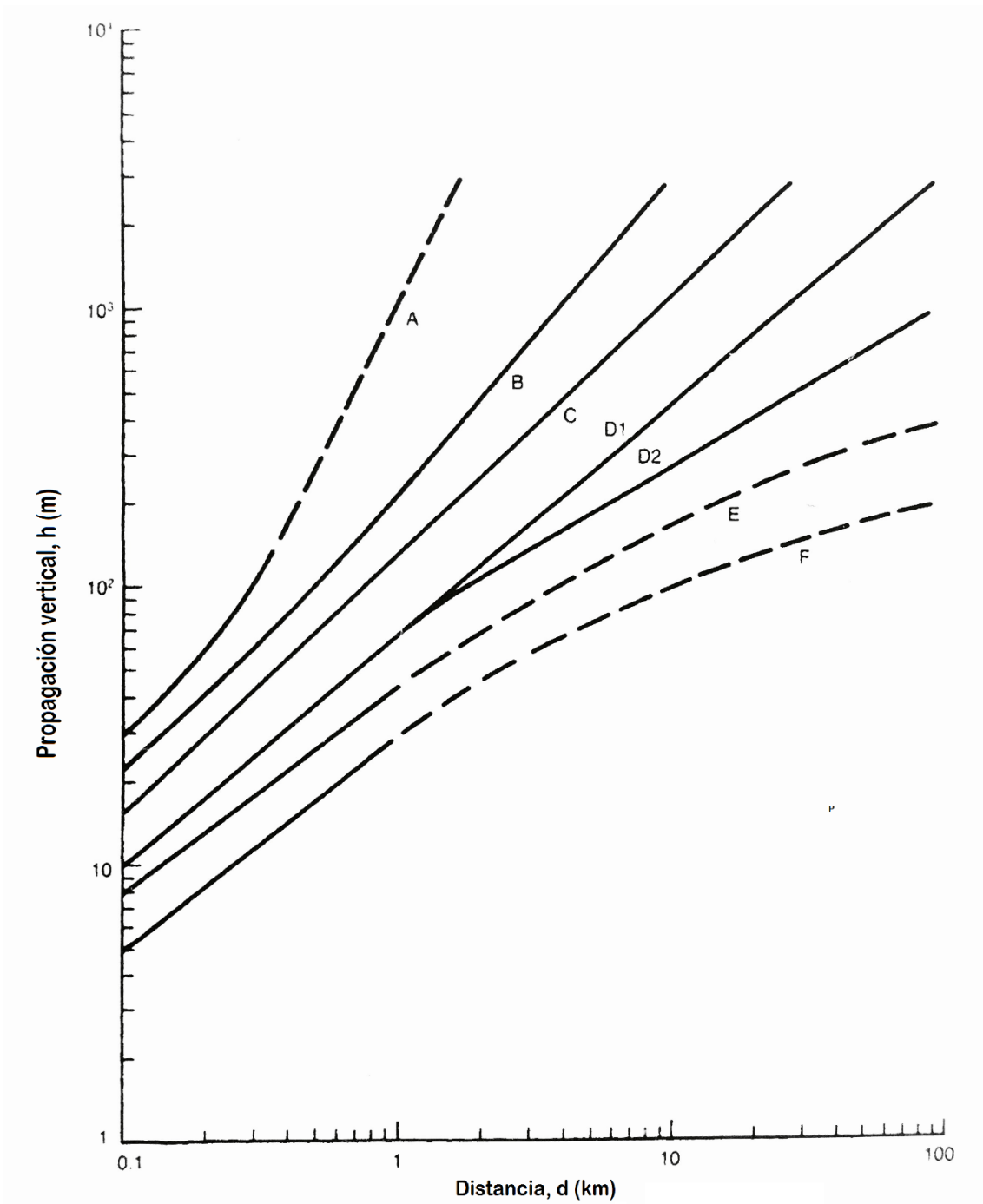


Figura 2.4.1. Propagación vertical para la ecuación de Pasquill (Pasquill, 1961)

Tabla 2.4.2. Parámetros meteorológicos para el modelo de Pasquill (Pasquill, 1961)

Dispersión lateral θ (grados)

Categorías de estabilidad de Pasquill	d = 0.1 km	d = 100 km
A	60	20
B	45	20
C	30	10
D	20	10
E	15	5
F	10	5

El modelo de Pasquill-Gifford ha sido el más utilizado, debiéndosele a Gifford (1961) la obtención de los coeficientes de dispersión ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$) en las direcciones x, y y z. Estos están relacionados con los usados en Sutton mediante:

$$\sigma_x^2 = \frac{c^2}{2} (ut)^{2-n} \quad [2.4.12]$$

Expresiones similares son utilizadas para el resto de ejes, y se denominan desviaciones estándar o coeficientes de dispersión, en dirección a favor, en contra y verticalmente al viento (x,y,z) en metros.

La ecuación para flujo continuo desde una fuente elevada, pasa a ser:

$$X(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z u} \cdot e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} \cdot \left\{ e^{-\frac{(z-h_c)^2}{2\sigma_z^2}} + e^{-\frac{(z+h_c)^2}{2\sigma_z^2}} \right\} \quad [2.4.13]$$

Los parámetros meteorológicos σ_y y σ_z para flujos continuos, cuyos valores son detallados en profundidad por D.B. Turner (1970), se pueden obtener de las siguientes gráficas (2.4.2. y 2.4.3.), basadas en el trabajo de Gifford (1961):

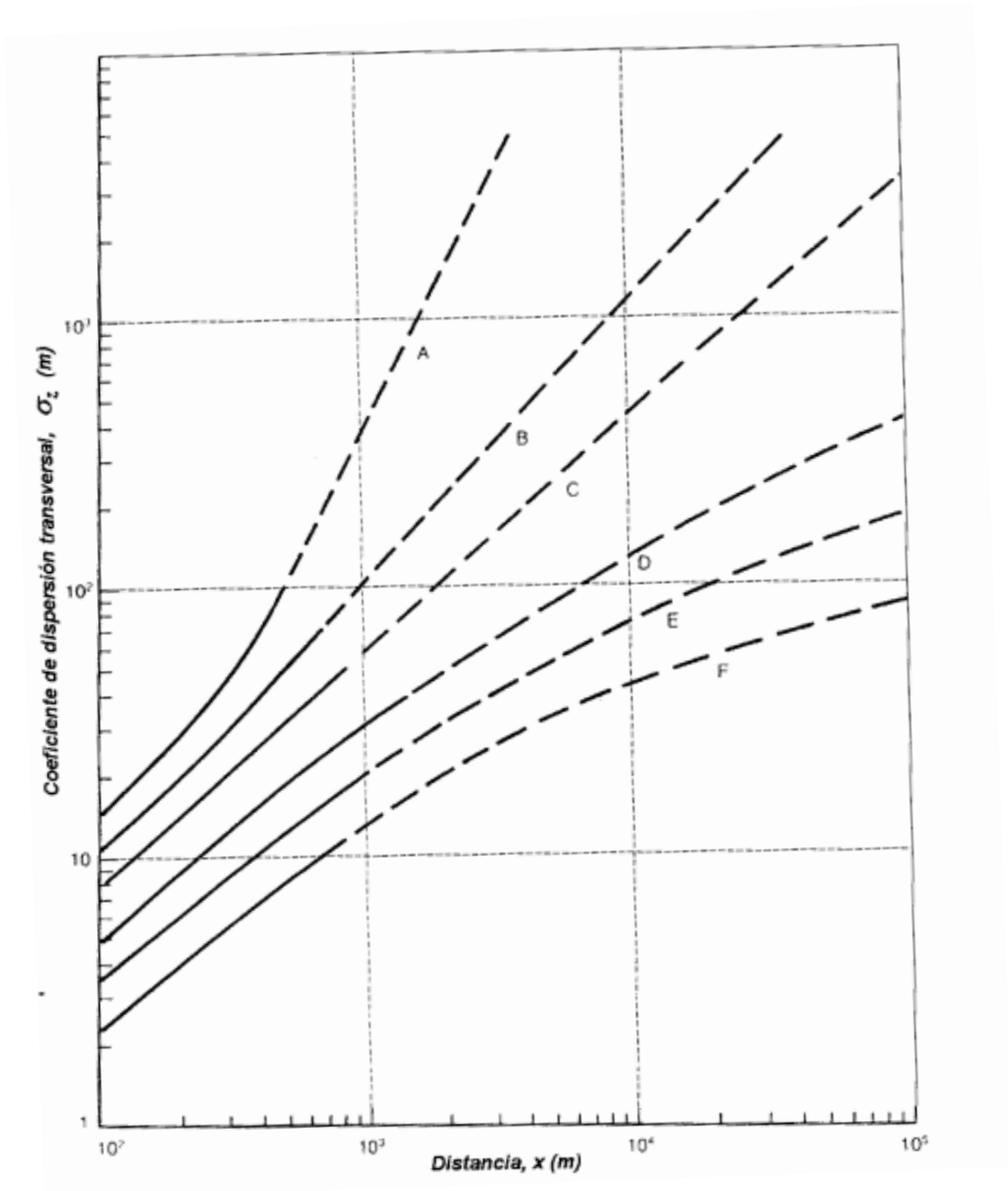


Figura 2.4.2. Parámetro meteorológico vertical σ_z para las ecuaciones de Pasquill-Gifford con fuente continua. (D.B. Turner, 1970). A – F según estabilidad atmosférica de Pasquill.

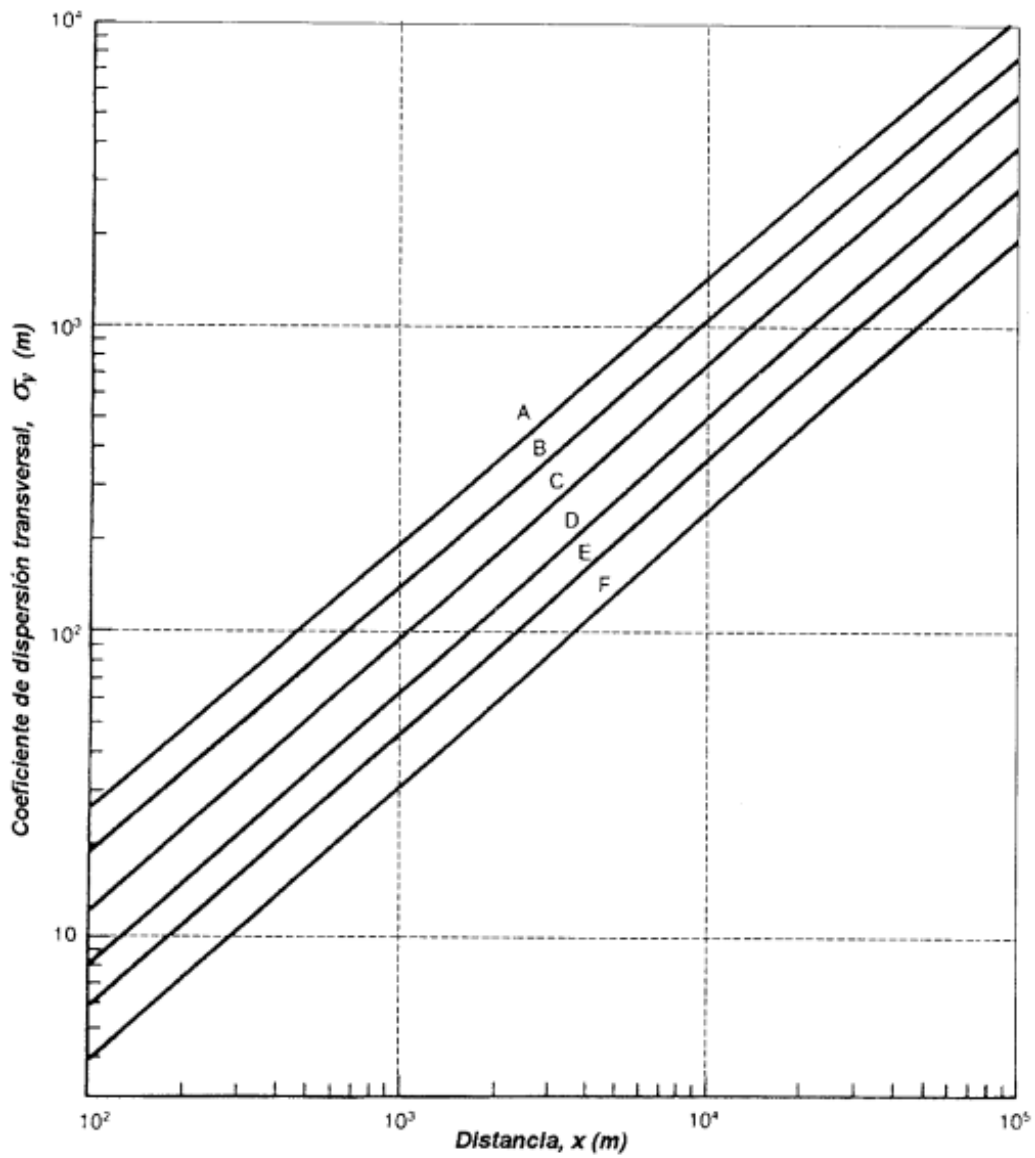


Figura 2.4.3. Parámetro meteorológico transversal σ_y para las ecuaciones de Pasquill-Gifford con fuente continua: coeficiente de dispersión en contra del viento (D.B. Turner, 1970). A-F según estabilidad atmosféricas de Pasquill.

A la hora de calcular las concentraciones usando este método, hemos cogido valer medios para tramos de 500 metros, atendiendo también a las distintas estabilidades.

Para flujo instantáneo a nivel del suelo, midiendo x, y, z desde las coordenadas de emisión la ecuación pasa a ser:

$$X(x, y, z, t) = \frac{2\dot{Q}}{(2\pi)^{3/2}\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{(x-ut)^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right)} \quad [2.4.14]$$

La concentración dada en la fórmula 2.4.14. es tan solo válida si la duración de la fuga es mayor que el tiempo resultado de dividir la distancia desde la emisión al punto de medida entre la velocidad del viento (x/u).

Los valores de los coeficientes σ_x, σ_y y σ_z para el caso de fugas instantáneas es dado en las ecuaciones 2.4.15., 2.4.16 y 2.4.17. dadas por *Slade* (1968):

Para categoría de inestables: $\sigma_x = \sigma_y = 0.14x^{0.92}; \sigma_z = 0.53x^{0.73}$ [2.4.15]

Para categoría de neutras: $\sigma_x = \sigma_y = 0.06x^{0.92}; \sigma_z = 0.15x^{0.70}$ [2.4.16]

Para categoría de muy estables: $\sigma_x = \sigma_y = 0.024x^{0.89}; \sigma_z = 0.05x^{0.61}$ [2.4.17]

Se puede observar que son inexactas, ya que no hace distinciones dentro de cada categoría.

CAPÍTULO 3

DESARROLLO EXPERIMENTAL

3.1. MÉTODO DE SIMULACIÓN POR REDES (MESIR)

El método de simulación por redes (MESIR) es una herramienta que permite estudiar cualquier proceso que pueda definirse mediante un modelo matemático. El procedimiento consta de dos fases: en primer lugar la elaboración de un modelo en red o circuito eléctrico equivalente del proceso y posteriormente, la simulación del proceso obteniendo la solución del modelo en red mediante el programa adecuado de resolución de circuitos eléctricos.

El modelo matemático de este proyecto es el desarrollado en los fundamentos teóricos (capítulo 2).

3.2. MODELO EN RED

Un modelo en red se considera equivalente a un determinado proceso cuando las ecuaciones del modelo matemático discretizado y las ecuaciones del modelo en red para un elemento del volumen correspondiente a variables análogas coinciden.

La técnica consiste en reticular el espacio en elementos de volumen o celdas elementales. Al aplicar a estas celdas de tamaño finito las ecuaciones diferenciales, se obtienen un conjunto de ecuaciones diferenciales en diferencias finitas. Una vez que se ha establecido la correspondencia entre variables dependientes del problema y variables eléctricas, los resultados de la simulación pueden interpretarse en términos del proceso que se modela. La asociación de celdas según la geometría del problema configura el modelo en red correspondiente a todo el medio finito. El modelo será más preciso cuanto mayor sea el número de celdas.

En el modelo desarrollado en este proyecto se ha diseñado cada celda en tres dimensiones, siendo estas cúbicas, y cada celda se compone de 6 resistencias, 8 generadores y un condensador, como se puede observar en la Figura 3.2.1.

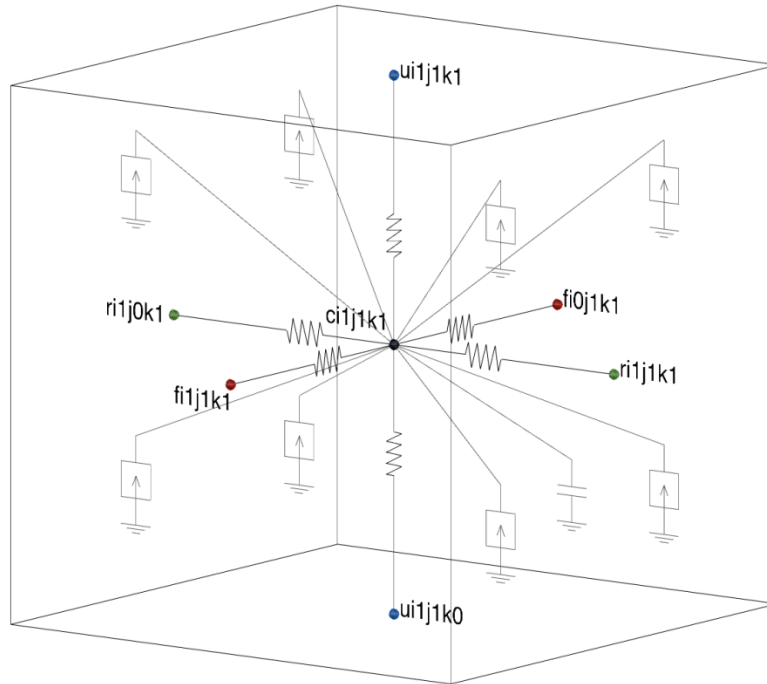


Figura 3.2.1. Celda cúbica del mallado del modelo en red.

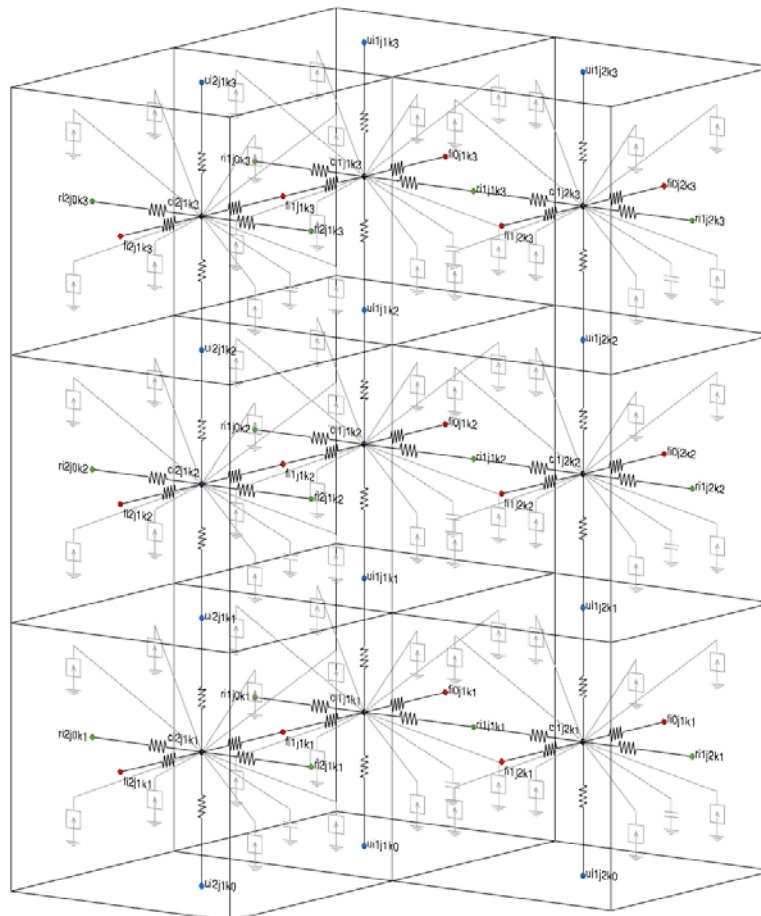


Figura 3.2.2. Mallado del modelo en red.

3.3. COMPONENTES DEL MODELO EN RED

A la red se le asocia un conjunto de flujos que obedecen a una ley de balance local y un conjunto de fuerzas que satisfacen la condición de unicidad. Las leyes de Kirchhoff establecen relaciones entre flujos y fuerzas por separado, pero no expresan ningún tipo de relación de flujos y fuerzas entre sí. Las relaciones entre el par conjugado flujo- fuerza se conocen como ecuaciones constitutivas y definen los elementos del circuito que expresan características de cada proceso. Las relaciones constitutivas se pueden establecer entre las variables de un par flujo-fuerza, se denominan monpuertas.

3.3.1. Monpuertas pasivas

Los elementos pasivos no generan potencia (o bien la disipan en una transformación energética o bien almacenan y/o la entregan a la red), constituyen las monpuertas pasivas. En función de la relación existente entre las variables que obedecen a la ley de corrientes de Kirchhoff LCK y a la ley de voltajes de Kirchhoff LVK, existen las siguientes monpuertas pasivas:

(a)- **Monpuerta resistiva:** es un elemento de circuito asociado a una relación entre las derivadas temporales de las variables flujo y fuerza de una misma rama mediante una función independiente del tiempo que es la resistencia R

$$\frac{dX(t)}{dt} = \frac{RdJ(T)}{dt}$$

Una monpuerta resistiva es lineal si también lo es la relación entre las variables X(t) y J(t), en este caso R es una constante. Su acción es instantánea y carecen de memoria. Las monpuertas resistivas no lineales se definen a través de las funciones:

$$J(t) = Fr^{-1}(X) \quad X(t) = Fr(J)$$

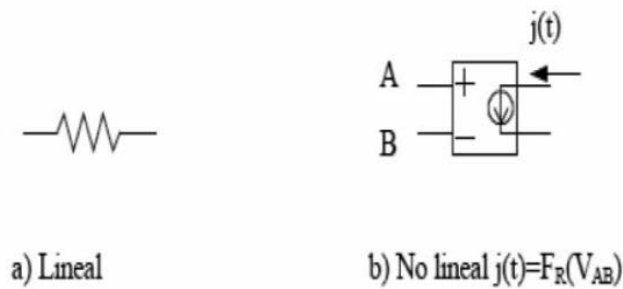


Figura 3.3.1.a. Representación de monpuertas resistivas. M.Cánovas, F.Alhama, I.Alhama, M.Alcaraz(2012)

(b) - **Monopuerta capacitiva:** es un elemento de circuito asociado a una relación entre la variable flujo y la derivada temporal de la variable fuerza en una misma rama mediante una función independiente del tiempo que es la capacidad C.

$$J(t) = CdX(t)/dt$$

En las monopuertas capacitivas se produce algún tipo de almacenamiento sin pérdidas. Su estado tiene en cuenta todas las operaciones hechas con anterioridad, de manera que tiene memoria.

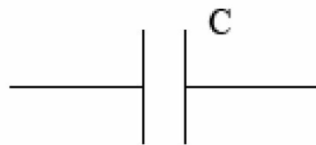


Figura 3.3.1.b. Representación de monopuertas capacitiva. M.Cánovas, F.Alhama,I.Alhama, M.Alcaraz (2012).

(c) - **Monopuerta inductiva:** es un elemento de circuito asociado a una relación entre la variable fuerza y la derivada temporal de la variable flujo de una misma rama mediante una función independiente del tiempo que es la inductancia L

$$X(t) = LdJ(t)/dt$$

Al igual que en la monopuerta capacitiva, se produce un almacenamiento de energía sin pérdidas y su estado tiene memoria.



Figura 3.3.1.c. Representación monopuerta inductiva lineal. M.Cánovas, F.Alhama, I.Alhama,M.Alcaraz (2012).

3.3.2. Monopuertas activas

Las fuentes de tensión y corriente son elementos activos que generan potencia según una determinada ley, son las monopuertas activas. En ellas se produce una aportación o extracción de energía al sistema. Hay tres tipos de monopuertas activas:

(a)- **Fuentes constantes:** se definen con las expresiones $F_j(J) = 0$ y $F_x(X) = 0$ en fuentes de flujo y fuerza respectivamente. Tienen asignado un sentido que indica por donde fluye la energía. Corresponden a pilas o generadores de corriente constante.

(b)- **Fuentes dependientes del tiempo:** la relación constitutiva entre las variables tiene la forma $X=X(t)$ y $J=J(t)$ según se trate de fuentes fuerza o flujo. También tiene asignado un sentido que indica la dirección en que fluye la energía.

(c)- **Fuentes controladas:** son monopuertas especiales asociadas a relaciones constitutivas entre variables (conjugadas o no) expresadas mediante cualquier función que no contiene explícitamente el tiempo. Se trata de elementos de entradas múltiples con una única salida que corresponde a un flujo o una fuerza que depende de otros flujos o fuerzas de distintas ramas y nudos, del mismo o diferente circuito. Estas fuentes permiten especificar acoples energéticos de distinto tipo.

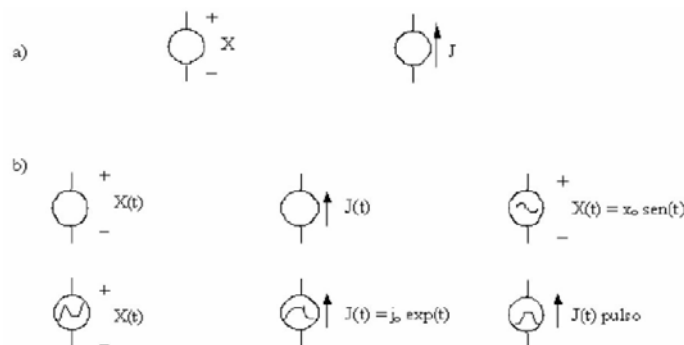


Figura 3.3.2. Representación de monopuertas activas: a) fuentes constantes, b) fuentes dependientes del tiempo. M. Cánovas, F. Alhama, I. Alhama, M. Alcaraz (2012)

3.4. EL MESIR COMO MÉTODO NUMÉRICO

En el MESIR, el punto de partida es un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales (EDP) espacio-temporales. La única transformación que se hace en las ecuaciones es la discretización de la variable espacial que permite establecer la red eléctrica equivalente.

El modelo en red es la forma que se le da al modelo matemático para poder introducirlo en el software de resolución de circuitos eléctricos NGSPICE, que resuelve las ecuaciones de la red y proporciona la solución numérica del modelo matemático.

La elaboración del modelo en red implica la reticulación espacial, pero no temporal. Se parte de un sistema EDP cuya reticulación espacial las convierte en ecuaciones diferenciales ordinarias en el tiempo, que son las correspondientes al circuito de una celda elemental. La diferencia esencial es que en los métodos numéricos ordinarios se realiza una reticulación simultánea de las dos variables independientes espacio y tiempo, mientras que en el MESIR la reticulación es sucesiva: primero se realiza una etapa de reticulación espacial que da como resultado el modelo en red y en segundo lugar, una reticulación temporal que realiza el software NGSPICE durante el proceso de simulación.

3.5. SIMULACIÓN MEDIANTE EL PROGRAMA NGSPICE

Una vez que se ha traducido el modelo a un lenguaje NGSPICE puede interpretarse, el programa simula el proceso y arroja los resultados. La simulación está estructurada en cinco subprogramas principales (entrada, organización, análisis, salida y utilidades) que interactúan entre ellos a través de una estructura de datos. El subprograma de entrada lee el archivo, construye una estructura de datos y chequea el circuito. El de organización construye las estructuras adicionales de datos que serán requeridas en el programa de análisis. El subprograma de salida genera y organiza en la memoria central los resultados solicitados por el usuario en forma tabulada o gráfica.

El subprograma análisis es la parte más importante del programa de simulación. Ejecuta los análisis del circuito requeridos según las indicaciones del archivo de entrada. La información resultante se almacena en la memoria central para su posterior procesamiento en los archivos de salida.

En el proceso de simulación se obtiene la solución numérica de la representación

matemática del modelo en red, esta representación contiene: las ecuaciones matemáticas de los diferentes tipos de monopuertas, solución de ecuaciones lineales, solución de ecuaciones no lineales e integración numérica. *Sanchez-Perez, JF et al (2016)*.



Figura 3.5.1. Diagrama de bloques del programa de simulación de circuitos NGSPICE. *Sánchez-Pérez(2012)*.

El uso cada vez más extendido de NGSPICE demuestra su capacidad para el tratamiento de una extensa variedad de problemas en simulación de circuitos, resolviendo respuesta en corriente continua, respuesta transitoria en el tiempo y análisis de Fourier en el dominio de la frecuencia y análisis de pequeña señal en corriente alterna y distorsión. *Sanchez-Perez, JF et al (2016)*.

Se muestran a continuación una serie de imágenes procedentes del modelo en matlab. En la primera imagen, la 4.1.1., aparece la parte del código donde introducimos los datos de día, mes y hora de la emisión, lo que nos dará unos resultados de concentraciones además de decirnos la isolación en la que se encuentra. Además, según el mes escogido, se establece una temperatura según la hora corresponda a día o noche así como un viento de referencia:

CAPÍTULO 3: DESARROLLO EXPERIMENTAL

```
65
66 % Condiciones y posición de emision
67 - continua=1;
68 % Continua = 1 es emisión continua
69 % Continua = 0 es emisión discontinua TEMI horas
70 - cambiouni=1E5; % Cambio de unidades para aumentar velocidad en el cálculo y perdiendo precisión
71 - valorlimiteemi=3600; % Limite de emisión en mg/Nm³ ug/Nm³ o ng/Nm³
72 - valorlimiteemision=valorlimiteemi*cambiouni; % Cambio de unidades en el valor límite de emisión
73 - Caudal=1; %Nm³/h Valor medio de caudal
74 - QQ=valorlimiteemision*Caudal/3600; % en g/s o mg/s o ug/s. El valor que ponga de cantidad es el que devuelve el programa: Introducir preferentemente
75 %QQ=0.0001; % en g/s o mg/s o ug/s. EL valor que ponga de cantidad es el que devuelve el programa: Introducir preferentemente en ug/s
76
77 % Datos emision discontinua
78 - TEMI=1; % Tiempo de emisión en horas
79 - nuemroemisiones=1; % Repetición de la emisión
80 - TEMIN=24-TEMI; % Tiempo sin emisión en horas
81
82 - TEMII=TEMI*3600;
83 - TEMINI=TEMIN*3600;
84 - QZ=num2str(QQ,nundem);
85 - TEMIZ=num2str(TEMII,nundem);
86 - TEMINZ=num2str(TEMINI,nundem);
87
88 % Posición de la chimenea
89 - posx=50; % Posición de la chimenea en la coordenada x
90 - posy=round(distanciay/2); % Posición de la chimenea en la coordenada y. Si se quiere en el centro poner "round(distanciay/2)"
91 - posz=9; % Posición de la chimenea en la coordenada z
92 - posi=round(posx/dx);
93 - posj=round(posy/dy)+round(ncyg/2); % Si se quiere en el centro poner "+round(ncyg/2)"
94 - posk=round(posz/dz);
95
```

Imagen 4.1.1. Parte del código donde se escriben los datos de entrada.

```
193
194 % DATOS CAMBIANTES EN LA SIMULACIÓN
195 - mesin=11; % Mes del año de inicio
196 - dia=20; % Día del mes
197 - tti=24; % Hora en sistema universal (GMT) de inicio (horas) España: invierno GTM+1 verano GTM+2
198
199 % DATOS DE POSICIÓN
200 - Long=-0.019774580425096; % Longitud (rad). Murcia=-0.019774580425096 rad. Cartagena=-0.017138155870203
201 - Lat=0.662928409785006; % Latitud (rad). Murcia=0.662928409785006 rad. Cartagena=0.656941930450666
202
203 % TEMPERATURAS DEL AÑO POR MESES
204 %Temperatura de día
205 - T(1)=20; % Temperatura (°C)
206 - T(2)=20.1; % Temperatura (°C)
207 - T(3)=21.5; % Temperatura (°C)
208 - T(4)=18.2; % Temperatura (°C)
209 - T(5)=27.3; % Temperatura (°C)
210 - T(6)=33; % Temperatura (°C)
211 - T(7)=34.9; % Temperatura (°C)
212 - T(8)=34.1; % Temperatura (°C)
213 - T(9)=32.7; % Temperatura (°C)
214 - T(10)=27.5; % Temperatura (°C)
215 - T(11)=21.2; % Temperatura (°C)
216 - T(12)=17.2; % Temperatura (°C)
217
218 % Temperatura de noche
219 - TNOCHE(1)=7.9; % Temperatura (°C)
220 - TNOCHE(2)=8.4; % Temperatura (°C)
221 - TNOCHE(3)=8.2; % Temperatura (°C)
222 - TNOCHE(4)=12; % Temperatura (°C)
223 - TNOCHE(5)=14.2; % Temperatura (°C)
```

Imagen 4.1.2. Parte del código donde se establece el tipo de emisión y la posición de la chimenea.

En la imagen 4.1.2., corresponde a las líneas de código de Aircon donde se establece si la emisión es continua o discontinua, así como la posición de la chimenea en las tres dimensiones. En la imagen 4.1.3., el mallado del campo de simulaciones, que consta de diferentes mallados, uno preciso, cercano al foco, y con mayor distancia entre celdas:

```

34
35     % Celdas pequeñas
36 -   distanciax=750;
37 -   distanciay=800;
38 -   distanciaz=30;
39 -   ncx=15;
40 -   ncy=10;
41 -   ncz=10;
42 -   dx=distanciax/ncx;
43 -   dy=distanciay/ncy;
44 -   dz=distanciaz/ncz;
45 -   DXZ=num2str(dx,nundem);
46 -   DYZ=num2str(dy,nundem);
47 -   DZZ=num2str(dz,nundem);
48
49     % Celdas grandes
50 -   Relaceldasx=20; % Relación entre celdas grandes y pequeñas en x
51 -   Relaceldasy=4; % Relación entre celdas grandes y pequeñas en y
52 -   aumdistx=5; % Número de veces que aumenta distancia en las celdas grandes x
53 -   dxgrandes=dx*Relaceldasx;
54 -   ncxg=round(aumdistx*distanciax/dxgrandes);
55 -   ncyg=4; % No tocar. Poner un número par
56 -   nczg=3; % No tocar
57 -   %dxgrandes=dx*ncxg;
58 -   dygrandes=dy*Relaceldasy;
59 -   %distotaly=distanciay+(dygrandes*ncyg);
60 -   altura=100; % Altura de la capa límite
61 -   dzgrandes=(altura-distanciaz)/nczg;
62 -   DXGRANDESZ=num2str(dxgrandes,nundem);
63 -   DYGRANDESZ=num2str(dygrandes,nundem);
64 -   DZGRANDESZ=num2str(dzgrandes,nundem);

```

Imagen 4.1.3. Mallado, celdas y distancias.

El viento es calculado por el programa en cada uno de los tres ejes a partir del viento de referencia, para cada una de las celdas, lo que añade gran precisión al modelo.

El viento que aquí se calcula es el denominado “viento potencial”, que se obtiene a partir del viento de referencia y que es el que siempre, tanto en las simulaciones de nuestro modelo como en los modelos previos cuando hagamos la comparación de resultados.

El programa NGSpice es el encargado de ejecutar el circuito, y realiza la lectura de los resultados. La ejecución del programa NGSpice termina con la creación de una matriz formada por las concentraciones obtenida en cada una de las celdas del modelo, que junto con las gráficas, nos dan una idea bastante precisa de los niveles de concentración en el mapa.

El software permite seleccionar el tipo de gráfica de concentraciones que queremos visualizar al final de la ejecución de la simulación, en dos o tres dimensiones, manteniendo fijas algunas de las coordenadas según permiso.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

4.1. RESULTADOS SIMULACIONES Y GRÁFICAS

Tras el diseño del programa de predicción de concentraciones en un modelo de tres dimensiones en Matlab, llamado Aircon, y el fin de la etapa 2, comenzamos la etapa 3, consistente en la simulación de modelos de concentración de SO_2 a alturas de 3 y 9 metros, vertidos desde una supuesta chimenea de 9 metros de altura que produce una emisión continua de $1 \mu\text{g/s}$, en diferentes situaciones de vientos, insolaciones, fecha y hora de análisis, temperaturas y nubosidades. Las mediciones se hacen una hora después de comenzar la emisión.

Para ello se ha establecido un escenario en tres dimensiones, de 5.000 metros en el eje X, 2.200 metros en el eje Y y 100 metros en el Z, que representan longitud, latitud y altura respectivamente. El mallado es diferente en cada eje, teniendo mayor número de divisiones en las inmediaciones del foco emisor, que se encuentra centrado en el eje Y, a 50 metros del origen en el eje X y a una altura de 9 metros en Z. Este mallado, de 750 metros, 800 metros y 30 metros en los ejes X, Y y Z, con divisiones cada 50, 30 y 3 metros respectivamente, hace que los resultados sean de mayor precisión en la periferia de la chimenea, a la vez que optimiza la obtención de resultados a la hora de poner el programa en funcionamiento. La figura 4.1.1., que se presenta a continuación, da una idea del escenario representado en nuestro modelo, apreciándose las distintas divisiones antes comentadas:

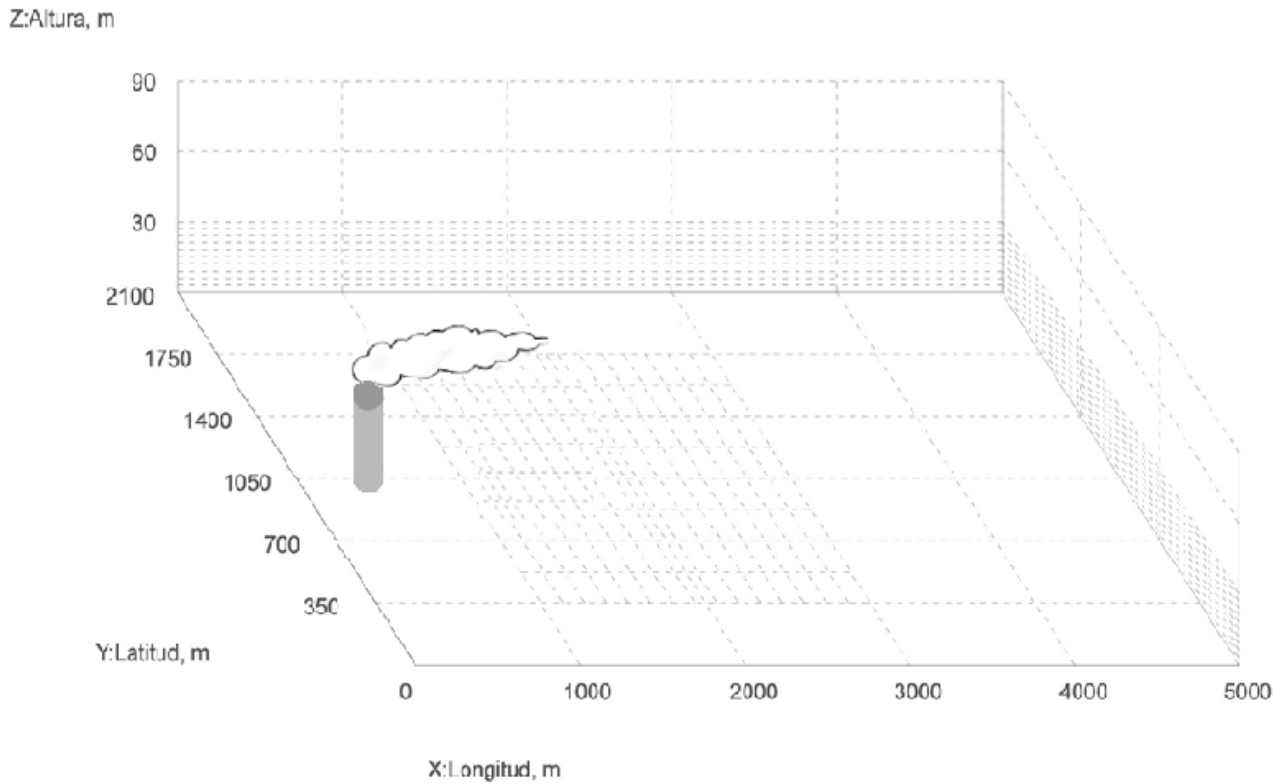


Figura 4.1.1. Escenario para las simulaciones

Se han establecido las condiciones de estabilidad atendiendo al modelo de Pasquill, diferenciando entre estables, E y F, neutras, C y D e inestables, A y B. En el programa se han diferenciado entre 6 insolaciones (I) diferentes, numeradas del 1 al 6, que dependen del tipo de insolación (alta, media, baja o inexistente) y viento de referencia (u_r) en el escenario. Las insolaciones en el lenguaje del programa son:

- Insolación 1, insolación diurna y fuerte.
- Insolación 2, insolación diurna y moderada.
- Insolación 3, insolación diurna y ligera.
- Insolación 4, de noche (sin insolación), con nubosidad de 4/8 o más.
- Insolación 5, de noche (sin insolación), con nubosidad de 3/8 o menos.

4.1.1. Condiciones estables

Para las condiciones estables se han elegido dos casos. El primero, para la estabilidad E o moderadamente estable, se tiene un viento de referencia de 4 m/s, un 20 de noviembre a la 1 am de la madrugada hora española, a una temperatura de 9.7 °C y con una nubosidad de 0.2 en la escala de 0 a 1. Los resultados de las concentraciones de las simulaciones se muestran a continuación en las gráficas 4.1.2., 4.1.3., 4.1.4. y 4.1.5., en dos y tres dimensiones:

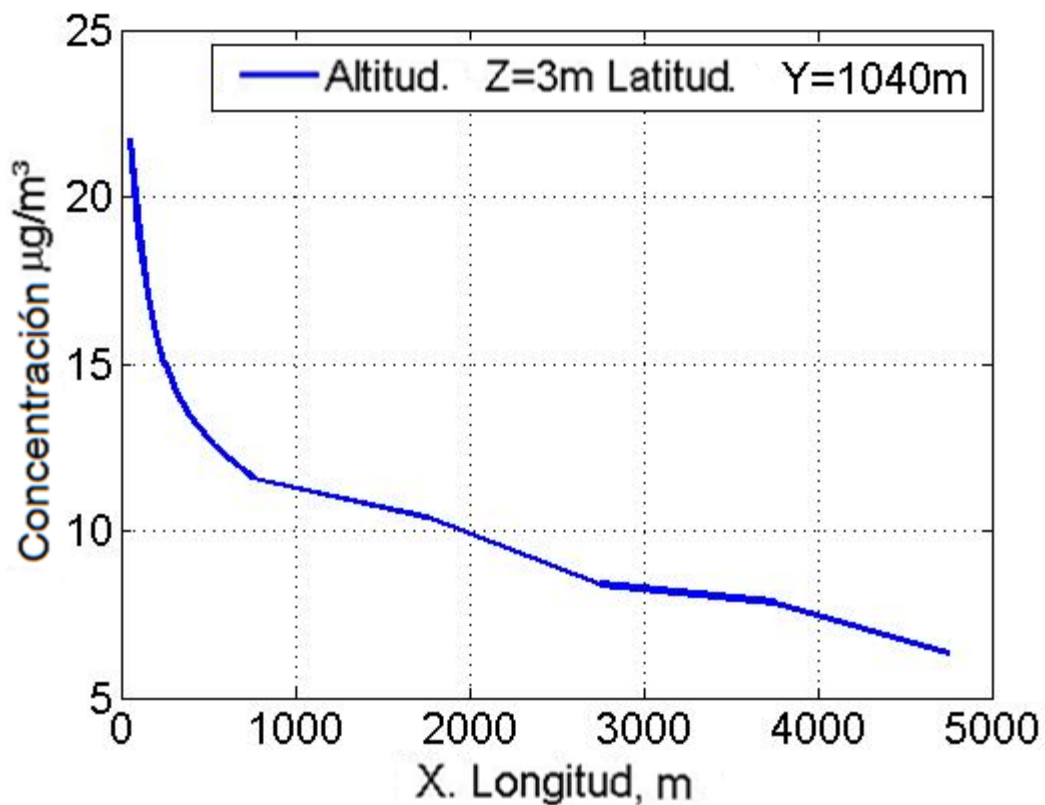


Figura 4.1.2. Concentración de contaminantes SO_2 según distancia en el eje X, con $Z=3\text{ m}$ e $Y=1040\text{ m}$.

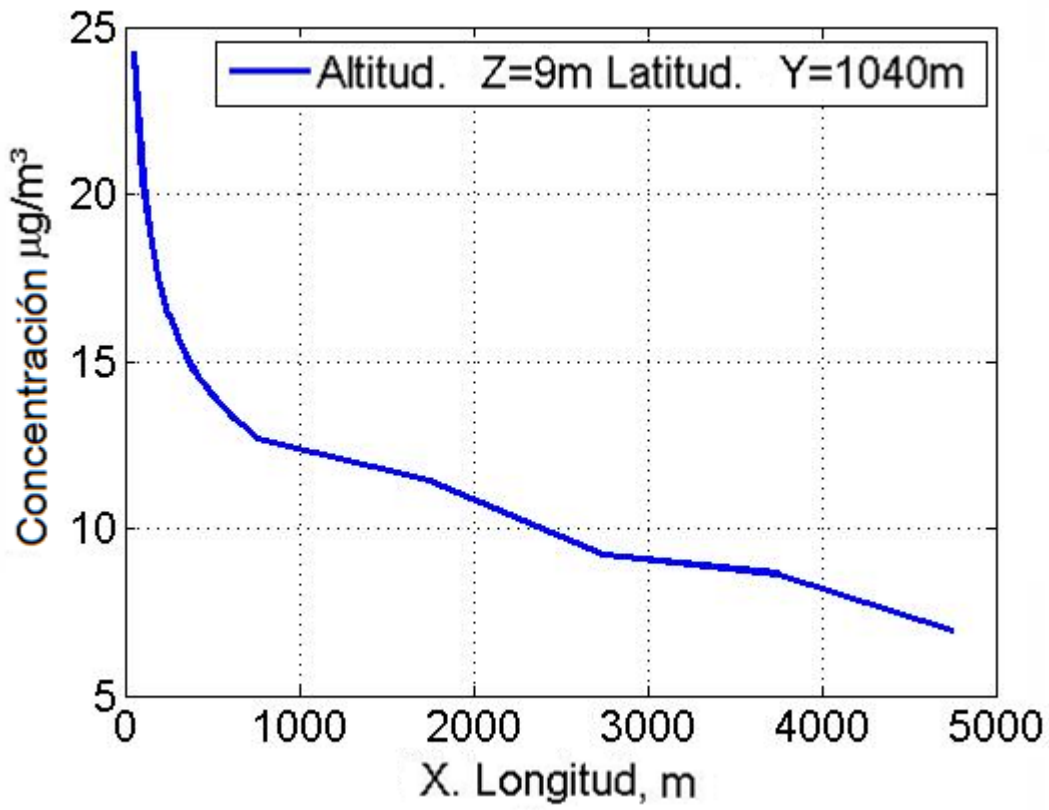


Figura 4.1.3. Concentración de contaminantes SO₂ según distancia en el eje X, con Z=9 m e Y=1040 m.

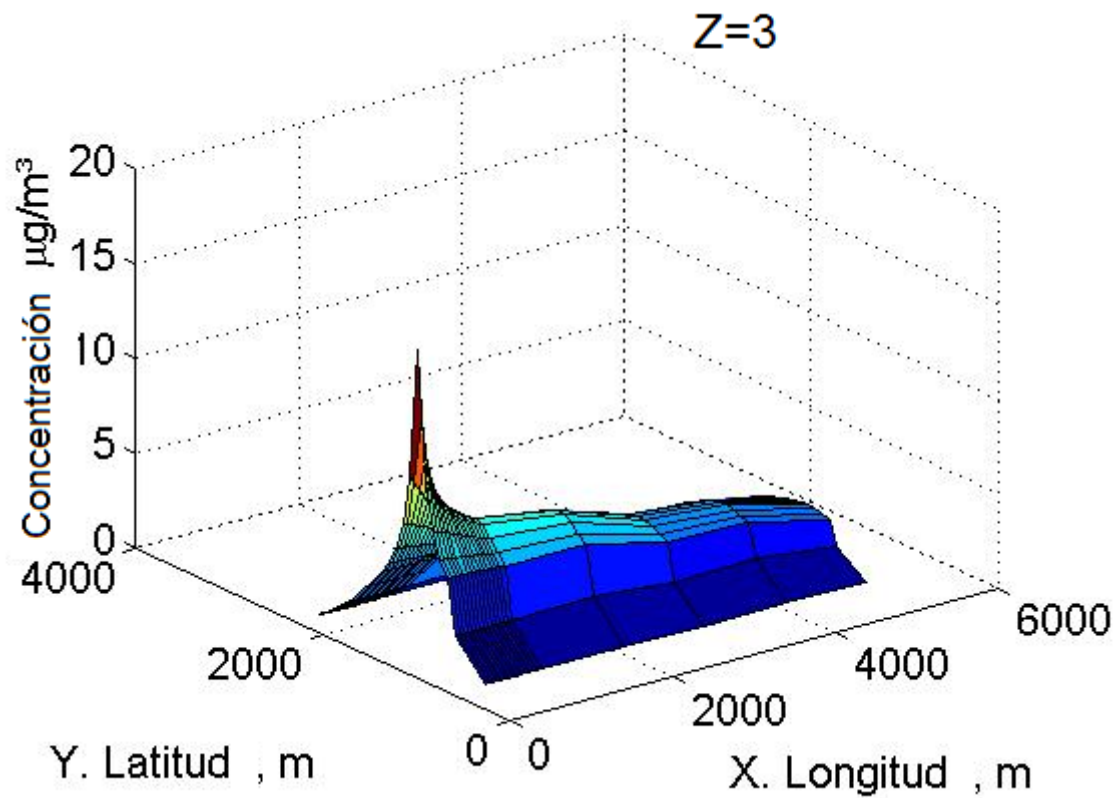


Figura 4.1.4. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=3 m.

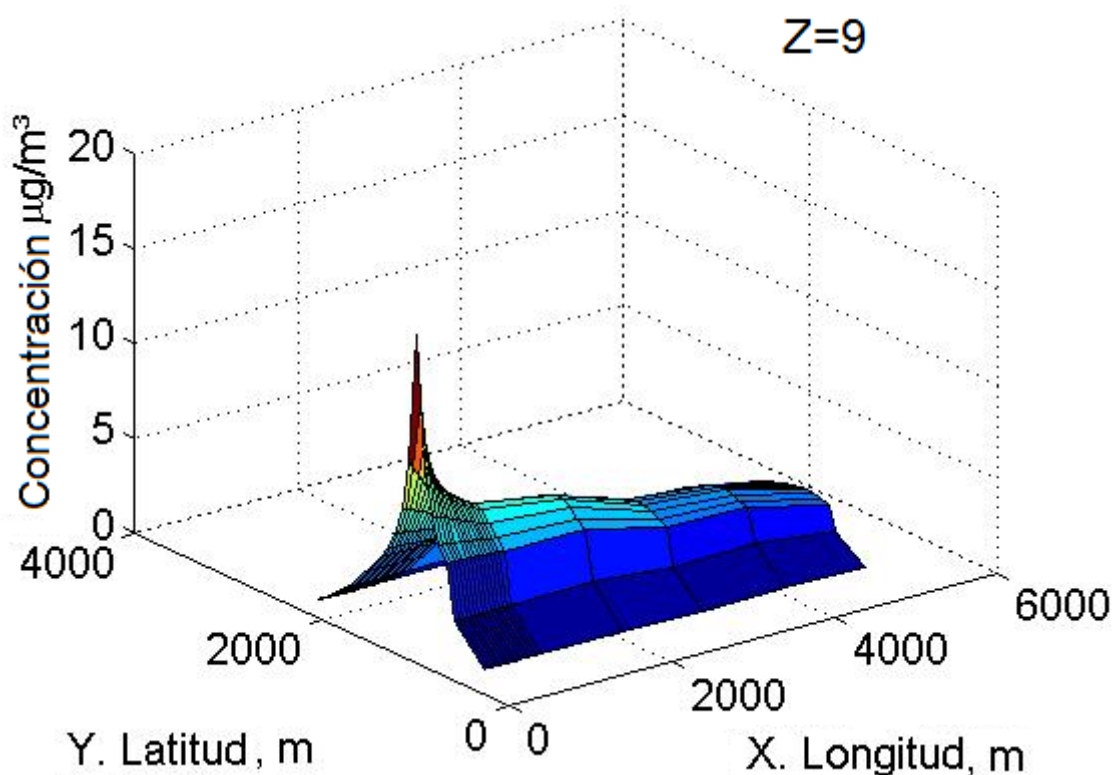


Figura 4.1.5. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=9 m.

Apreciamos mayores concentraciones en las gráficas referentes a la altura de 9 metros, lo que es normal por hallarse la chimenea a esta altura. Se observa una pronunciada curva en los primeros 1000 metros, estabilizándose a partir de aquí y empezando a caer poco a poco, de forma casi lineal. Explicamos este fenómeno por la ausencia de insolación, lo que favorece la estratificación del aire y limita los movimientos verticales de este.

En el segundo caso dentro de las estables, tenemos la estabilidad F o muy estable, en la que se tiene un viento de referencia de 2.2 m/s, un 20 de noviembre a las 24 GTM (1 de la madrugada en España), a una temperatura de 10°C y con una nubosidad de 0.51 en una escala de 0 a 1. Los resultados de las concentraciones de las simulaciones se muestran a continuación en las gráficas 4.1.6., 4.1.7., 4.1.8. y 4.1.9., en dos y tres dimensiones:

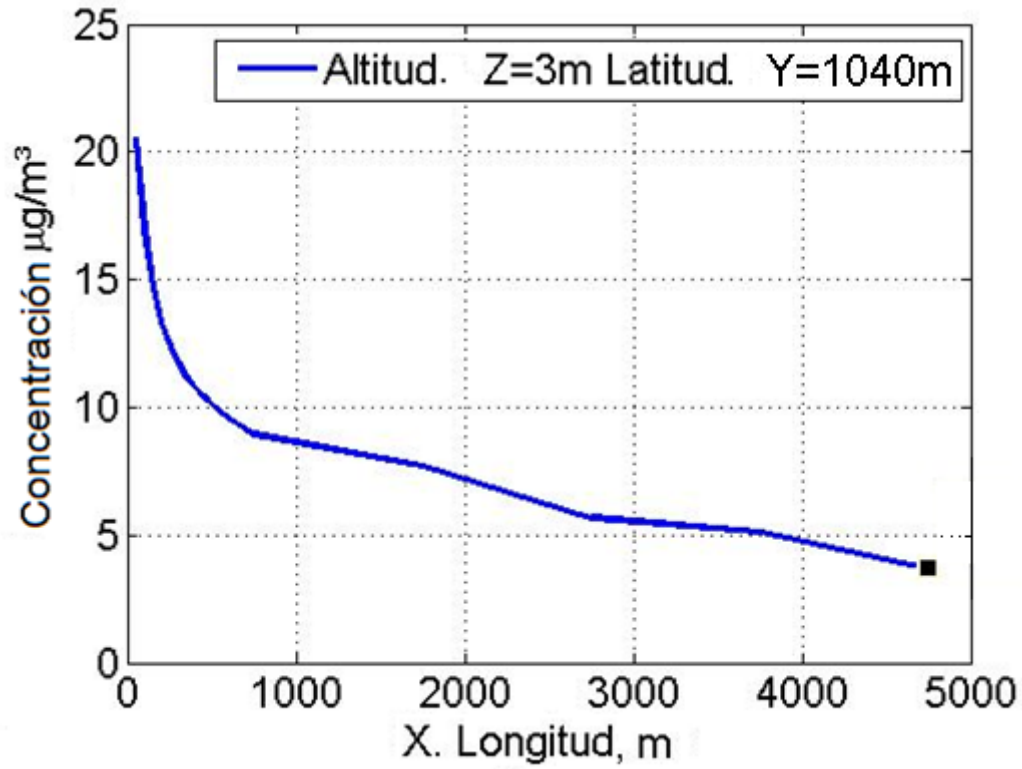


Figura 4.1.6. Concentración de contaminantes SO_2 según distancia en el eje X, con $Z=9$ m e $Y=1040$ m.

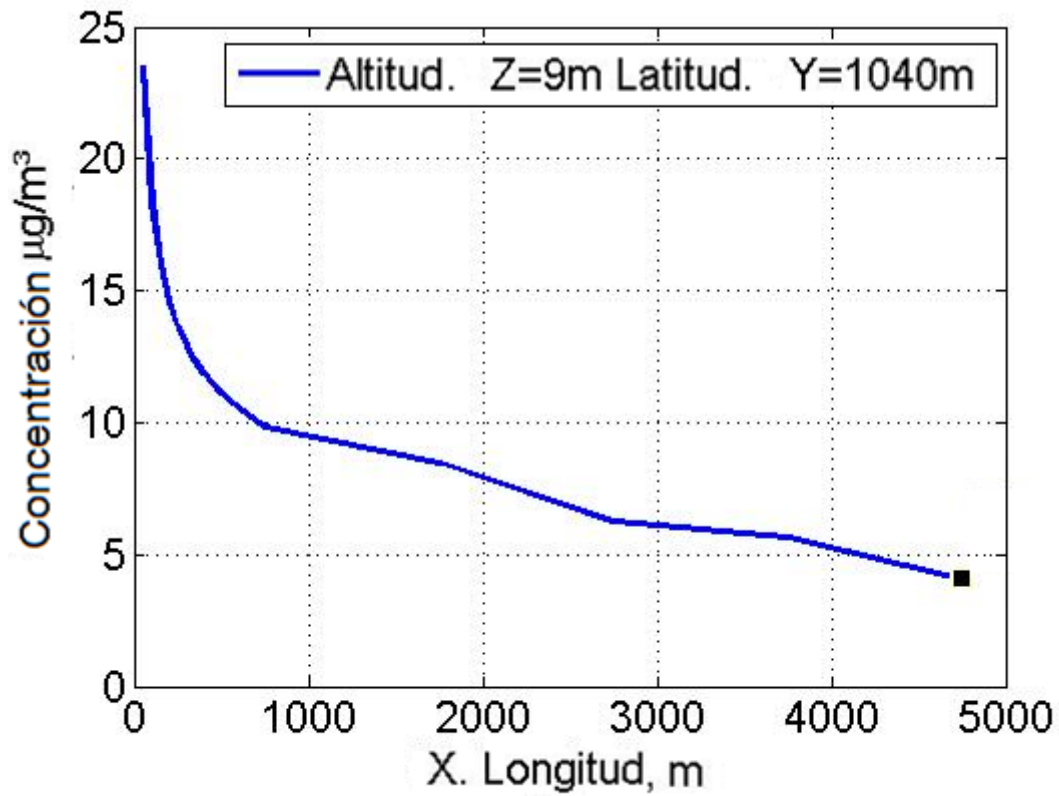


Figura 4.1.7. Concentración de contaminantes SO_2 según distancia en el eje X, con $Z=9$ m e $Y=1040$ m.

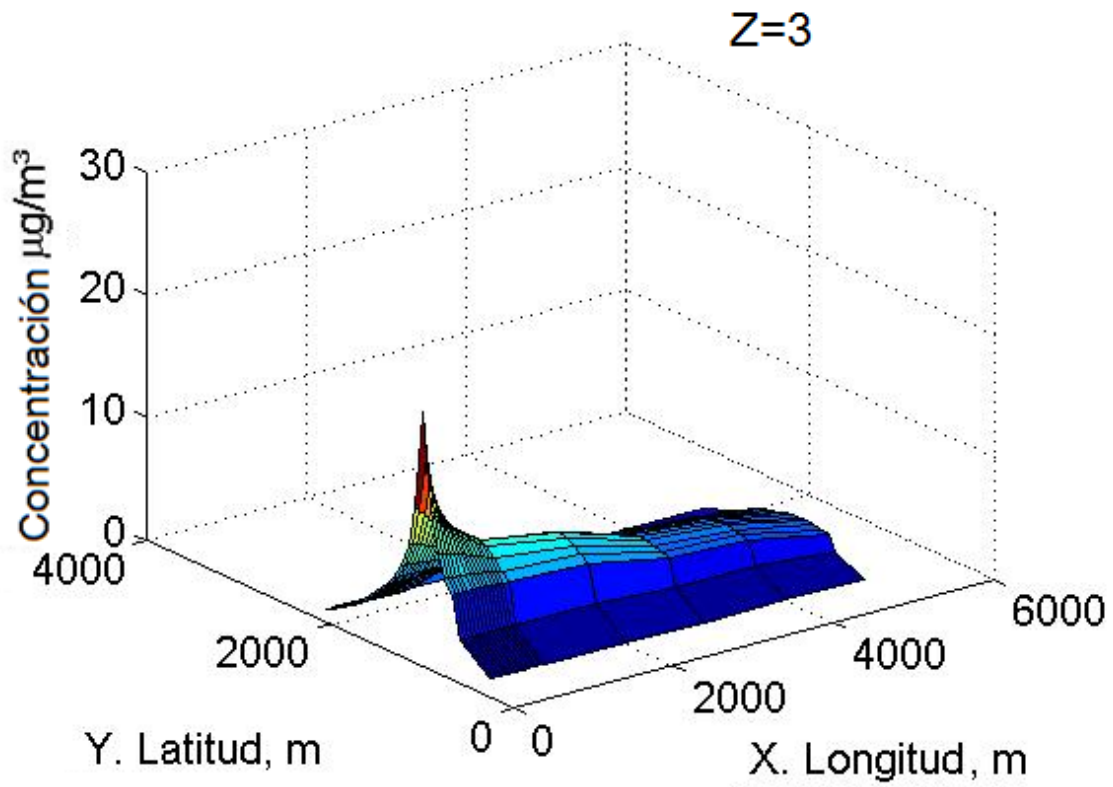


Figura 4.1.8. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=3 m.

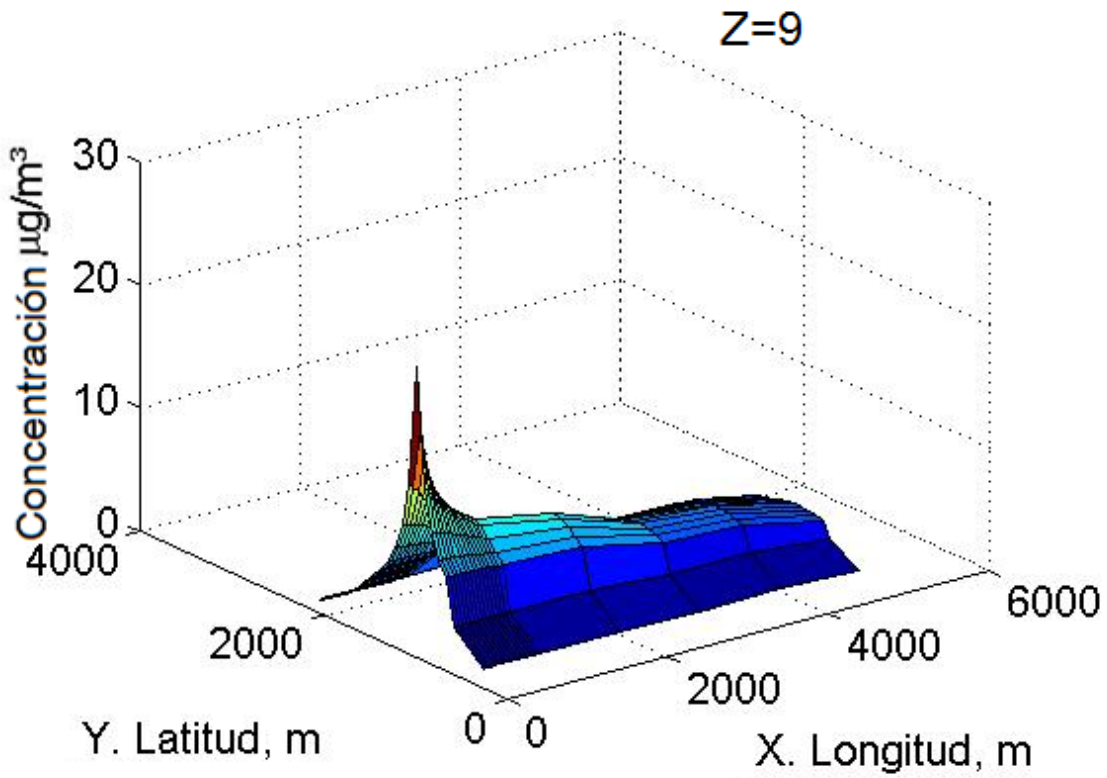


Figura 4.1.9. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=3 m.

Al igual que en el grupo de gráficas anteriores, los máximos se alcanzan al analizar las concentraciones a 9 metros. Además, debido a la alta estabilidad y bajos vientos e insolaciones inexistentes con cierta nubosidad, las partículas se depositan rápidamente y las concentraciones bajan de forma brusca conforme nos alejamos de la fuente. Esto se explica por la ausencia de vientos que arrastren las sustancias, y de insolación que provoque vientos térmicos, ya que estas situaciones se dan por la noche, lo que da lugar a una atmósfera muy estable.

4.1.2. Condiciones neutras

Otros dos escenarios se han diseñado para este subapartado, formado por neutras puras, "D", y las ligeramente inestables o "C" y ambos son en horario diurno.

En primer lugar se muestran los resultados gráficos en las figuras 4.1.10., 4.1.11., 4.1.12. y 4.1.13., obtenidos en condiciones C (inestabilidad ligera), con fecha 1 de Octubre, con un viento de referencia de 4 m/s y una insolación ligera, a las 12 pm de la mañana, con cielos completamente despejados y una temperatura de 22°C:

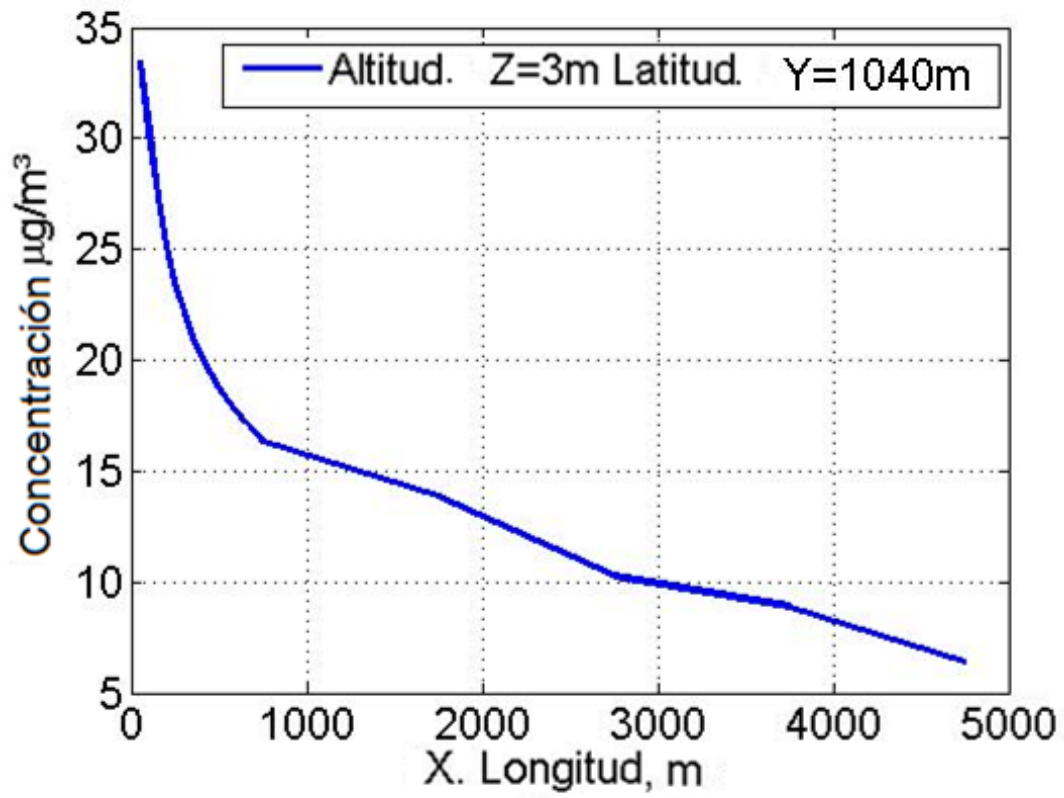


Figura 4.1.10. Concentración de contaminantes SO₂ según distancia en el eje X, con Z=9 m e Y=1040 m.

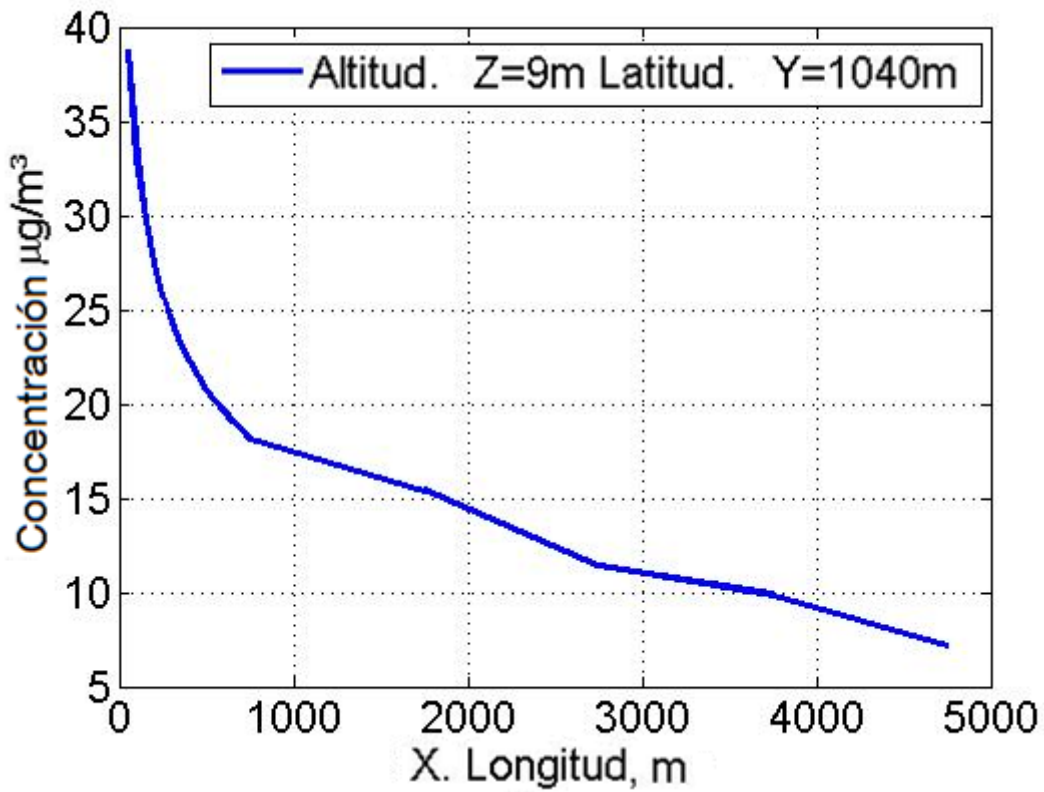


Figura 4.1.11. Concentración de contaminantes SO₂ según distancia en el eje X, con Z=9 m e Y=1040 m.

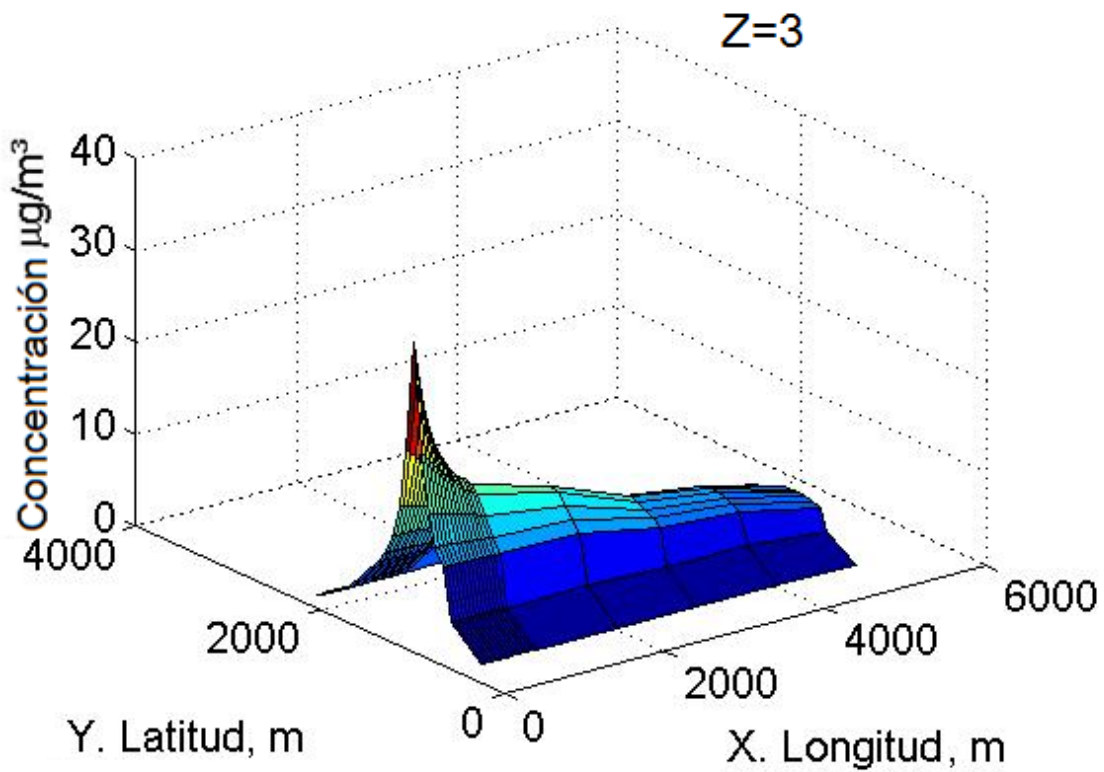


Figura 4.1.12. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=3 m.

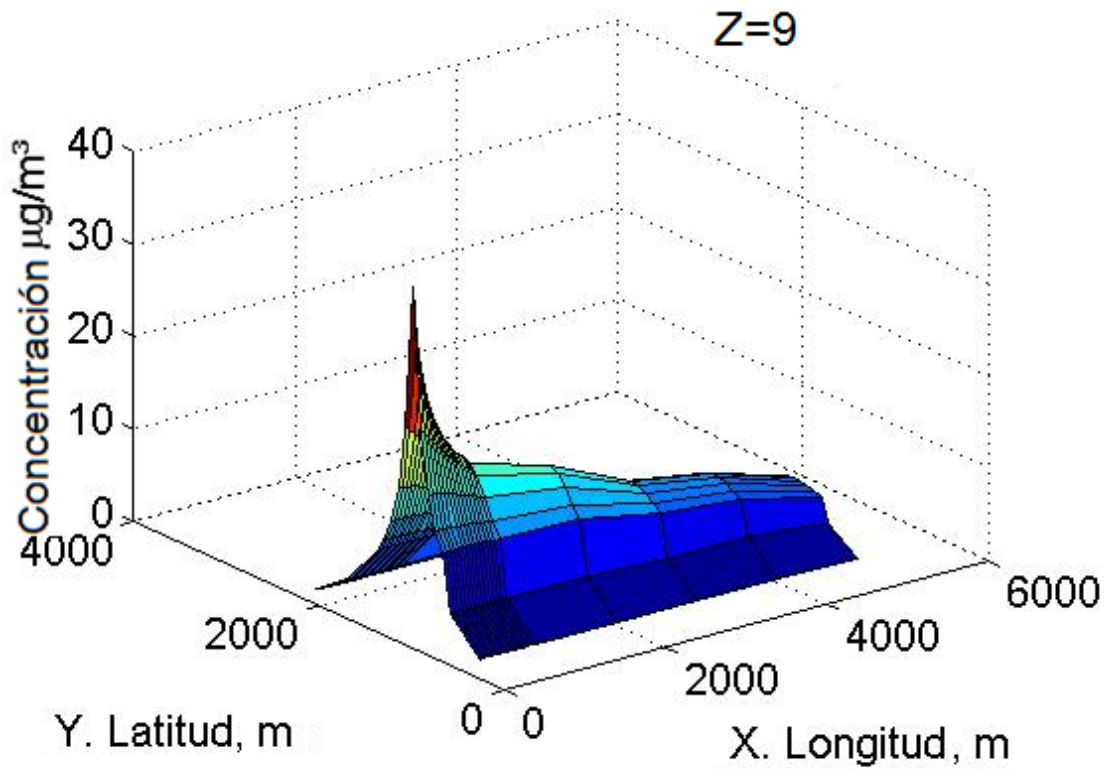


Figura 4.1.13. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=3 m.

A continuación se muestran los datos del escenario "D", en condiciones neutras, un 15 de septiembre a las 4pm de la tarde sin nubes, con una insolación también ligera pero un viento bastante mayor de 5.5 m/s. la temperatura es de 19.5 °C y los resultados se muestran a continuación en las figuras 4.1.14., 4.1.15., 4.1.16. y 4.1.17.:

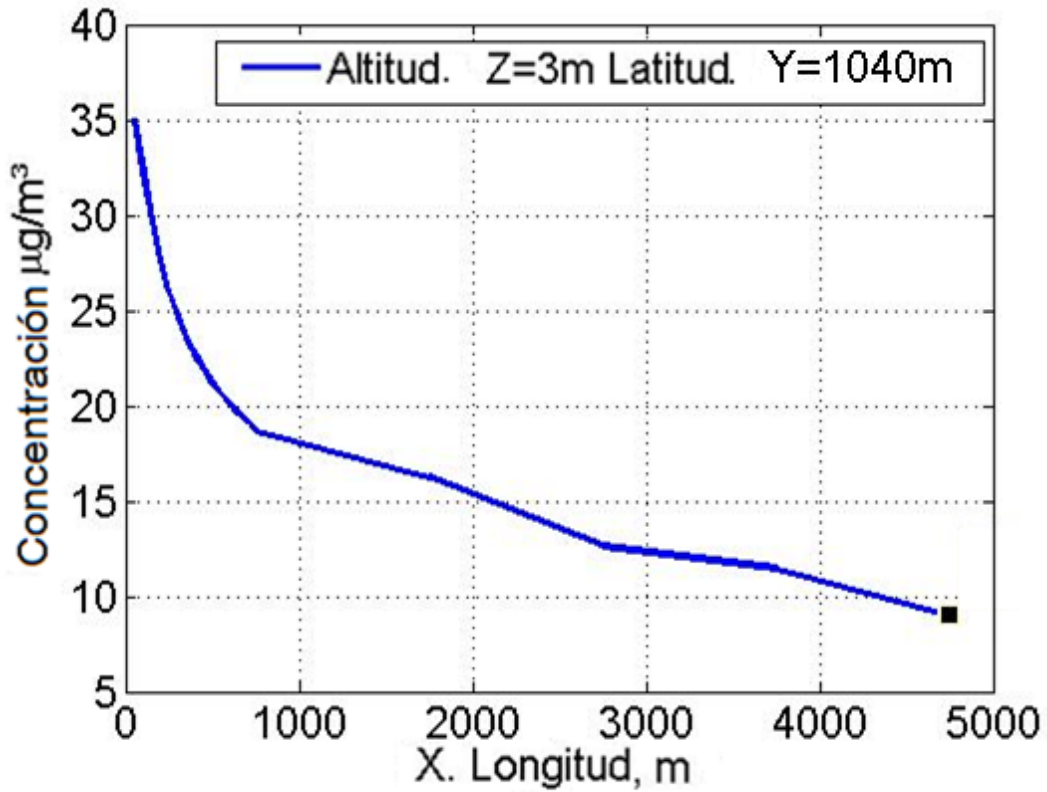


Figura 4.1.14. Concentración de contaminantes SO_2 según distancia en el eje X, con $Z=3$ m e $Y=1040$ m.

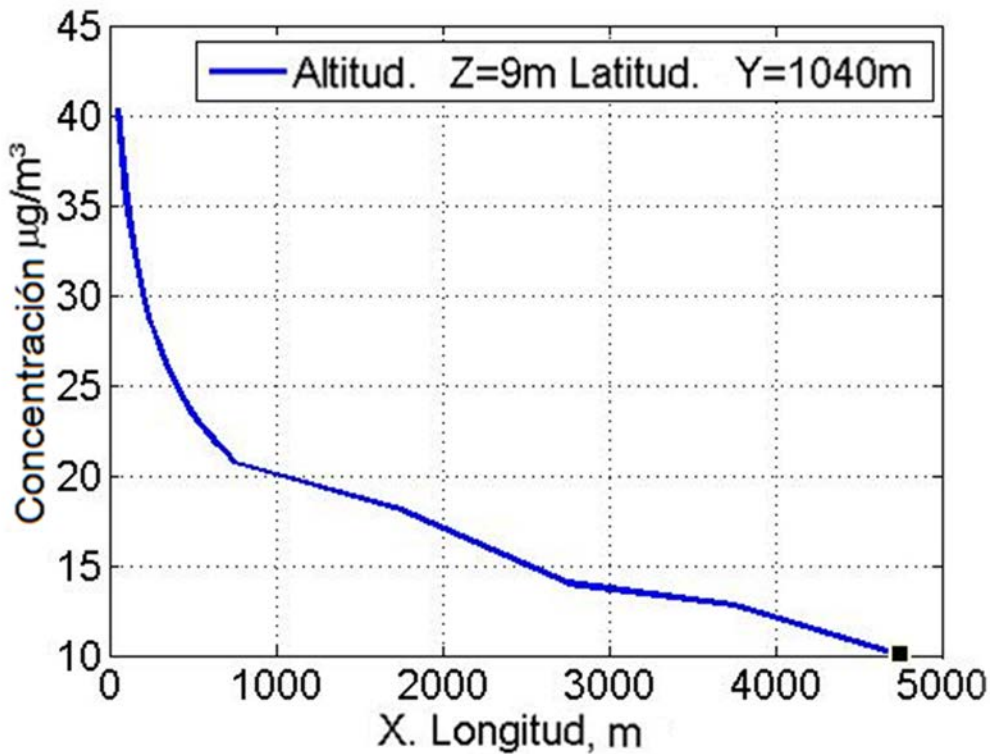


Figura 4.1.15. Concentración de contaminantes SO_2 según distancia en el eje X, con $Z=9$ m e $Y=1040$ m.

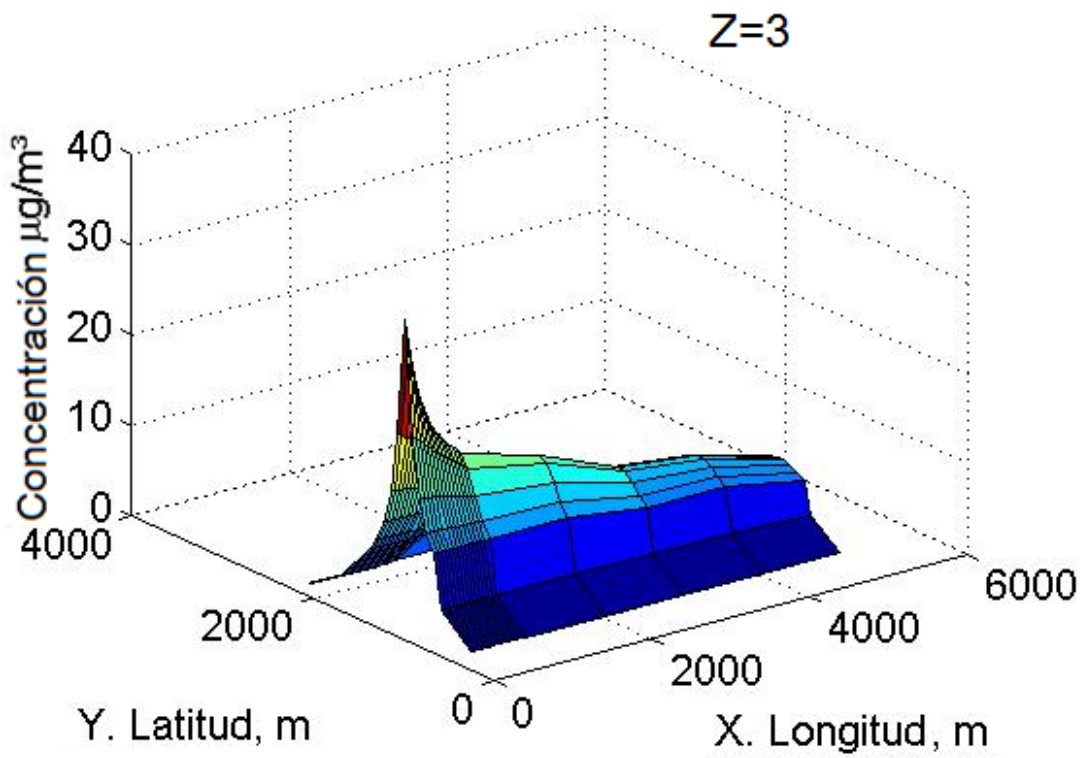


Figura 4.1.16. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=3 m.

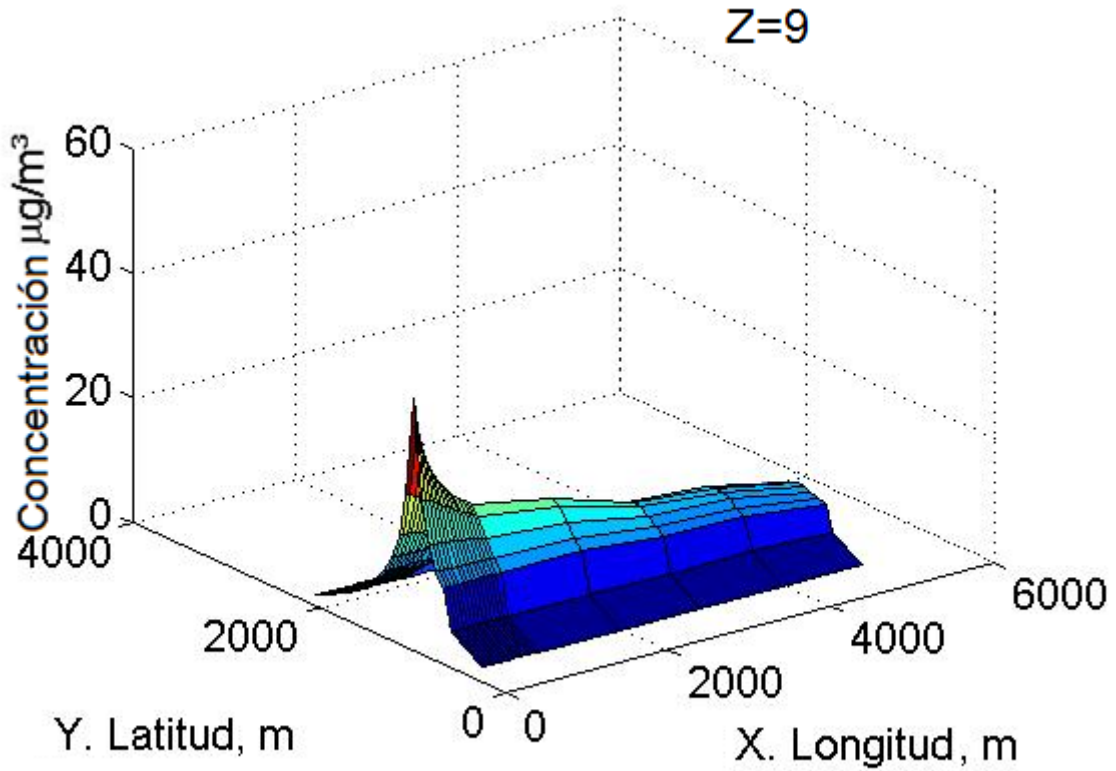


Figura 4.1.17. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=9 m.

Una mayor isolación, unida a la existencia de vientos de referencia mayores, provocan unas concentraciones en las capas de 3 y 9 metros mayores que en las condiciones estables. Esto es lógico, pues la isolacion y el viento crean una atmósfera turbulenta que impide la deposición de las partículas y su difusión, y las arrastra más lejos y durante más tiempo. Además la presencia de luz solar acentúa las reacciones químicas en determinados casos.

En el anterior grupo de gráficas, observamos los mayores valores del grupo, por el compromiso entre viento moderado-fuerte e insolaciones de la misma naturaleza.

4.1.3. Condiciones inestables

Incluidas en las condiciones inestables, pueden ser moderadamente inestables o muy inestables, B y A respectivamente. En las figuras 4.1.18., 4.1.19., 4.1.20. y 4.1.21. podemos ver las gráficas correspondientes a la máxima categoría de inestabilidad, la A, con gran insolación (1 de Junio a las 3pm) y un viento bajo de 1 m/s:

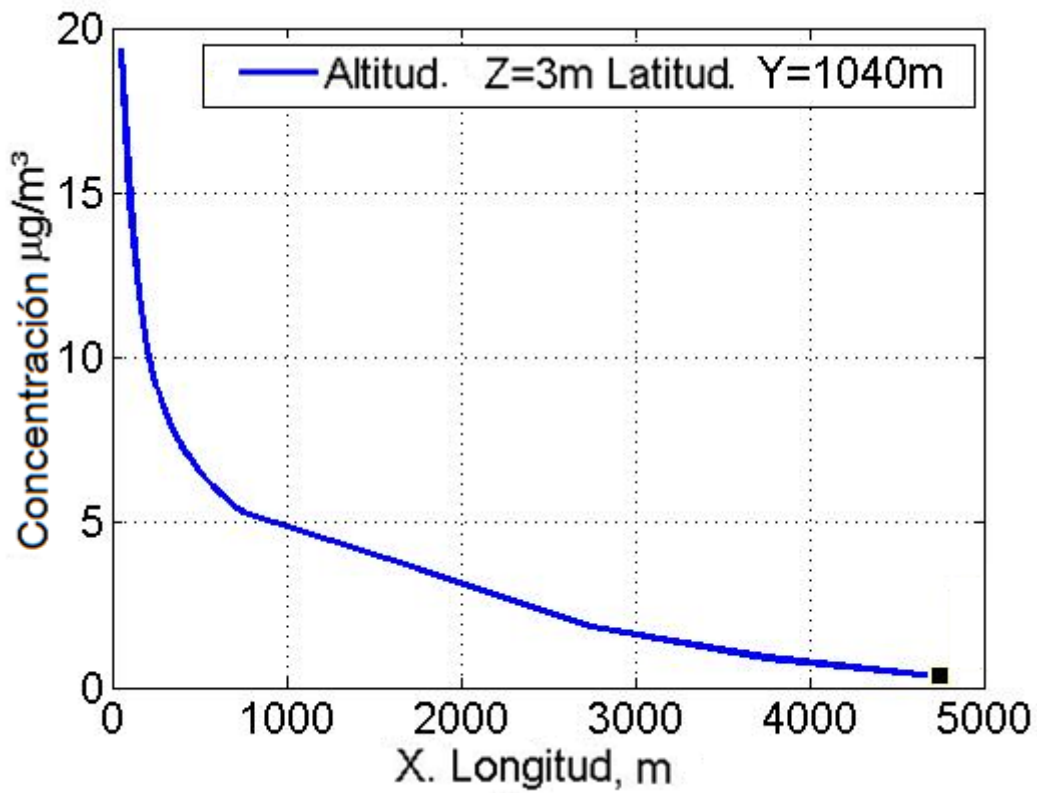


Figura 4.1.18. Concentración de contaminantes SO_2 según distancia en el eje X, con $Z=9$ m e $Y=1040$ m.

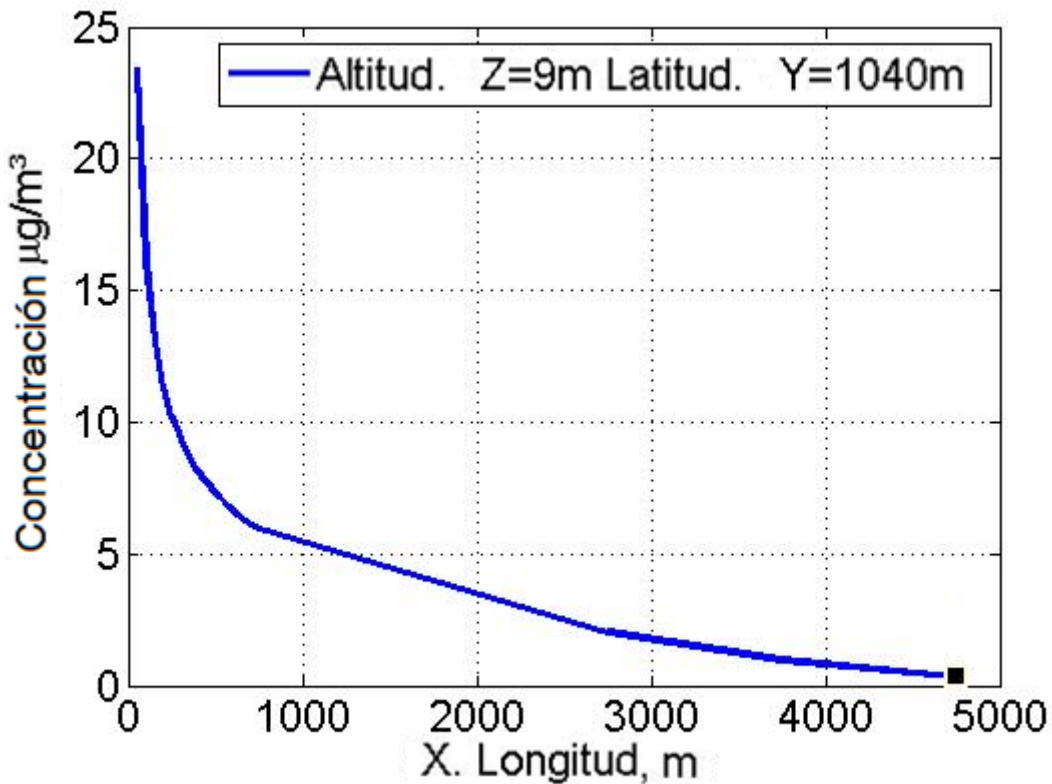


Figura 4.1.19. Concentración de contaminantes SO_2 según distancia en el eje X, con $Z=9$ m e $Y=1040$ m.

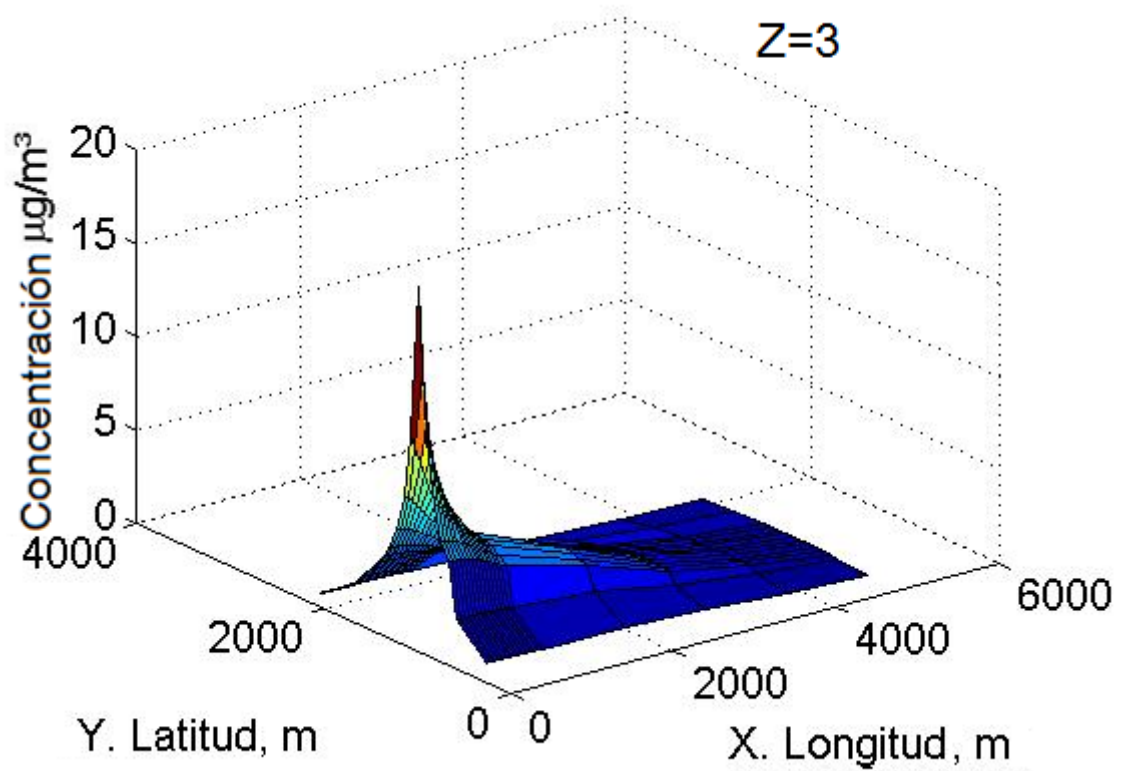


Figura 4.1.20. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=3 m.

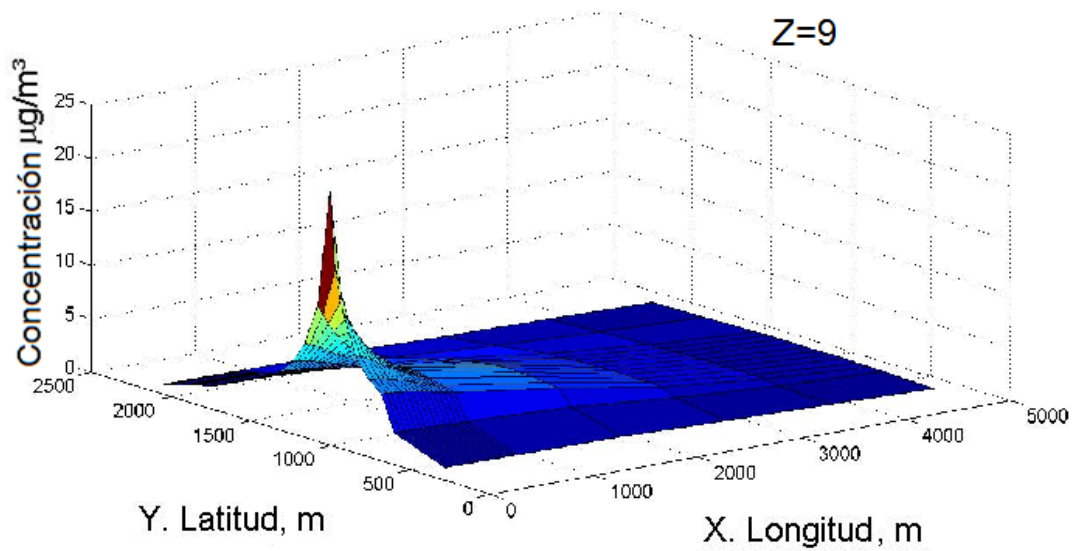


Figura 4.1.21. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=3 m.

A pesar de la gran insolación, ya que esta prueba se lleva a cabo a las 3 pm de la tarde en verano, el viento es casi inexistente en este escenario, lo que hace que las concentraciones se difundan rápidamente, dispersándose a pocos metros de la fuente como indican las gráficas y los datos obtenidos.

En las moderadamente inestables, nuestro escenario tiene como fecha el 15 de abril, en el que existe una insolación moderada con un viento de referencia de 2.8 m/s, y una temperatura de 19°C. Las representaciones graficas se muestran a continuación en las figuras 4.1.22., 4.1.23., 4.2.24. y 4.1.25.:

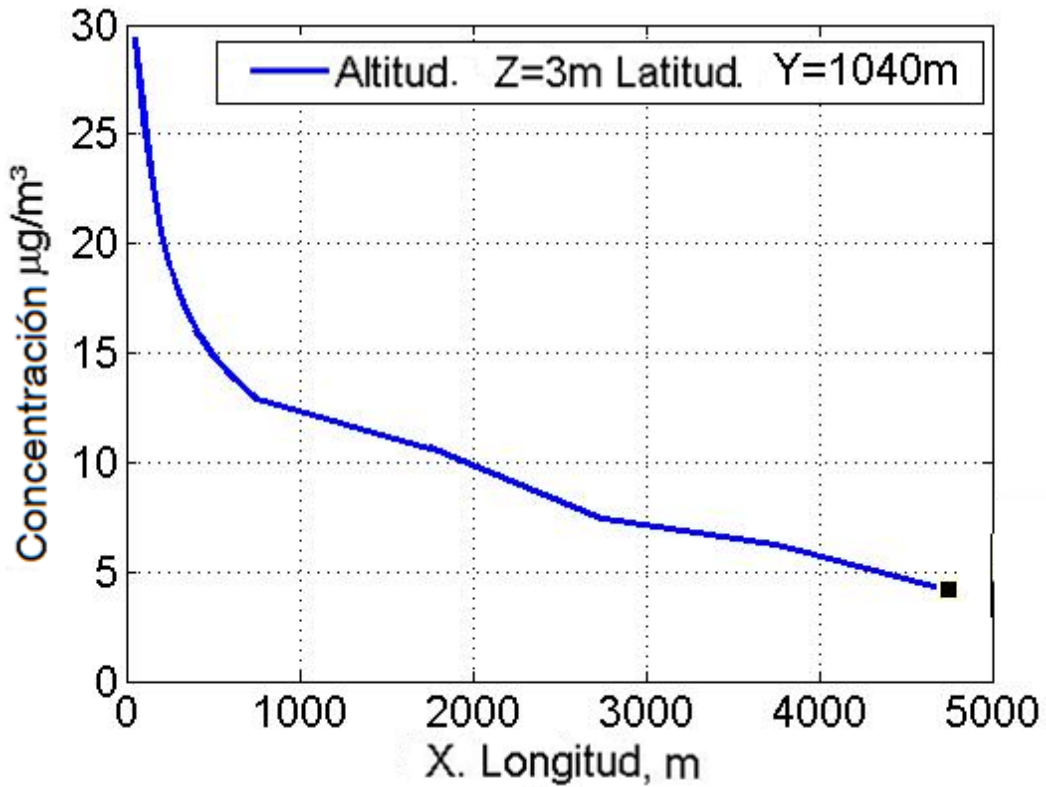


Figura 4.1.22. Concentración de contaminantes SO_2 según distancia en el eje X, con Z=9 m e Y=1040 m.

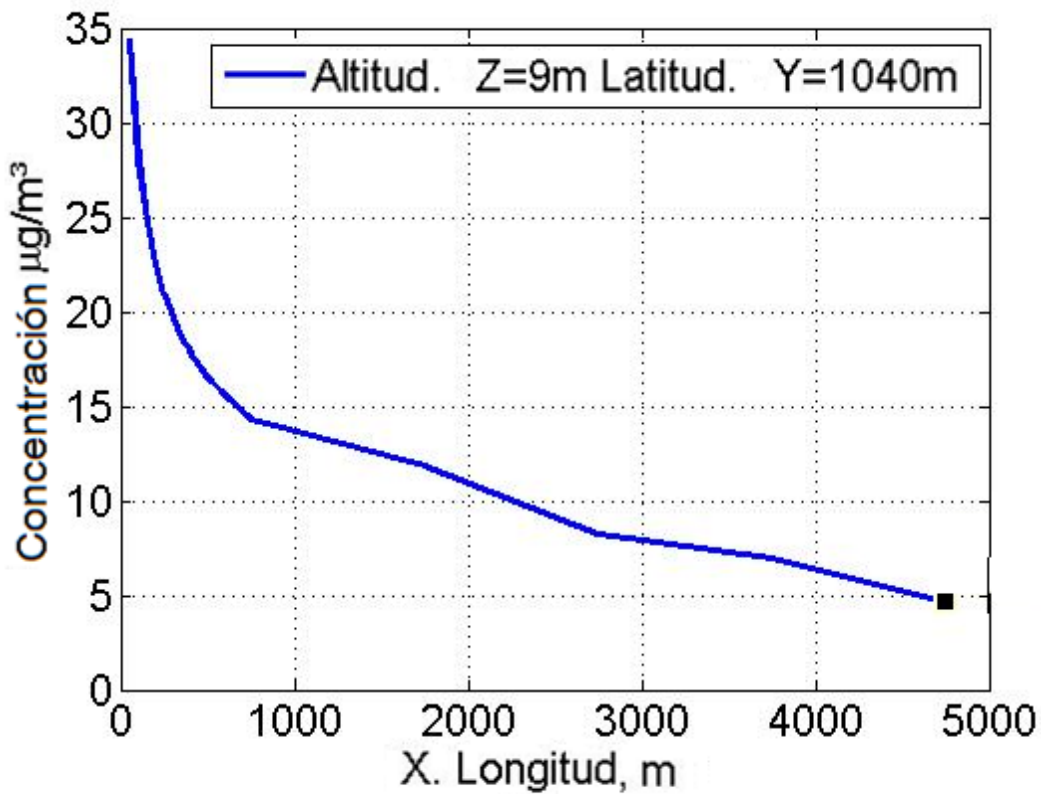


Figura 4.1.23. Concentración de contaminantes SO_2 según distancia en el eje X, con Z=9 m e Y=1040 m.

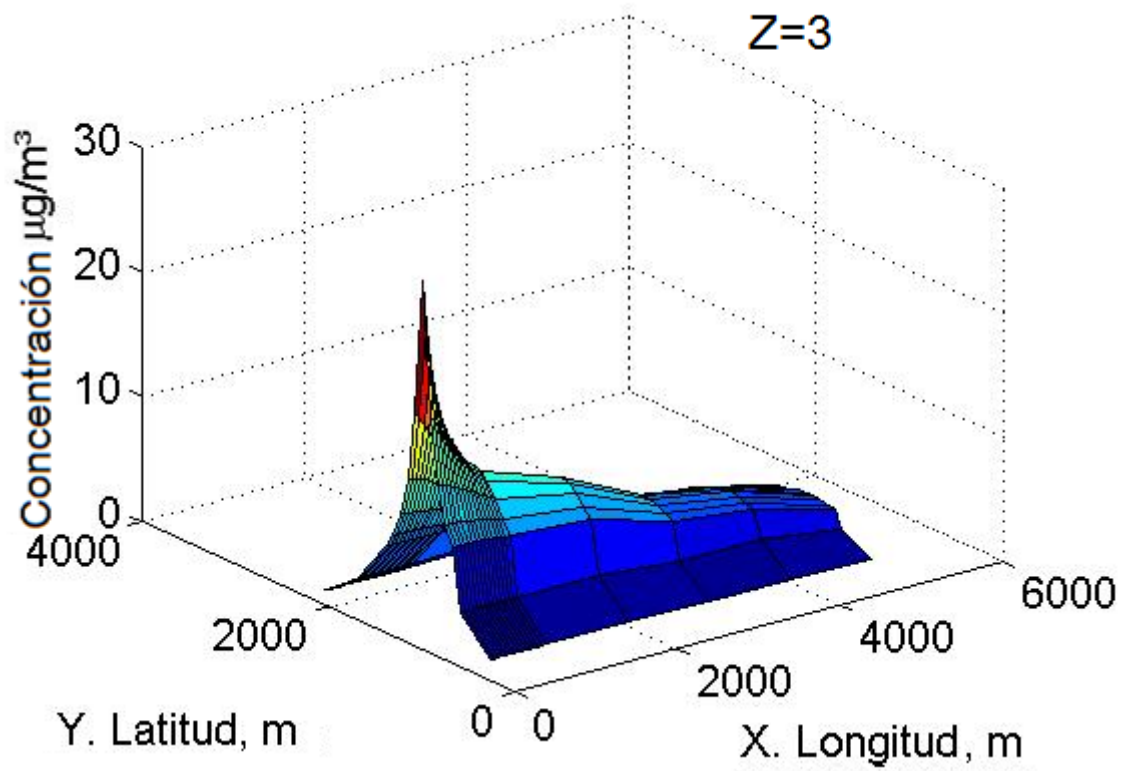


Figura 4.1.24. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=3 m.

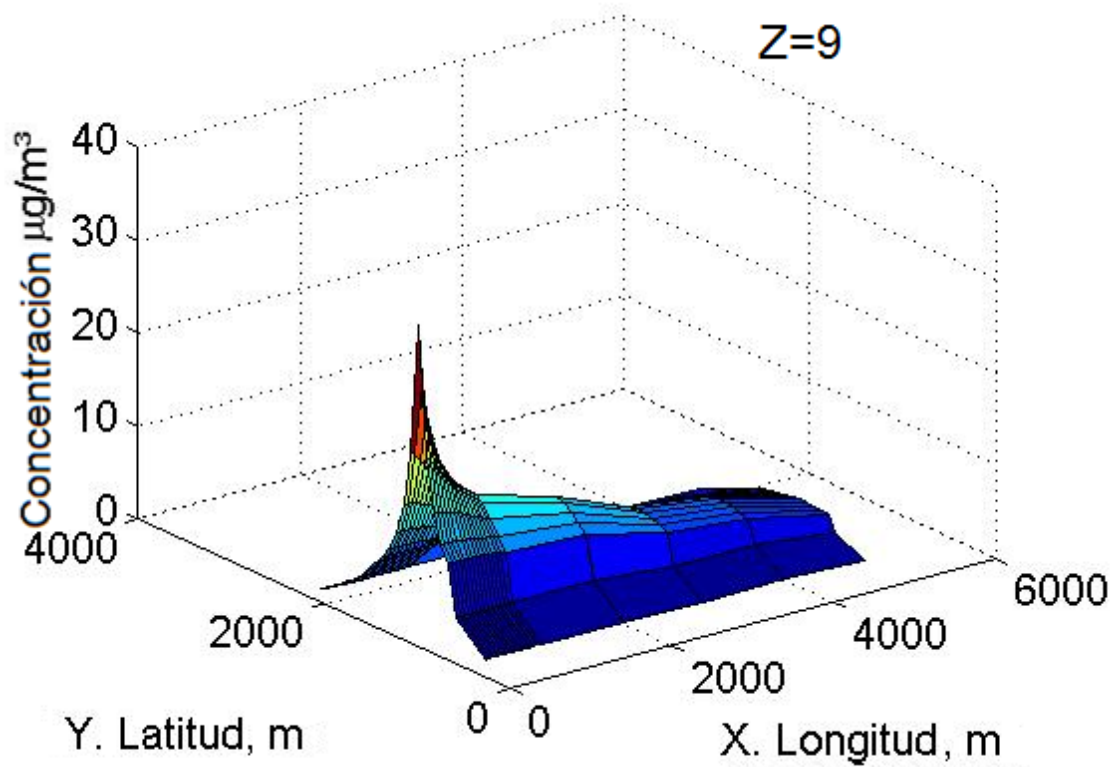


Figura 4.1.25. Concentración de contaminantes SO₂ en tres dimensiones con Z=9 m.

Observamos en estas últimas representaciones, unos valores altos de concentración de SO_2 debidos a la naturaleza turbulenta de la atmósfera provocada por vientos e insolaciones moderadas. De nuevo nos encontramos la situación inestabilidad, con vientos térmicos ascendentes a raíz del sol, que favorece la suspensión de las partículas.

4.2. COMPARACIÓN Y RELACIÓN CON MODELOS ANTERIORES

En el siguiente subapartado se muestran las comparaciones de los resultados obtenidos en las simulaciones entre los modelos de difusión pasiva de Roberts, Sutton y Pasquill-Gifford y las de nuestro modelo, además de una serie de datos de concentraciones reales y actuales de estaciones meteorológicas del país:

Tras establecer las relaciones de los modelos previos de Roberts, Sutton y Pasquill-Gifford, apreciamos ciertas similitudes en los primeros 300 metros en algunas de los escenarios, pero en general, grandes diferencias entre estos y los resultados de nuestras simulaciones. Por otro lado, al comparar las simulaciones con los datos reales recogidos en las distintas estaciones de la región y del país, observamos una gran similitud con los resultados obtenidos en nuestro modelo aircon.

Estos valores tan pequeños de concentración en los modelos previos al nuestro y bastante alejados de la realidad, se explican por la gran cantidad de simplificaciones asumidas por los autores, en las que se llega a eliminar el viento de las ecuaciones en muchos casos, las generalizaciones en las condiciones de entrada y los supuestos de “todo o nada” para los distintos escenarios. El tiempo de emisión tampoco se tiene en cuenta en las emisiones continuas de los modelos, lo que afecta en gran medida a los resultados pues a mayor tiempo de emisión, mayor difusión.

Todo esto se puede observar desde la Tabla 4.2.1 hasta la Tabla 4.2.18. tanto en las situaciones estables, neutras e inestables.

4.2.1. Condiciones estables:

Tabla 4.2.1. Comparación entre modelo y la teoría de Roberts.

Condiciones	Posición	Concentración Roberts (µg/m ³)	Simulación(µg/m ³)	Relación
UR 2.2 I4 (20-11) F, Z=3m nubes 0.51, GTM =24, 9.7°C	50	6,28647E-05	20,56	3,05762E-06
	100	3,16389E-05	16,98	1,8633E-06
	150	2,11387E-05	14,72	1,43605E-06
	200	1,58714E-05	13,33	1,19065E-06
	450	7,06682E-06	10,41	6,78849E-07
	750	4,24257E-06	8,93	4,75092E-07
	1750	1,81915E-06	7,71	2,35947E-07
	2750	1,1578E-06	5,66	2,04558E-07
	3750	8,49108E-07	5,1	1,66492E-07
	4750	6,70373E-07	3,66	1,83162E-07
Condiciones	Posición	Concentración Roberts (µg/m ³)	Simulación (µg/m ³)	Relación
UR 2.2 I4 (20-11) F, Z=3m nubes 0.51, GTM =24, 9.7°C	50	6,05537E-05	23,53	2,57347E-06
	100	3,10475E-05	18,36	1,69104E-06
	150	2,08739E-05	16,01	1,3038E-06
	200	1,57218E-05	14,59	1,07758E-06
	450	7,03709E-06	11,47	6,13521E-07
	750	4,23184E-06	9,85	4,29629E-07
	1750	1,81718E-06	8,5	2,13786E-07
	2750	1,157E-06	6,25	1,8512E-07
	3750	8,48678E-07	5,63	1,50742E-07
	4750	6,70105E-07	4,03	1,66279E-07

Tabla 4.2.2. Comparación entre modelo y la teorías de Sutton.

Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m ³)	Simulación(µg/m ³)	Relación
UR 2.2 I4 (20-11) F, Z=3m nubes 0.51, GTM =24, 9.7°C	50	0,002505837	20,56	0,000121879
	100	0,000983422	16,98	5,79165E-05
	150	0,000519203	14,72	3,52719E-05
	200	0,000322806	13,33	2,42165E-05
	450	8,07493E-05	10,41	7,75689E-06
	750	3,32415E-05	8,93	3,72245E-06
	1750	7,57202E-06	7,71	9,82104E-07
	2750	3,43507E-06	5,66	6,06903E-07
	3750	1,99663E-06	5,1	3,91495E-07
	4750	1,32031E-06	3,66	3,60741E-07
Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m ³)	Simulación(µg/m ³)	Relación
UR 2.2 I4 (20-11) F, Z=3m nubes 0.51, GTM =24, 9.7°C	50	0,002289	23,53	9,73E-05
	100	0,000705	18,36	3,84E-05
	150	0,000349	16,01	2,18E-05
	200	0,000212	14,59	1,45E-05

	450	5,14E-05	11,47	4,48E-06
	750	2,1E-05	9,85	2,14E-06
	1750	4,78E-06	8,5	5,62E-07
	2750	2,17E-06	6,25	3,47E-07
	3750	1,26E-06	5,63	2,24E-07
	4750	8,32E-07	4,03	2,07E-07

Tabla 4.2.3. Comparación entre modelo y la teoría de Pasquill-Gifford.

Condiciones	Posición	Concentración Pasquill-Gifford ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulación($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Relación
UR 2.2 I4 (20-11) F, Z=3m nubes 0.51, GTM =24, 9.7°C	50	0,053087	20,56	0,002582
	100	0,011715	16,98	0,00069
	150	0,004942	14,72	0,000336
	200	0,003071	13,33	0,00023
	450	0,001121	10,41	0,000108
	750	0,000586	8,93	6,57E-05
	1750	5,38E-05	7,71	6,98E-06
	2750	4,69E-05	5,66	8,29E-06
	3750	2,59E-05	5,1	5,07E-06
	4750	4,09E-09	3,66	1,12E-09
Condiciones	Posición	Concentración Pasquill-Gifford ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulación($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Relación
UR 2.2 I4 (20-11) F, Z=3m nubes 0.51, GTM =24, 9.7°C	50	0,001662	23,53	7,06E-05
	100	0,002805	18,36	0,000153
	150	0,003059	16,01	0,000191
	200	0,00306	14,59	0,00021
	450	0,000914	11,47	7,97E-05
	750	0,000506	9,85	5,14E-05
	1750	8,66E-05	8,5	1,02E-05
	2750	7,44E-05	6,25	1,19E-05
	3750	3,65E-05	5,63	6,48E-06
	4750	1,24E-08	4,03	3,07E-09

Tabla 4.2.4. Comparación entre modelo y la teoría de Roberts.

Condiciones	Posición	Concentración Roberts ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulación($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Relación
UR 4 I5 (20-11) E, Z=3m nubes 0.2, GTM =24, 9.7°C	50	6,26903E-05	7,923	7,91244E-06
	100	3,15948E-05	7,87	4,01459E-06
	150	2,11191E-05	7,79	2,71105E-06
	200	1,58603E-05	7,7	2,05978E-06
	450	7,06463E-06	7,24	9,75778E-07
	750	4,24178E-06	6,8	6,23791E-07
	1750	1,81901E-06	6,41	2,83777E-07
	2750	1,15774E-06	5,107	2,26697E-07

	3750	8,49077E-07	4,775	1,77817E-07
	4750	6,70354E-07	3,65	1,83659E-07
Condiciones	Posición	Concentración Roberts (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 4 I5 (20-11) E, Z=3m nubes 0.2, GTM =24, 9.7°C	50	6,05022E-05	19,6	3,08685E-06
	100	3,10342E-05	14,66	2,11693E-06
	150	2,08679E-05	12,6	1,65618E-06
	200	1,57184E-05	11,45	1,37279E-06
	450	7,03641E-06	9,23	7,62341E-07
	750	4,2316E-06	8,23	5,14167E-07
	1750	1,81713E-06	7,47	2,43258E-07
	2750	1,15698E-06	5,79	1,99824E-07
	3750	8,48668E-07	5,33	1,59225E-07
	4750	6,70099E-07	4,06	1,65049E-07

Tabla 4.2.5. Comparación entre modelo y la teoría de Sutton.

Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 4 I5 (20-11) E, Z=3m nubes 0.2, GTM =24, 9.7°C	50	0,002067	7,923	0,000261
	100	0,000811	7,87	0,000103
	150	0,000428	7,79	5,5E-05
	200	0,000266	7,7	3,46E-05
	450	6,66E-05	7,24	9,2E-06
	750	2,74E-05	6,8	4,03E-06
	1750	6,25E-06	6,41	9,74E-07
	2750	2,83E-06	5,107	5,55E-07
	3750	1,65E-06	4,775	3,45E-07
	4750	1,09E-06	3,65	2,98E-07
Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 4 I5 (20-11) E, Z=3m nubes 0.2, GTM =24, 9.7°C	50	0,002251	19,6	0,000115
	100	0,000693	14,66	4,73E-05
	150	0,000343	12,6	2,73E-05
	200	0,000208	11,45	1,82E-05
	450	5,05E-05	9,23	5,48E-06
	750	2,07E-05	8,23	2,51E-06
	1750	4,7E-06	7,47	6,29E-07
	2750	2,13E-06	5,79	3,68E-07
	3750	1,24E-06	5,33	2,32E-07
	4750	8,19E-07	4,06	2,02E-07

Tabla 4.2.6. Comparación entre modelo y teoría de Pasquill-Gifford.

Condiciones	Posición	Concentración Pasquill-Gifford (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 4 I5 (20-11) E, Z=3m nubes 0.2, GTM =24, 9.7°C	50	0,043785	7,923	0,005526
	100	0,009663	7,87	0,001228
	150	0,004076	7,79	0,000523

	200	0,002533	7,7	0,000329
	450	0,000925	7,24	0,000128
	750	0,000484	6,8	7,11E-05
	1750	0,000113	6,41	1,77E-05
	2750	4,44E-05	5,107	8,69E-06
	3750	3,87E-05	4,775	8,1E-06
	4750	2,13E-05	3,65	5,84E-06
Condiciones	Posición	Concentración Pasquill-Gifford ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulación($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Relación
UR 4 I5 (20-11) E, Z=3m nubes 0.2, GTM =24, 9.7°C	50	0,001634	19,6	8,34E-05
	100	0,002758	14,66	0,000188
	150	0,003008	12,6	0,000239
	200	0,003009	11,45	0,000263
	450	0,000899	9,23	9,74E-05
	750	0,000498	8,23	6,05E-05
	1750	0,000198	7,47	2,65E-05
	2750	8,51E-05	5,79	1,47E-05
	3750	7,31E-05	5,33	1,37E-05
	4750	3,59E-05	4,06	8,84E-06

4.2.2. Condiciones neutras

Tabla 4.2.7. Comparación entre modelo y la teoría de Roberts.

Condiciones	Posición	Concentración Roberts ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulación($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Relación
UR 4 I3 (01-10) C, Z=3 nubes 0, GTM =10, 22°C	50	6,18E-05	33,5	1,84332E-06
	100	3,14E-05	30,28	1,03555E-06
	150	2,1E-05	27,41	7,66604E-07
	200	1,58E-05	25,2	6,26995E-07
	450	7,05E-06	19,41	3,63355E-07
	750	4,24E-06	16,34	2,59332E-07
	1750	1,82E-06	13,87	1,3109E-07
	2750	1,16E-06	10,28	1,1259E-07
	3750	8,49E-07	8,88	9,55974E-08
	4750	6,7E-07	6,44	1,04076E-07
Condiciones	Posición	Concentración Roberts ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulación($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Relación
UR 4 I3 (01-10) C, Z=3 nubes 0, GTM =10, 22°C	50	5,8E-05	38,8	1,49558E-06
	100	3,04E-05	32,98	9,21237E-07
	150	2,06E-05	29,73	6,91996E-07
	200	1,56E-05	27,46	5,66319E-07
	450	7E-06	22,25	3,14736E-07
	750	4,22E-06	18,13	2,32734E-07
	1750	1,81E-06	15,42	1,17698E-07

	2750	1,16E-06	11,43	1,01144E-07
	3750	8,48E-07	9,88	8,58482E-08
	4750	6,7E-07	7,16	9,35468E-08

Tabla 4.2.8. Comparación entre modelo y la teoría de Sutton.

Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m ³)	Simulación(µg/m ³)	Relación
UR 4 I3 (01-10) C, Z=3 nubes 0, GTM =10, 22°C	50	0,001058	33,5	3,15673E-05
	100	0,000415	30,28	1,37061E-05
	150	0,000219	27,41	7,99388E-06
	200	0,000136	25,2	5,40594E-06
	450	3,41E-05	19,41	1,75567E-06
	750	1,4E-05	16,34	8,58534E-07
	1750	3,2E-06	13,87	2,30391E-07
	2750	1,45E-06	10,28	1,41017E-07
	3750	8,43E-07	8,88	9,48884E-08
	4750	5,57E-07	6,44	8,65208E-08
Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m ³)	Simulación(µg/m ³)	Relación
UR 4 I3 (01-10) C, Z=3 nubes 0, GTM =10, 22°C	50	0,00123	38,8	3,17096E-05
	100	0,000379	32,98	1,14833E-05
	150	0,000188	29,73	6,31365E-06
	200	0,000114	27,46	4,1439E-06
	450	2,76E-05	22,25	1,2415E-06
	750	1,13E-05	18,13	6,23624E-07
	1750	2,57E-06	15,42	1,66505E-07
	2750	1,16E-06	11,43	1,01853E-07
	3750	6,77E-07	9,88	6,84777E-08
	4750	4,47E-07	7,16	6,24795E-08

Tabla 4.2.9. Comparación entre modelo y la teoría de Pasquill-Gifford.

Condiciones	Posición	Concentración Pasquill-Gifford (µg/m ³)	Simulación(µg/m ³)	Relación
UR 4 I3 (01-10) C, Z=3 nubes 0, GTM =10, 22°C	50	0,000204	33,5	6,08095E-06
	100	0,000179	30,28	5,90904E-06
	150	0,000192	27,41	6,99186E-06
	200	0,000171	25,2	6,76992E-06
	450	1,97E-05	19,41	1,01522E-06
	750	1E-05	16,34	6,14975E-07
	1750	5,93E-06	13,87	4,27719E-07
	2750	5,38E-06	10,28	5,23325E-07
	3750	2,27E-06	8,88	2,55477E-07
	4750	3,36E-11	6,44	5,21751E-12
Condiciones	Posición	Cc Pasquill-Gifford (µg/m ³)	Simulación(µg/m ³)	Relación
UR 4 I3 (01-10) C, Z=3 nubes 0, GTM =10, 22°C	50	0,001534	38,8	3,95481E-05
	100	0,000738	32,98	2,23813E-05

	150	0,000533	29,73	1,79119E-05
	200	0,00026	27,46	9,45039E-06
	450	2,51E-05	22,25	1,12671E-06
	750	1,14E-05	18,13	6,26767E-07
	1750	5,82E-06	15,42	3,77348E-07
	2750	5,2E-06	11,43	4,54699E-07
	3750	2,14E-06	9,88	2,1637E-07
	4750	4,19E-11	7,16	5,85415E-12

Tabla 4.2.10. Comparación entre modelo y la teoría de Roberts.

Condiciones	Posición	Concentración Roberts (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 5.5 I3 (15-09) D, Z=3 nubes 0.8, GTM =2, 19.5°C	50	6,15E-05	35,08	1,75449E-06
	100	3,13E-05	32,29	9,6948E-07
	150	2,1E-05	29,69	7,0695E-07
	200	1,58E-05	27,61	5,71791E-07
	450	7,05E-06	21,86	3,22512E-07
	750	4,24E-06	18,69	2,26674E-07
	1750	1,82E-06	16,26	1,11811E-07
	2750	1,16E-06	12,62	9,17078E-08
	3750	8,49E-07	11,48	7,39431E-08
	4750	6,7E-07	9,01	7,43866E-08
Condiciones	Posición	Concentración Roberts (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 5.5 I3 (15-09) D, Z=3 nubes 0.8, GTM =2, 19.5°C	50	5,62E-05	40,33	1,39411E-06
	100	2,99E-05	35,22	8,48782E-07
	150	2,04E-05	32,26	6,30816E-07
	200	1,54E-05	30,11	5,12257E-07
	450	6,98E-06	24,16	2,88791E-07
	750	4,21E-06	20,74	2,02997E-07
	1750	1,81E-06	18,09	1,00231E-07
	2750	1,16E-06	14,04	8,22919E-08
	3750	8,48E-07	12,68	6,68616E-08
	4750	6,7E-07	10,02	6,68224E-08

Tabla 4.2.11. Comparación entre modelo y la teoría de Sutton.

Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 5.5 I3 (15-09) D, Z=3 nubes 0.8, GTM =2, 19.5°C	50	0,000955	35,08	2,72294E-05
	100	0,000375	32,29	1,16096E-05
	150	0,000198	29,69	6,6661E-06
	200	0,000123	27,61	4,45677E-06
	450	3,08E-05	21,86	1,4081E-06
	750	1,27E-05	18,69	6,77978E-07
	1750	2,89E-06	16,26	1,77515E-07
	2750	1,31E-06	12,62	1,03758E-07
	3750	7,61E-07	11,48	6,62979E-08

	4750	5,03E-07	9,01	5,58595E-08
Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 5.5 I3 (15-09) D, Z=3 nubes 0.8, GTM =2, 19.5°C	50	0,000912	40,33	2,26114E-05
	100	0,000281	35,22	7,97004E-06
	150	0,000139	32,26	4,31265E-06
	200	8,43E-05	30,11	2,80113E-06
	450	2,05E-05	24,16	8,47446E-07
	750	8,38E-06	20,74	4,0406E-07
	1750	1,9E-06	18,09	1,05198E-07
	2750	8,63E-07	14,04	6,14591E-08
	3750	5,01E-07	12,68	3,95476E-08
	4750	3,32E-07	10,02	3,30915E-08

Tabla 4.2.12. Comparación entre modelo y y la teoría de Pasquill-Gifford.

Condiciones	Posición	Concentración Pasquill-Gifford (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 5.5 I3 (15-09) D, Z=3 nubes 0.8, GTM =2, 19.5°C	50	0,000184	35,08	5,24532E-06
	100	0,000162	32,29	5,00519E-06
	150	0,000173	29,69	5,83052E-06
	200	0,000154	27,61	5,58127E-06
	450	1,78E-05	21,86	8,14234E-07
	750	9,08E-06	18,69	4,85641E-07
	1750	5,36E-06	16,26	3,29557E-07
	2750	4,86E-06	12,62	3,85053E-07
	3750	2,05E-06	11,48	1,785E-07
	4750	3,04E-11	9,01	3,36852E-12
Condiciones	Posición	Concentración Pasquill-Gifford (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 5.5 I3 (15-09) D, Z=3 nubes 0.8, GTM =2, 19.5°C	50	0,001137	40,33	2,82009E-05
	100	0,000547	35,22	1,55339E-05
	150	0,000395	32,26	1,22351E-05
	200	0,000192	30,11	6,38812E-06
	450	1,86E-05	24,16	7,69093E-07
	750	8,42E-06	20,74	4,06096E-07
	1750	4,31E-06	18,09	2,38409E-07
	2750	3,85E-06	14,04	2,7437E-07
	3750	1,58E-06	12,68	1,24959E-07
	4750	3,11E-11	10,02	3,10058E-12

4.2.3. Condiciones inestables:

Tabla 4.2.13. Comparación entre modelo y la teoría de Roberts.

Condiciones	Posición	Concentración Roberts (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 2.8 I2 (15-04) B,, Z=3 nubes 0, GTM =14, 19°C	50	6,242E-05	29,4	2,12313E-06
	100	3,15265E-05	25067	1,25769E-09
	150	2,10886E-05	22,68	9,29832E-07
	200	1,58431E-05	20,54	7,71331E-07
	450	7,06123E-06	15,45	4,57037E-07
	750	4,24055E-06	12,9	3,28725E-07
	1750	1,81878E-06	10,64	1,70938E-07
	2750	1,15765E-06	7,38	1,56863E-07
	3750	8,49027E-07	6,23	1,3628E-07
	4750	6,70323E-07	4,16	1,61135E-07
Condiciones	Posición	Concentración Roberts (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 2.8 I2 (15-04) B,, Z=3 nubes 0, GTM =14, 19°C	50	5,96722E-05	34,4	1,73466E-06
	100	3,08177E-05	28,02	1,09985E-06
	150	2,07703E-05	24,7	8,40902E-07
	200	1,56631E-05	22,49	6,96449E-07
	450	7,02536E-06	17,13	4,1012E-07
	750	4,2276E-06	14,33	2,95018E-07
	1750	1,8164E-06	11,84	1,53412E-07
	2750	1,15668E-06	8,22	1,40716E-07
	3750	8,48508E-07	6,93	1,2244E-07
	4750	6,69999E-07	8,63	7,7636E-08

Tabla 4.2.14. Comparación entre modelo y la teoría de Sutton.

Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 2.8 I2 (15-04) B,, Z=3 nubes 0, GTM =14, 19°C	50	0,001623891	29,4	5,52344E-05
	100	0,0006373	25067	2,54239E-08
	150	0,000336466	22,68	1,48354E-05
	200	0,000209193	20,54	1,01846E-05
	450	5,2329E-05	15,45	3,38699E-06
	750	2,15419E-05	12,9	1,66992E-06
	1750	4,907E-06	10,64	4,61184E-07
	2750	2,22608E-06	7,38	3,01636E-07
	3750	1,2939E-06	6,23	2,07689E-07
	4750	8,5562E-07	4,16	2,05678E-07
Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 2.8 I2 (15-04) B,, Z=3 nubes 0, GTM =14, 19°C	50	0,001768764	34,4	5,14175E-05
	100	0,000544457	28,02	1,9431E-05
	150	0,00026985	24,7	1,09251E-05

	200	0,00016359	22,49	7,27391E-06
	450	3,97121E-05	17,13	2,31828E-06
	750	1,62543E-05	14,33	1,13428E-06
	1750	3,69113E-06	11,84	3,11751E-07
	2750	1,67366E-06	8,22	2,03608E-07
	3750	9,72643E-07	6,93	1,40352E-07
	4750	6,43129E-07	8,63	7,45225E-08

Tabla 4.2.15. Comparación entre modelo y la teoría de Pasquill-Gifford.

Condiciones	Posición	Concentración Pasquill-Gifford ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulación($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Relación
UR 2.8 I2 (15-04) B,, Z=3 nubes 0, GTM =14, 19°C	0,00078588	29,4	2,67306E-05	0,00078588
	0,000628704	25067	2,5081E-08	0,000628704
	0,000471528	22,68	2,07905E-05	0,000471528
	0,000314352	20,54	1,53044E-05	0,000314352
	0,000157176	15,45	1,01732E-05	0,000157176
	0,000104784	12,9	8,1228E-06	0,000104784
	3,9294E-05	10,64	3,69305E-06	3,9294E-05
	3,14352E-05	7,38	4,25951E-06	3,14352E-05
	2,35764E-05	6,23	3,78434E-06	2,35764E-05
	1,69177E-06	4,16	4,06675E-07	1,69177E-06
Condiciones	Posición	Concentración Pasquill-Gifford ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulación($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Relación
UR 2.8 I2 (15-04) B,, Z=3 nubes 0, GTM =14, 19°C	0,000596154	34,4	1,73301E-05	0,000596154
	0,000476923	28,02	1,70208E-05	0,000476923
	0,000357693	24,7	1,44815E-05	0,000357693
	0,000238462	22,49	1,0603E-05	0,000238462
	0,000119231	17,13	6,96035E-06	0,000119231
	7,94872E-05	14,33	5,54691E-06	7,94872E-05
	2,98077E-05	11,84	2,51754E-06	2,98077E-05
	2,38462E-05	8,22	2,90099E-06	2,38462E-05
	1,78846E-05	6,93	2,58075E-06	1,78846E-05
	3,28632E-06	8,63	3,80802E-07	3,28632E-06

Tabla 4.2.16. Comparación entre modelo y la teoría de Roberts.

Condiciones	Posición	Concentración Roberts ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulación($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Relación
UR 1 I1 (01-06) A, Z=3 nubes 0, GTM =13, 33°C	50	0,004946709	19,37	0,00025538
	100	0,001941349	14,77	0,000131439
	150	0,001024946	11,95	8,57695E-05
	200	0,000637244	10,27	6,20491E-05
	450	0,000159405	6,918	2,30421E-05
	750	6,56212E-05	5,33	1,23117E-05
	1750	1,49477E-05	3,601	4,151E-06
	2750	6,78109E-06	1,83	3,70551E-06
	3750	3,94149E-06	0,883	4,46375E-06
	4750	2,6064E-06	0,3064	8,50652E-06

Condiciones	Posición	Concentración Roberts (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 1 I1 (01-06) A, Z=3 nubes 0, GTM =13, 33°C	50	0,004989199	23,43	0,000212941
	100	0,001535765	16,16	9,5035E-05
	150	0,000761174	13,08	5,81937E-05
	200	0,000461444	11,32	4,07636E-05
	450	0,000112017	7,69	1,45666E-05
	750	4,58489E-05	5,93	7,73169E-06
	1750	1,04117E-05	4,01	2,59642E-06
	2750	4,72094E-06	2,04	2,31419E-06
	3750	2,74356E-06	0,98	2,79955E-06
	4750	1,81409E-06	0,34	5,33556E-06

Tabla 4.2.17. Comparación entre modelo y la teoría de Sutton.

Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 1 I1 (01-06) A, Z=3 nubes 0, GTM =13, 33°C	50	0,004946709	19,37	0,00025538
	100	0,001941349	14,77	0,000131439
	150	0,001024946	11,95	8,57695E-05
	200	0,000637244	10,27	6,20491E-05
	450	0,000159405	6,918	2,30421E-05
	750	6,56212E-05	5,33	1,23117E-05
	1750	1,49477E-05	3,601	4,151E-06
	2750	6,78109E-06	1,83	3,70551E-06
	3750	3,94149E-06	0,883	4,46375E-06
	4750	2,6064E-06	0,3064	8,50652E-06
Condiciones	Posición	Concentración Sutton (µg/m3)	Simulación(µg/m3)	Relación
UR 1 I1 (01-06) A, Z=3 nubes 0, GTM =13, 33°C	50	0,004989199	23,43	0,000212941
	100	0,001535765	16,16	9,5035E-05
	150	0,000761174	13,08	5,81937E-05
	200	0,000461444	11,32	4,07636E-05
	450	0,000112017	7,69	1,45666E-05
	750	4,58489E-05	5,93	7,73169E-06
	1750	1,04117E-05	4,01	2,59642E-06
	2750	4,72094E-06	2,04	2,31419E-06
	3750	2,74356E-06	0,98	2,79955E-06
	4750	1,81409E-06	0,34	5,33556E-06

Tabla 4.2.18. Comparación entre modelo y la teoría de Pasquill-Gifford.

Condiciones	Posición	Concentración Pasquill-Gifford ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulación($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Relación
UR 1 I1 (01-06) A, Z=3 nubes 0, GTM =13, 33°C	50	0,000770687	19,37	3,97876E-05
	100	0,00040768	14,77	2,76019E-05
	150	0,00031195	11,95	2,61046E-05
	200	6,55079E-05	10,27	6,37857E-06
	450	1,92395E-05	6,918	2,78107E-06
	750	3,4377E-06	5,33	6,44971E-07
	1750	6,93967E-08	3,601	1,92715E-08
	2750	2,64927E-10	1,83	1,44769E-10
	3750	2,2653E-09	0,883	2,56546E-09
	4750	4,10559E-08	0,3064	1,33994E-07
Condiciones	Posición	Concentración Pasquill-Gifford ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulación($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Relación
UR 1 I1 (01-06) A, Z=3 nubes 0, GTM =13, 33°C	50	0,00066129	23,43	2,82241E-05
	100	0,000353247	16,16	2,18593E-05
	150	0,000239262	13,08	1,82922E-05
	200	5,31429E-05	11,32	4,6946E-06
	450	1,34489E-05	7,69	1,74888E-06
	750	2,39641E-06	5,93	4,04116E-07
	1750	4,83027E-08	4,01	1,20456E-08
	2750	1,84408E-10	2,04	9,03962E-11
	3750	1,57652E-09	0,98	1,60869E-09
	4750	2,8571E-08	0,34	8,40323E-08

Como podemos observar, los datos teóricos de los modelos anteriores distan mucho de los valores de nuestro modelo. En el apartado de conclusiones trataremos de justificar estos resultados.

4.3. DATOS DIARIOS DE PRESENCIA DE CONTAMINANTES DE LA COMUNIDAD AUTÓNOMA DE LA REGIÓN DE MURCIA

A continuación se muestran datos reales de concentraciones de distintos contaminantes, en $\mu\text{g}/\text{m}^3$, tomados en el Valle de Escombreras (Imágenes 4.3.1. y 4.3.2.) y en zonas de Cartagena centro, en las Imágenes 4.3.3. y 4.3.4. resultado de las mediciones diarias y por horas de las estaciones de medición localizadas en dichos puntos. Observamos diferencias claras en las distintas tablas, debido a la actividad industrial localizada en cada zona.

Los resultados de ambas estaciones se muestran a continuación:



Imagen 4.3.1. Mediciones de contaminantes en el Valle de Escombreras por horas, el día 21 de Julio de 2017. Fuente CARM.

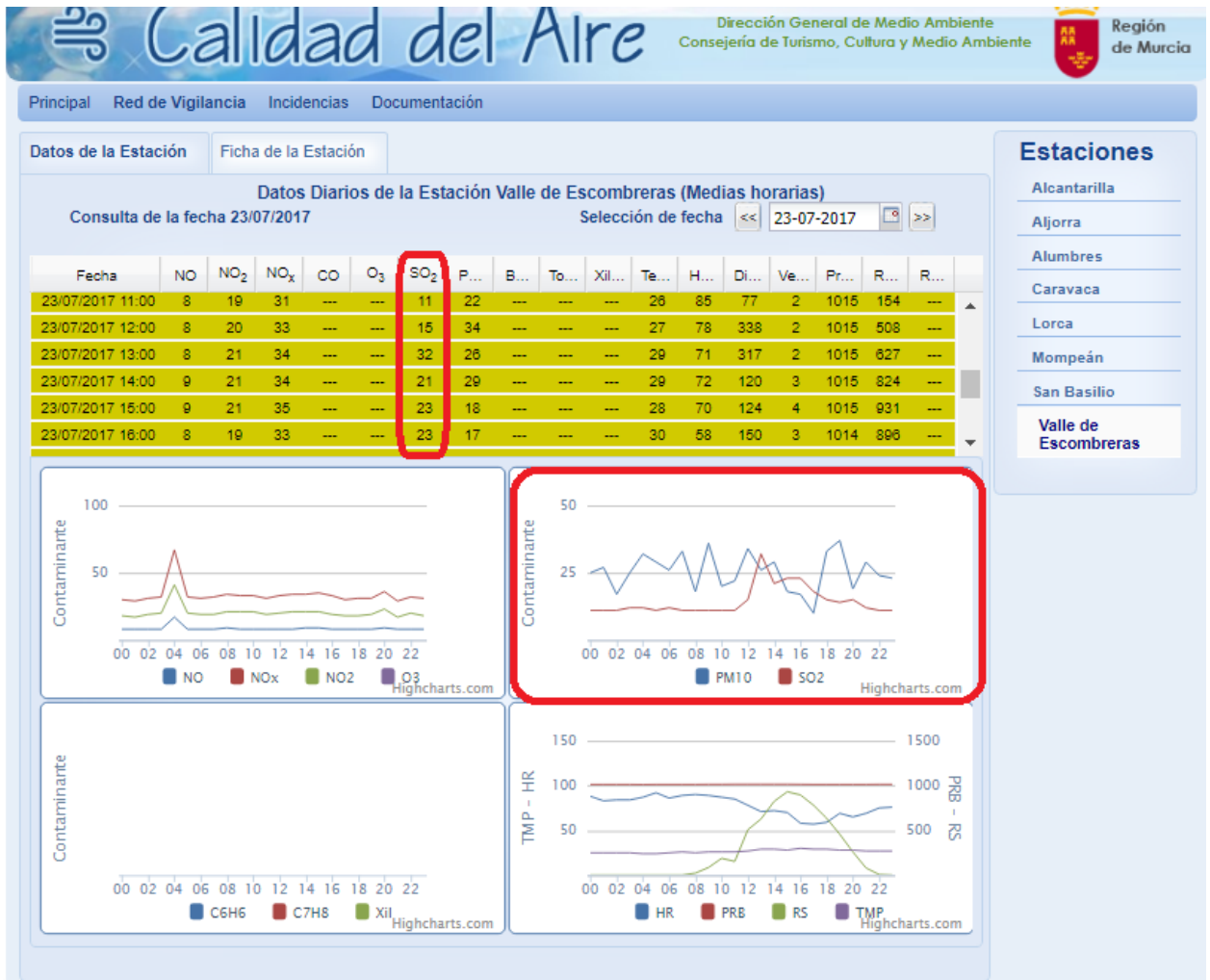


Imagen 4.3.2. Mediciones de contaminantes en el Valle de Escombreras por horas, el día 23 de Julio de 2017. Fuente CARM.



Imagen 4.3.3. Mediciones de contaminantes en Monpeán (Cartagena) por horas, el día 21 de Julio de 2017. Fuente CARM.

En el valle de escombreras se desarrolla un gran volumen de actividad industrial, por la refinería y las distintas plantas de generación, cogeneración de energía y tratamientos. Esto explica las concentraciones elevadas de contaminantes en las dos primeras imágenes.

Por otro lado, la estación situada en Cartagena, en Monpeán concretamente, registra valores menores debido a que no existen industrias que viertan polución a la atmosfera, no marcando sin embargo valores menores de 4 µg/m³ de SO₂ en ningún momento del día, debido a la difusión y el viento que los arrastra de otras zonas donde si hay vertidos.

La Imagen 4.3.1. muestra la estación de Cartagena, en Monpeán, y nos da una idea de su situación:



Imagen 4.3.4. Estación de mediciones de Monpeán, tras la estación de autobuses de Cartagena.
(CARM, 2017)

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES

5.1. CONCLUSIONES

Tras establecer las relaciones de los modelos previos de Roberts, Sutton y Pasquill-Gifford en el capítulo 4, apreciamos ciertas similitudes en los primeros 300 metros en algunos de los escenarios, pero en general, grandes diferencias entre estos y los resultados de nuestras simulaciones. Por otro lado, al comparar las simulaciones Gaussianas (Roberts etc) difieren con los datos reales recogidos en las distintas estaciones de la región y del país, y observamos una gran similitud con los resultados obtenidos en nuestro modelo aircon.

Estos valores tan pequeños de concentración en los modelos previos, poco realistas, se explican por la gran cantidad de simplificaciones asumidas por los autores, en las que se llega a eliminar el viento de las ecuaciones en muchos casos, las generalizaciones en las condiciones de entrada y la falta de situaciones intermedias en algunos casos para los distintos escenarios. El tiempo de emisión tampoco se tiene en cuenta en las emisiones continuas de los modelos, lo que afecta en gran medida a los resultados pues a mayor tiempo de emisión, mayor difusión.

Por otro lado, la pluma, al contrario que las suposiciones de los modelos, tiene partes que están mezclándose en las capas inestables o neutras, mientras que otras se encuentran estabilizadas en las capas superiores. Queda desmontada por lo tanto la aproximación Gaussiana usada por Roberts Sutton y Pasquill, que es una idealización.

Las complicadas relaciones entre el cambio de velocidad y dirección de viento debido a los obstáculos y al rozamiento se combina con los vientos térmicos, haciendo que no exista un modelo estándar de modelación de viento en la realidad, como se establece en los modelos previos. Esto si lo tenemos en cuenta en la simulación.

A todo esto debemos sumar errores en la introducción de parámetros tales como coordenadas físicas, alturas y diámetros pueden hacer variar la posición estudiada en varios kilómetros.

Para emisiones continuas, errores en los datos meteorológicos, velocidades de viento y su relación con la elevación de la pluma y su variación con respecto a la altura provocan errores importantes en los modelos.

Se ha enfatizado mucho en la mejora del modelo del aire y sus contenidos, con el objetivo de estudiar el impacto de la calidad del aire. Se necesita una mejora de los modelos ya existentes y en uso en la actualidad, y la creación de nuevos para situaciones que los antiguos no contemplan. La complejidad de los modelados de simulaciones de calidad de aire, y la gran actividad que existe en estos lo hacen una tarea compleja.

La mejora de los modelos de dispersión y el uso que a estos se les da nos ayudarán a dar un paso más hacia un medio ambiente limpio con el mínimo coste y con la menor huella posible, con el objetivo de mejorar nuestra calidad de vida.

BIBLIOGRAFÍA

Ballesta, J. y San Nicolás, J. (2003). *Guía Técnica de zonas de edificación para accidentes graves de tipo tóxico* (en el ámbito del Real Decreto 1254/99 [Seveso II]). Murcia: Universidad de Murcia.

Bruselas. EUCO 13/10 CONSEJO EUROPEO, 17 de junio de 2010.

Comunidad Autónoma de la Región de Murcia. Red de Vigilancia de *calidad del aire*. [on line] (citado en julio 2017) Disponible en: <http://singlair.carm.es/calidadaire/>

C.C. Shir. (1973). *A Preliminary Numerical Study of Atmospheric Turbulent Flow in the Idealized Planetary Boundary Layer*. San Jose, California. IBM Research Laboratory.

Colder D. (1972). Relations among stability parameters in the surface layer. *Boundary-Layer Met.* 3, 47-58.

Europa. DECISIÓN No 1386/2013/UE DEL PARLAMENTO EUROPEO Y DEL CONSEJO de 20 de noviembre de 2013 relativa al Programa General de Acción de la Unión en materia de Medio Ambiente hasta 2020.

España. Ley 33/2011, de 4 de octubre, de carácter General de Salud Pública y Ambiental. BOE 05/10/2011, núm. 240, Artículo 30 y 35.

Frank P. Lees.(1996). *Loss Prevention in the Process Industries: Hazard Identification, Assessment, and Control*. U.K. Imperial College London.

Gifford, F.A. (1960). *Atmospheric Dispersion Calculations Using the Generalized Gaussian Plume Model*. *Nuclear Safety* 2, 56-59.

H. Lettau. (1969). Note on Aerodynamic Roughness-Parameter Estimation on the Basis of Roughness-Element Description. Dept. of Meteorology. U.S.A. University of Wisconsin.

Jia Yeong, K y S. Trivikrama, R. *Numerical solution of air pollution in urban áreas: model development*. U.S.A. Divison of air resources, New York State Deparment of Environmental Conservation.

K. S. Rao y H. F. Snodgrass.(1979). *A Nonstationary Nocturnal Drainage Flow Model*. U.S.A. Oak Ridge, Tennessee. Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory.

Less, F.P. (2001). *Loss Prevention in the Process Industries*. Butterworth Hernemann. Oxford.

Mazzola CA y Addis R.P. (1995). *Atmospherics Dispersion Modeling Resource*. Washington DC, U.S.A. Oak Ridge Institute for Science and Education.

Miyakawa, T., N. Takeqawa, y Y. kondo (2007). *Removal of sulphur dioxide and formation of sulphate aerosol in Tokyo, J. Geophys.*

Organización Mundial de la Salud. *Calidad del aire ambiente (exterior) y salud*. [on line] [Consulta: 20 de Mayo de 2017] (citado en julio 2017) Disponible en: <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs313/es/>

Pasquill, F. (1961). *The Estimation of the Dispersion of Windborne Material*. Meteorological Magazine. 90, 33-49.

Prandtl L (1933). *Recent results of turbulence research Tech. Mem. NACA 720*

Roberts, O.F.T. (1923). Proc. Roy. Soc. (London), A104, p. 640.

Schlichting, H. (1936). A wind tunnel study of turbulent flow close to regularly arrayed rough surfaces. NACA Technical Memorandum.

Stanley E. Manahan, *Introducción a la química ambiental*. Traducido por Ivette Mora Leyva.

Sutton, O.G. (1953). *Micrometeorology*. McGraw-Hill, London.

Turner, D. B.: 1964, 'A Diffusion Model for an Urban Area',J. Appl. Meteor. **3**, 83–91.Google Scholar.