



industriales
etsii

**Escuela Técnica
Superior
de Ingeniería
Industrial**

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA

**Escuela Técnica Superior de Ingeniería
Industrial**

Estudio del efecto de los obstáculos en la inmisión de dióxido de azufre debido a la difusión de contaminantes emitidos por fuentes puntuales

TRABAJO FIN DE GRADO

**GRADO EN INGENIERÍA EN TECNOLOGÍAS
INDUSTRIALES**

**Autor: Javier Mendoza Fernández
Director: Juan Francisco Sánchez Pérez
Codirector: Laura María González de Ángel**



**Universidad
Politécnica
de Cartagena**

Cartagena, diciembre de 2018

Agradecimientos:

Quiero dirigir mis agradecimientos a mis padres y hermanos, a Laura María González de Ángel como codirectora del proyecto y en especial al Dr. Juan Francisco Sánchez Pérez, cuya atención y colaboración hicieron posible la realización de este trabajo. Gracias.

INDICE

CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

1.1 INTRODUCCIÓN	1
1.2 OBJETIVOS DEL PROYECTO.....	2

CAPÍTULO 2: PROPIEDADES QUÍMICAS Y FUENTES DE EMISION DE AZUFRE

2.1. INTRODUCCIÓN	3
2.2. YACIMIENTOS Y EXTRACCIÓN DEL AZUFRE.	4
2.3 PROPIEDADES DEL AZUFRE	5
2.2.1 Reacción de oxidación del dióxido de azufre	6
2.4 PROCESOS DE PRODUCCIÓN DE AZUFRE.....	8
2.5 PRODUCCIÓN DE ÁCIDO SULFÚRICO	11
2.5.1 Emisiones de SO ₂	14

CAPÍTULO 3: FENÓMENOS DE DIFUSIÓN DE CONTAMINANTES

3.1. INTRODUCCIÓN	17
3.2 FACTORES QUE INFLUYEN EN LA DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES.....	17
3.2.1 Efecto de la velocidad y dirección del viento	17
3.2.2 Efecto de la turbulencia.....	18
3.2.2.1 Torbellinos	18
3.2.2.2 Ecuaciones de Reynolds para flujo turbulento	20
3.2.3 Efecto de la estabilidad de la atmosfera	24
3.2.3.1 Análisis de las condiciones de estabilidad.....	26
3.2.4 Efecto de la topografía	28
3.3 DINÁMICA DEL CONTAMINANTE ALREDEDOR DEL OBSTÁCULO.....	29
3.3.1 Concepto de capa limite.....	30
3.3.2 Concepto de capa limite térmica	32
3.3.3 Ecuaciones de la capa limite turbulenta para un gas que se choca contra un obstáculo:	35
3.4 DISPERSIÓN DEL CONTAMINANTE EN LA SALIDA DE LA CHIMENEA	36

CAPÍTULO 4: MODELOS DE DISPERSION ATMOSFERICA

4.1 INTRODUCCIÓN	42
4.2 MODELOS DE DISPERSIÓN GAUSSIANO.	44
4.3 APLICACIÓN AL CASO DE LA EMISIÓN DE UN CONTAMINANTE POR UNA CHIMENEA DE ALTURA H.....	45
4.4 DESVIACIONES DE LOS PARÁMETROS DE DISPERSIÓN.	48

CAPÍTULO 5: DESCRIPCIÓN DEL SOFTWARE ELABORADO CON EL MÉTODO DE SIMULACIÓN POR REDES

5.1 MÉTODO DE SIMULACIÓN POR REDES. 52

5.2 VIABILIDAD DEL MODELO EN RED Y CLASIFICACIÓN DE LOS ELEMENTOS DEL MODELO.. 54

5.3 EXPLICACIÓN DEL SOFTWARE DE RESOLUCIÓN DE CIRCUITOS PSPICE. 58

CAPÍTULO 6: RESULTADOS

6.1 DESARROLLO EXPERIMENTAL 60

6.2 INTRODUCCIÓN DE DATOS..... 61

6.3. RESULTADOS DE LAS SIMULACIONES Y GRAFICAS 65

6.4. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS 79

 6.4.1. Efecto de las dimensiones del obstáculo..... 79

 6.4.2. Efecto de la distancia de separación entre el obstáculo y la chimenea. 81

 6.4.3 Aplicación del estudio para disminuir la concentración en una ciudad situada 400 metros del foco de emisión..... 82

CAPÍTULO 7: CONCLUSIONES

7.1 CONCLUSIONES..... 85

BIBLIOGRAFÍA 87

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

1.1 INTRODUCCIÓN

Este proyecto abarca uno de los temas más importantes de la actualidad como es la contaminación atmosférica. La contaminación atmosférica se define como *“la presencia en la atmosfera exterior de uno o más contaminantes y sus combinaciones, en cantidades tales o y con tal duración que sean o puedan afectar la vida humana, de animales, de plantas, o de la propiedad, que interfiera el goce, la propiedad, o el ejercicio de las actividades”*.

En particular, en este estudio se tratará la difusión de uno de los contaminantes atmosféricos derivados del azufre que con más frecuencia se encuentra en ella, el Dióxido de azufre (SO₂).

La importancia de este estudio radica en que sin un adecuado control de este contaminante, el dióxido de azufre podría reaccionar con el resto de elementos de la atmósfera, convirtiéndose principalmente en trióxido de azufre (SO₃), por oxidación del mismo, y posteriormente en ácido sulfúrico (H₂SO₄) debido a la humedad del aire.

Entre los efectos provocados por la contaminación del dióxido de azufre se encuentran:

- Reducción de la visibilidad si la concentración de este contaminante es lo suficientemente grande.
- Provocar daños sobre materiales, oxidar los metales, dañar la vegetación y los árboles etc...
- Afectar a la salud, puede provocar asma, broncoconstricción sobre personas y animales y puede tener efectos epidemiológicos.
- Provoca la lluvia acida, la cual produce la acidificación de las fuentes naturales de agua provocando un efecto negativo sobre la vida de los peces y demás fauna, la desmineralización del suelo el cual arruina las cosechas y los bosques etc...

Hay que decir que estos contaminantes suelen propagarse por las capas más bajas de la atmosfera y pueden ser arrastrados a cientos de kilómetros del foco de emisión.

Para predecir pues la dispersión de este contaminante se ha utilizado el modelo matemático ofrecido por (Jia-Yeong) (1986), pues este modelo incluye los efectos de las reacciones químicas que se dan entre los contaminantes emitidos además de otros aspectos importantes en la dispersión del mismo. Para el cálculo de la concentración se ha implementado el método de simulación por redes (MESIR).

La realización de este proyecto consto de tres etapas:

- Recopilación de todos los efectos que influyen en el transporte de contaminantes tanto en la atmosfera como alrededor de los obstáculos.
- Implementación del modelo de dispersión utilizando el programa MATLAB
- Simulación de los resultados, análisis y elaboración de las conclusiones.

1.2 OBJETIVOS DEL PROYECTO

El objetivo principal del proyecto es el estudio del efecto de los obstáculos en la inmisión de dióxido de azufre debido a la difusión de contaminantes emitidos por fuentes puntuales, lo que conlleva los siguientes objetivos parciales:

- Estudio de las propiedades químicas del dióxido de azufre
- Estudio de los fenómenos de difusión de contaminantes
- Estudio y entendimiento de software elaborado con el método de redes.
- Simulación de varios escenarios
- Análisis de los resultados obtenidos

CAPÍTULO 2

PROPIEDADES QUÍMICAS Y
FUENTES DE EMISIÓN DEL
DIÓXIDO DE AZUFRE.

CAPÍTULO 2

PROPIEDADES QUÍMICAS Y FUENTES DE EMISIÓN DEL DIÓXIDO DE AZUFRE.

2.1. INTRODUCCIÓN

En este tema se comentarán los procesos más notorios y que con mayor probabilidad pueden caracterizar la fuente de la que se emiten este tipo de contaminante, efectivamente, estos procesos están relacionados tanto con la generación de azufre elemental como con la fabricación de ácido sulfúrico, pues se trata del producto que a día de hoy cuenta con mayor relevancia en el ámbito industrial, sin embargo este no es el único tipo de fuente de donde se puede emitir este contaminante. Estos tipos de fuentes pueden ser naturales como las que tienen lugar en el caso de volcanes, o emitidos por el hombre como es el caso de automóviles, plantas de generación de energía en las que se queman combustibles o por supuesto, las plantas químicas entre las que se encuentran las antes comentadas.

La importancia de detallar a qué tipo de fuente nos referimos radica en que factores como:

- La naturaleza de los gases que se emiten, por ejemplo:
 - si se trata exclusivamente de contaminantes gaseosos (como en nuestro caso que únicamente tratamos dióxido de azufre) o si por el contrario se encuentra partículas de polvo suspendidas en este contaminante.
 - si se trata de un contaminante primario (emitidos por fuentes puntuales) o secundarios (Se forman en la atmosfera como consecuencias de reacciones de hidrolisis u oxidación por parte de los primarios como puede ser el caso del ácido sulfúrico).
- Factores de emisión: Es decir, conocer al menos una estimación de las emisiones de una planta industrial ,cuanto produce, que tipo de combustión tiene lugar...

Todo ello permite elaborar una compilación de información acerca de las emisiones que tienen lugar en una determinada área geográfica y un

periodo de tiempo concreto y sirven elaborar herramientas de cálculo capaces de estimar la calidad del aire englobando en ellos conceptos como la magnitud, frecuencia o duración de esas emisiones y cuya recopilación a lo largo del tiempo nos permiten anticipar problemas futuros. Lo que hace que conocer el tipo de fuente sea uno de los factores principales que influyen en la dispersión de contaminantes

2.2. YACIMIENTOS Y EXTRACCIÓN DEL AZUFRE.

En la actualidad el azufre es uno de los materiales más abundantes que existen en la tierra, se estima que en el mundo existen alrededor de 120 millones de toneladas de azufre, representando aproximadamente el 0,052 % del peso de la corteza terrestre. Los yacimientos de azufre puro no se encuentran distribuidos uniformemente por todo el globo. Podemos encontrarlos en zonas muy concretas como puede ser en algunos lugares de México y el sur de Norteamérica.

Sin embargo estos yacimientos suelen ser muy escasos, por lo que para la obtención del azufre se suele recurrir a la pirita (FeS_2) como materia prima debido a que mediante diferentes procesos, en general procesos de tostación, se consigue extraer el azufre de este mineral, cuyos yacimientos sí que son más abundantes, entre todos ellos destacan los yacimientos de pirita de Huelva los cuales son capaces de abastecer a gran parte de la Europa continental, situando a España como la mayor potencia mundial en cuanto a reservas de piritas se refiere. *Albert Cotton, F. y Geoffrey Wilkinson, F.R.S. (1969).*



Figura 2.1.1. Minas de Riotinto. Velázquez Jiménez (2017).

2.3 PROPIEDADES DEL AZUFRE

El azufre es un elemento perteneciente al grupo de los anfígenos, los elementos de este grupo suelen tener un marcado carácter iónico debido a que poseen seis electrones en su última capa, por lo que suelen captar electrones para alcanzar la configuración de gas noble. Posee más o menos las mismas propiedades que el resto de elementos de su grupo a excepción del oxígeno, esto es debido entre otras cosas a que la electronegatividad del oxígeno es muy superior al resto de los elementos del grupo y a que a diferencia del mismo el número de coordinación no está limitado a un valor en concreto debido a la presencia de orbitales *d* disponibles para formar enlaces.

Esta última particularidad de hibridizar los orbitales es la que tiene lugar en el enlace que se produce entre el azufre y el oxígeno pues se trata de un enlace muy corto, esto último indica a su vez que se trata de un enlace múltiple, lo que solo se puede explicar si el azufre comparte electrones de sus orbitales *d* con los orbitales *p* del oxígeno

En cuanto a sus propiedades físicas, a temperatura ambiente presenta una estructura cristalina de forma rómbica, si el azufre se somete a un calentamiento lento sufre, a la temperatura de 95,5 °C una transformación de su estructura cristalina pasando a tener una estructura monoclinica:

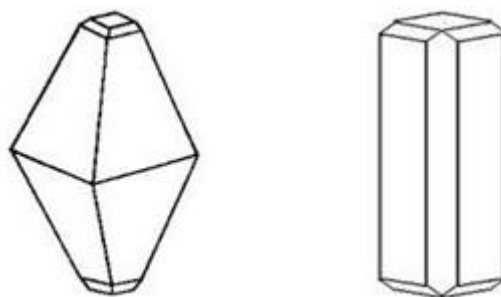


Figura 2.2.1. ADMIN. Politrópicas del azufre ADMIN. (2014)

Esta nueva estructura funde a la temperatura de 118,9 °C, sin embargo si el calentamiento se produce de forma brusca se consigue evitar esta fase consiguiendo así que la estructura rómbica funda a la temperatura de 112,8 °C.

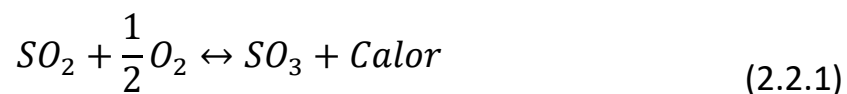
Aunque en su forma sólida suele presentar color amarillo pálido, en estado fundido suele presentar un color rojizo ámbar con olor a picante, como veremos después es esta la forma en la que se extrae y transporta el azufre

y la manera en la que se usa en la industria. Se trata de un líquido inflamable pudiendo explotar en atmosferas en las que se encuentren suspendido alguna especie de polvo fino (aluminio, nitratos, cloratos Bromatos y otros), sin embargo su temperatura de autoignicion se presenta a 232 °C produciéndose la reacción de combustión mediante el contacto con el aire. Entre los productos peligrosos de la combustión del azufre se encuentran el sulfuro de hidrogeno y el dióxido de azufre además de diferentes polisulfuro

Por lo mencionado anteriormente, para su transporte se procura mantenerlo en unas atmosfera ventilada para que no se produzca la acumulación de oxidantes y vapores peligrosos. Por lo que se suele transportar en camiones con tanques de azufre que se encuentran aislados o climatizados a la temperatura de 125°C.

2.2.1 Reacción de oxidación del dióxido de azufre

Esta reacción constituye el núcleo del proceso de contacto que se utiliza en las plantas de ácido sulfúrico. La reacción de oxidación que tiene lugar es la siguiente:



Se trata entonces de una reacción exotérmica y reversible. Otra característica de esta reacción es que se va haciendo más reversible a medida que se va aumentando la temperatura o se incrementa la concentración de SO_3 . Sin embargo el aumento de esta reversibilidad no es bueno pues entorpece la conversión del SO_2 a SO_3 . *Wayne T, D. (2000)*

Por ello lo que se busca en la industria es operar en el punto en que la reacción alcanza el equilibrio de manera que no se produzca la conversión adicional de SO_2 a SO_3 . Este equilibrio suele depender de la composición del gas, la temperatura y la presión. Las condiciones en las que se alcanza el equilibrio pueden ser expresadas, según la ley de las masas, de la siguiente manera:

$$\frac{[SO_3]}{[SO_2]} = \sqrt{\frac{(O_2)}{K}} \quad (2.2.2)$$

Donde el valor de la constante K depende de la temperatura y la presión de la siguiente manera:

$$K = \frac{p_{SO_2} p_{O_2}^{1/2}}{p_{SO_3}} \quad (2.2.3)$$

$$\log K = \frac{5186,4}{T} + 0,611 \log T - 6,4797 \quad (2.2.4)$$

Esta dependencia de la temperatura fue realizada por *M.bodenstein y Pohl* (1905). Basándonos pues, en estas expresiones se puede observar que el rendimiento de la transformación aumenta cuanto mayor es la cantidad de oxígeno que se encuentra presente y que, aunque esta reacción suele realizarse a alta temperatura (400°C), pues la separación de los compuestos intermedios que surgen debido al catalizador empleado para acelerar la velocidad de la reacción así lo exigen, una temperatura superior a esta tiene el efecto de reducir la conversión de SO₂ a SO₃. A continuación se muestra una tabla donde se recogen valores que se producen para distintas composiciones y temperaturas:

Composición de la mezcla con SO ₂			Transformación = % de la teoría a distintas temperaturas					
N ₂ Vol. %	SO ₂ Vol. %	O ₂ Vol. %	400 °C	500 °C	600 °C	700 °C	800 °C	900 °C
84,85	10,10	5,05	96,20	83,20	59,10	31,90	15,00	7,00
83,00	7,00	10,00	99,30	93,40	73,30	42,50	20,50	9,80
81,40	4,00	14,60	99,40	94,90	78,30	48,10	24,20	11,70
80,00	2,00	18,00	99,40	95,60	80,50	51,30	26,30	12,90
79,00	14,00	7,00	99,30	84,70	62,20	35,20	18,30	8,20
89,50	7,00	3,50	93,20	81,20	55,50	28,50	12,90	6,00
0,00	66,67	33,33	98,10	91,30	76,30	51,50	30,10	16,00
0,00	33,33	66,67	99,70	97,30	88,50	60,60	40,40	22,00
0,00	14,00	86,00	99,80	97,90	90,30	69,80	43,90	24,40
0,00	7,00	93,00	99,80	98,10	90,50	70,70	44,90	25,30
0,00	2,00	98,00	99,80	98,20	90,80	71,20	45,50	25,60

Tabla 2.2.1. Formación de SO₃ en los gases conteniendo SO₂. Bodesnstein y Pohl. (1904).

Como hemos dicho, dentro del ámbito de los procesos industriales esta reacción suele realizarse en presencia de un catalizador generalmente de platino o vanadio ya que en circunstancias normales suele tratarse de una

reacción bastante lenta. Sin embargo esta reacción puede tener lugar en la atmosfera, de manera que el SO_3 generado mezclado con la humedad de la atmosfera puede dar lugar a la lluvia ácida.

2.4 PROCESOS DE PRODUCCIÓN DE AZUFRE.

Actualmente el dióxido de azufre (SO_2) es emitido en gran parte de los procesos industriales en los que tiene lugar la combustión de combustibles y el procesamiento de minerales como la pirita, yeso (sulfato cálcico), anhidrita, etc.... mediante diversos métodos. Este tipo de procesos se conocen como tostación. A continuación se exponen los dos métodos más utilizados:

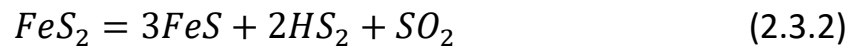
- Calentamiento en una atmosfera reductora:

Existen diferentes procesos que se abarcan dentro de este concepto, uno de los más habituales es el de tostación de la pirita, según el cual se calienta la pirita a la temperatura de $500\text{ }^\circ\text{C}$ de manera que se consigue separar un átomo de azufre.



Posteriormente, el sulfuro de hierro que queda era tostado produciendo durante el proceso dióxido de azufre. Aunque este proceso es sencillo no se suele utilizar industrialmente de esta manera ya que el proceso de calentamiento requiere una gran cantidad de combustible lo que provoca que este método sea inviable económicamente. Para contrarrestar este hecho se realiza lo mismo pero en presencia de una pequeña cantidad de aire para que uno de los átomos de azufre presentes en la pirita reaccionara con el oxígeno del mismo de manera que la combustión producida proporcionara el calor suficiente para llevar a cabo la tostación, la desventaja es que se produce dióxido de azufre como producto secundario. *K. Winnacker y E. weingaertner (1954).*

Otros métodos utilizados consisten en aprovechar la reacción de la pirita con el vapor de agua de manera que se obtienen como productos de la reacción sulfuro de hierro puro junto con dióxido de azufre y ácido sulfhídrico:



Posteriormente el dióxido de azufre reacciona con el ácido sulfhídrico dando lugar a azufre y agua:

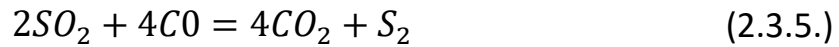


- Proceso Orkla:

Consiste en fundir la piritita utilizando coque como combustible de manera que el dióxido de azufre generado que se pone en contacto con el coque se reduce a azufre. Además como consecuencia del proceso se generan los siguientes gases: vapor de agua, H₂S, SO₂, CO, CO₂ y COS además de ciertos metales volátiles, estos gases son pasados posteriormente por dos cámaras que eliminan el polvo y los metales volátiles haciendo pasar los gases resultantes por una instalación en la que se produce el contacto del mismo con bauxita a la temperatura de 500°C, como consecuencia de la reacción que ahí se produce se obtiene azufre. Posteriormente los gases son enfriados hasta una temperatura de 200 °C haciéndolos pasar por una caldera de recuperación, pudiéndose aprovechar este calor para otros procesos industriales, y penetran en una segunda cámara donde se deposita el azufre fundido. *K.Winnacker y E.weingaertner (1954).*

También se suele aprovechar los gases residuales generados tras estos procesos de tostación para extraer de ellas el azufre sometiéndolas a diversos procesos químicos. De esta manera se intenta emitir lo menos posible de este contaminante a la atmosfera

En el caso del dióxido de azufre, el método consiste hacer pasar estos gases generados por un proceso de lavado ya que estos suelen incorporar compuestos adicionales además del dióxido de azufre tal y como se ha comentado anteriormente, hasta que se obtiene SO₂ con una pureza del 100 %, una vez realizado esto se procede a su reducción. Durante este proceso suelen tener lugar las siguientes reacciones:



Una vez realizado este proceso se baja la temperatura de los gases en un recuperador de calor de manera que el azufre condensa y se purifica haciéndolo pasar por un purificador. Este método implantado por la *Lurgi-Chemie* se presenta en la siguiente figura:

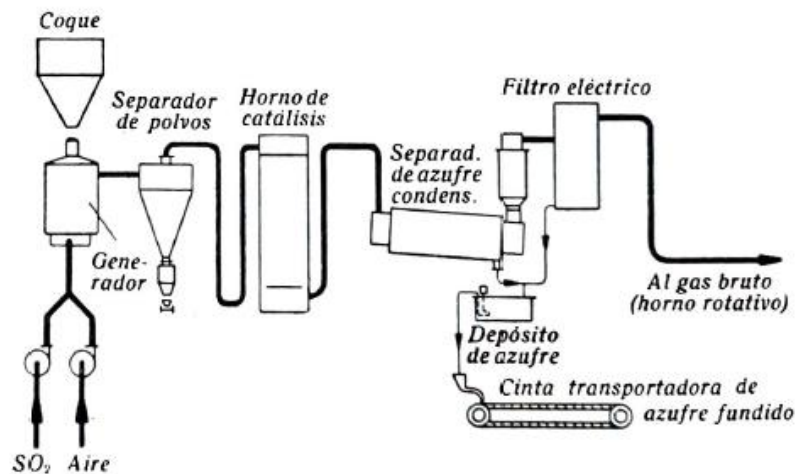


Figura 2.3.1.Reduccion del SO_2 por el método de la Lurgi Chemie. Winnacker, K. y Weingaertner.E. (1954).

Otros procesos consiste en aprovechar el ácido sulfhídrico que como también hemos visto se genera en este tipo de procesos industriales, esto se realiza por el llamado método de *Le-Blanc*, y se llevan a cabo en los llamados hornos *Claus*. Estos hornos suelen tener unos 5 o 6 metros de alto y unos 10 metros de diámetro. El método consiste simplemente en la combustión de este ácido con cantidad insuficiente de oxígeno ya que si se utiliza la cantidad estequiométrica se generaría dióxido de azufre, cosa que aun así suele pasar, por este motivo. La reacción que se produce es la siguiente:



En 1936 *Braus*, consiguió mejorar, este método consiste en reproducir la misma reacción anterior solo que en dos partes, la primera quemando el

60 %-70% en un primer horno, quemando el resto junto con los gases de la combustión posterior en un segundo horno *Claus*, aumentando de esta manera el rendimiento del proceso. *K. Winnacker y E. weingaertner (1954)*.

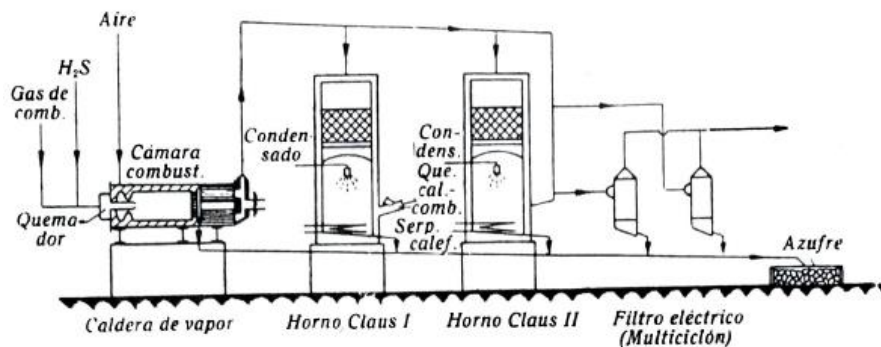


Figura 2.3.2. Esquema de una instalación de Hornos Claus .Winnacker, K. y Weingaertner, E. (1954).

2.5 PRODUCCIÓN DE ÁCIDO SULFÚRICO

Como hemos visto el SO_2 , se genera como producto secundario en gran cantidad de los procesos industriales relacionados con la extracción del azufre elemental, sin embargo la producción de este gas es realizada en la industria como proceso intermedio en la creación de ácido sulfúrico por ello constituyen otro importante foco de emisión de dióxido de azufre que merece la pena destacar.

El ácido sulfúrico se forma como consecuencia de la oxidación del dióxido de azufre de lo cual se obtiene trióxido de azufre (SO_3) que al mezclarse con agua da lugar a este ácido.



La mayoría del dióxido de azufre que es usado para la creación de ácido sulfúrico proviene de los procesos de tostación de minerales antes comentados. Sin embargo también es frecuente utilizar el sulfuro de hidrogeno que se encuentra entre los gases húmedos expulsados en los anteriores procesos o incluso se procede a la descomposición térmica del propio ácido sulfúrico que no es utilizado.

La conversión de dióxido de azufre a trióxido de azufre se suele hacer mediante dos procedimientos:

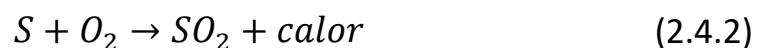
- Proceso de cámara: Este proceso consiste en oxidar el dióxido de azufre utilizando como agente oxidante el dióxido de nitrógeno aprovechando la reducción a monóxido de azufre que sufre este gas al hacerlo reaccionar con el dióxido de azufre quedando, finalmente, trióxido de azufre.
- Proceso de contacto: Consiste en conseguir la oxidación del dióxido de azufre empleando esta vez un catalizador de vanadio, generalmente pentaóxido de vanadio, pues se trata de un óxido anfótero, es decir, que es capaz de ejercer tanto de ácido como de base.

Aunque en los inicios el proceso de cámara era el más utilizado las continuas mejoras que se han ido aplicando con los años al proceso de contacto han hecho que en la actualidad sea este proceso el que generalmente se utiliza en la producción de ácido sulfúrico.

Entre los procesos de cámara de contacto se puede distinguir entre:

- Proceso de absorción simple: La combustión del aire se suele realizar en un único soplador centrífugo que normalmente se encuentra conducido por una turbina de vapor, aunque también puede utilizarse para ello la energía que se recupera de las plantas de cogeneración. El aire de la combustión debe pasar primero por una torre de secado antes de entrar en el quemador de azufre. También se elimina la humedad del aire haciendo pasar ácido sulfúrico a contracorriente, este ácido es continuamente eliminado y remplazado por un ácido más fuerte que proviene de la torre de absorción. *Wayne T, D. (2000)*

El azufre fundido, en su forma rómica, es bombeado al horno donde se mezcla con el aire seco generándose SO_2 según la reacción:



La concentración de SO_2 que deja el horno oscila entre el 7%-11% del volumen total, aunque es posible que también se produzca un poco de SO_3 que si no se contabiliza, la cantidad del mismo puede ser suficiente para que los cálculos de la conversión y las emisiones de SO_2 por tonelada de ácido pueden ser erróneos.

Posteriormente el SO_2 y el exceso de aire es que dejan el quemador a $700\text{ }^\circ\text{C}$ - $1000\text{ }^\circ\text{C}$ es enfriado en un intercambiador de calor hasta una temperatura de $425\text{ }^\circ\text{C}$ antes de entrar en el convertidor, donde se realiza la conversión de SO_2 a SO_3 en diferentes pasos. Por último el gas que sale del convertidor es enfriado a $185\text{-}200\text{ }^\circ\text{C}$ en un economizador para luego entrar por la parte inferior a la torre de absorción, donde el SO_3 es absorbido. Para mantener la intensidad con la que se produce la absorción, el agua junto con la recirculación de ácidos débiles son añadidos a la torre de absorción, aunque adicionalmente suele ser necesario añadir todavía más agua.

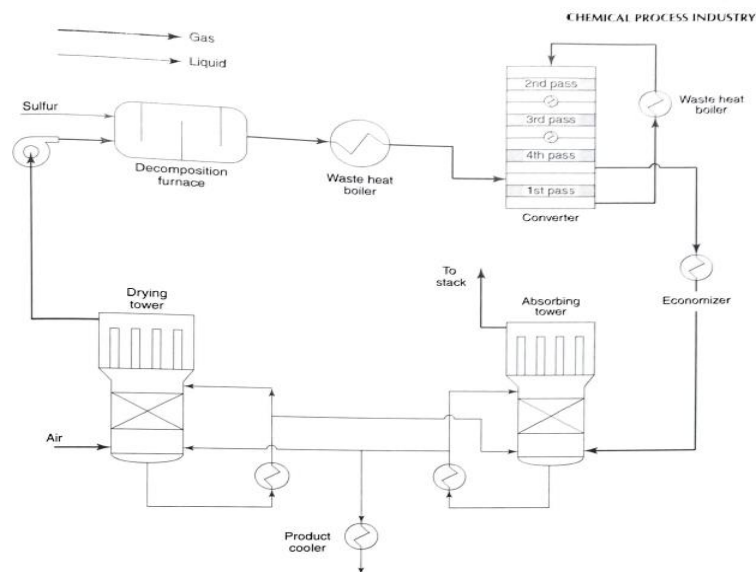


Figura 2.4.1. Esquema planta de producción de ácido sulfúrico de absorción simple. Wayne T, D. (2000).

- Proceso de absorción doble: El principio básico de este proceso es semejante al anterior, la única diferencia con respecto a este último radica en que los gases que provienen del proceso de absorción única se extraen en un paso intermedio del convertidor para ser enfriados y enviados a una torre de absorción intermedia de manera que parte se convierte en ácido sulfúrico y el resto de SO_3 es recirculado al último paso del convertidor donde casi todo el SO_2 es convertido en SO_3 y es enfriado y enviado a una segunda torre de absorción donde el resto de SO_3 es absorbido. La ventaja principal con respecto al método de absorción única es que se consiguen una mayor conversión, cercano al 99,7%.

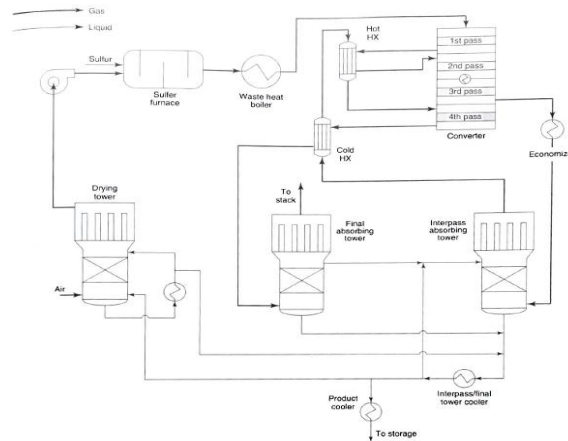


Figura 2.4.2. Esquema planta de producción de ácido sulfúrico de absorción doble. Wayne T, D. (2000).

2.5.1 Emisiones de SO₂

Según el *Sistema Español de Inventario de Emisiones (2014)*, Las plantas de producción de ácido sulfúrico constituyen un importante foco de emisión de SO₂ al aire. Estas plantas llevan asociadas las siguientes fuentes de emisión:

- Horno caldera: La oxidación de dióxido de azufre lleva asociada la emisión de este gas
- Oxidación catalítica: La conversión incompleta de SO₂ a SO₃ debido a la eficiencia del proceso da lugar a emisiones de SO₂
- Torre de absorción: Se producen emisiones de SO₂, dado que la conversión no es completa y además, se puede producir una niebla ácida por la formación del ácido sulfúrico.
- Consumo auxiliar de combustibles: Lleva asociada la emisión de gases de efecto invernadero y contaminantes propios de la combustión en las unidades de generación de energía para el proceso (calderas, motores, turbinas)

Las emisiones de SO₂ en el tipo de plantas antes mencionadas depende también del tipo de tecnología usada y por tanto cada empresa emite por lo general una cantidad distinta de este contaminante a la atmósfera.

Por tanto, para el cálculo general de estas emisiones normalmente se hace uso de unos factores de emisión que son calculados a partir de los datos de emisión proporcionados por cada planta durante un periodo de tiempo, de

manera que estos factores multiplicados por la producción total de la planta nos proporciona una estimación de estas emisiones:

$$Emisiones\ de\ SO_2 = \sum_{i=m}^n P_i \cdot FE_i / 10^9 \quad (2.4.3)$$

Donde:

P_i = Producción de ácido sulfúrico de la planta i en (t)

FE_i = Factor de emisión implícito de la planta i (g SO₂/ t ácido sulfúrico)

Los factores de emisión utilizados para el caso de las plantas anteriores se recogen en la siguiente tabla:

AÑO	SO ₂ (g/t)			
	TIPO DE PROCESO			
	SIMPLE ABSORCION	DOBLE ABSORCION	PROCESO DE CAMARAS	PROCESO KASKAROV
1990	5,502	2,005	4,4	2,500
1991	6,193	2,006	1,0	-
1992	7,128	2,220	-	-
1993	6,810	2,314	-	-
1994	6,840	2,072	-	-
1995	7,358	2,180	-	-
1996	1,452	1,899	-	-
1997	1,452	1,925	-	-
1998	1,452	1,897	-	-
1999	1,452	1,954	-	-
2000	1,452	2,076	-	-
2001	1,590	1,813	-	-
2002	-	1,699	-	-
2003	-	1,669	-	-
2004	-	1,620	-	-
2005	-	1,695	-	-
2006	-	1,782	-	-
2007	-	1,709	-	-
2008	-	1,636	-	-
2009	-	1,678	-	-
2010	-	1,545	-	-
2011	-	1,530	-	-
2012	-	1,271	-	-
2013	-	1,204	-	-
2014	-	1,151	-	-
2015	-	1,222	-	-

Tabla 2.4.1 Datos Factores de emisión implícitos .fuente Sistema Español de Inventario de Emisiones.2014

CAPÍTULO 3

FENÓMENOS DE DIFUSIÓN
DE CONTAMINANTES.

CAPÍTULO 3

FENÓMENOS DE DIFUSIÓN DE CONTAMINANTES.

3.1. INTRODUCCIÓN

En este capítulo se intentaran abordar los aspectos principales de los fenómenos que tienen lugar en difusión de contaminantes atmosféricos. En principio se intentaran introducir brevemente cómo se comportan dichos contaminantes de manera general para ir llegando poco a poco a detallar casos particulares como los efectos que tienen lugar la presencia de obstáculos que es el principal objetivo de este estudio. También se analizaran la influencia que pueda tener sobre él la propagación de nuestro contaminante por el medio.

3.2 FACTORES QUE INFLUYEN EN LA DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES

Como hemos visto en el capítulo anterior, el tipo de fuente de donde provenga el contaminante constituye un factor importante pues como veremos más adelante el valor de las emisiones que tengamos influye de manera directa en la dispersión del contaminante.

Sin embargo, también influyen otros factores como puede ser la velocidad y dirección del viento, la turbulencia, la estabilidad atmosférica, la topografía de terreno, etc...

3.2.1 Efecto de la velocidad y dirección del viento

Como cabría de esperar la dirección y velocidad del viento constituye un factor muy importante a la hora de modelizar la dispersión de contaminantes y en la dilución de los mismos en la atmosfera

Según la literatura, la velocidad del viento tiene el efecto de incrementar el volumen de aire desplazado por unidad de tiempo conforme este aumenta. Por lo tanto si se supone que la emisión del contaminante es más o menos constante, doblar la velocidad del viento, tiene como consecuencia que la concentración de los contaminantes se reduce a la mitad, es decir, la concentración de los contaminantes está relacionado con la velocidad del viento de manera inversa.

Por otro lado la dirección del viento también tiene un efecto importante sobre la dispersión del contaminante, ya que si se supone que el viento adquiere una dirección determinada que sea relativamente constante, una misma área de la nube de gases sería afectada por este viento, lo cual provocaría un movimiento que dispersaría los gases a lo largo de este área y por lo tanto la concentración a lo largo de la misma sería menor. Sin embargo tener en cuenta esto no es tan fácil debido a que la dirección del viento puede ir variando continuamente a lo largo del tiempo. *H.F.Liu, D. y G.Lipták, B. (2000).*

3.2.2 Efecto de la turbulencia

El concepto de turbulencia es un término difícil de describir, por decirlo de alguna forma es el nombre que recibe un flujo cuando deja de ser laminar, es decir, cuando el número de Reynolds alcanza valores muy elevados. Cuando esto ocurre la estabilidad del movimiento se pierde y es imposible describir la trayectoria de la partícula fluida. Por otro lado, La turbulencia tiene el efecto de uniformizar el perfil de velocidades del flujo, los fenómenos de transporte y mezcla suelen aumentar con la misma.

En este apartado, se tratará entonces de definir las ecuaciones que rigen el comportamiento de un fluido que se encuentra en régimen turbulento y los efectos que este produce.

3.2.2.1 Torbellinos

Las inestabilidades provocadas por las altas temperaturas que se alcanzan a la salida de las chimeneas o por la fricción que ejercen tanto el suelo como las paredes de nuestro obstáculo suelen conducir a la formación de torbellinos que a su vez también son inestables y tienden a generar y a dividirse en otros torbellinos más pequeños. Este fenómeno suele prolongarse hasta que la escala o dimensión característica de estos torbellinos es lo suficientemente pequeña como para que el número de Reynolds característico de cada uno de ellos sean tan insignificante que la inestabilidad no pueda proseguir. Por lo tanto puede intuirse que el movimiento turbulento no es un movimiento que tiene lugar en una sola escala sino que se encuentra formada por todo un rango de escalas en cada una de las cuales los efectos viscosos se hacen presentes, de manera que

los torbellinos de escalas superiores transmiten la energía cinética a escalas inferiores hasta que al final terminan degradándose en forma de calor. *Viedma Robles A. (2016)*

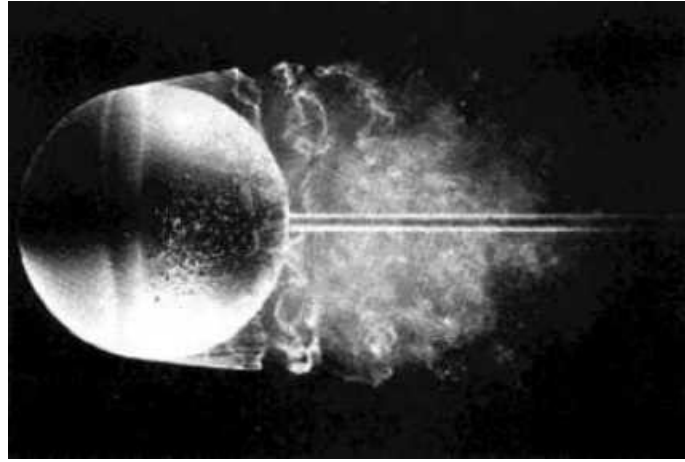


Figura 3.1.1. Flujo turbulento alrededor de paredes. Viedma Robles. A. (2016)

Esta transmisión de energía cinética de escalas superiores a inferiores suele producirse siempre al mismo ritmo, que denominamos “ ε ”. Por lo tanto:

$$\varepsilon = \frac{dEc}{dt} \quad (3.1.1)$$

Si denotamos los valores característicos de cada escala como u, λ, τ velocidad, longitud y tiempo característicos respectivamente y haciendo uso del análisis dimensional, este valor sería proporcional a la energía cinética de cada escala y al inverso de su tiempo característico:

$$\varepsilon = \left[\frac{u^2/2}{\tau} \right] \rightarrow \varepsilon_\lambda \approx \frac{u^2}{\tau} = \frac{u^3}{\lambda} \quad (3.1.2)$$

Por otro lado la energía que se disipa puede ser calculada mediante la función de disipación de Raileigh, que por análisis dimensional queda:

$$[\phi] = \left[v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)^2 \right] \rightarrow \phi_\lambda \approx v \frac{u^2}{\lambda^2} \quad (3.1.3)$$

Y la relación entre la energía disipada por viscosidad y la energía cinética transportada dé como resultado el número de Reynolds para esa escala:

$$\frac{\varepsilon_\lambda}{\phi_\lambda} = \frac{\frac{u^3}{\lambda}}{v \frac{u^2}{\lambda^2}} = \frac{u\lambda}{v} = Re_\lambda \quad (3.1.4)$$

Por lo tanto, si consideramos los valores macroscópicos de los torbellinos más grandes, a los que denotamos como U, L, T en la que los valores de la viscosidad son menores se puede observar que:

$$\frac{\varepsilon_L}{\phi_L} = \frac{UL}{v} = Re_L \gg 1 \quad (3.1.5)$$

Lo que quiere decir que en las escalas más grandes la transmisión de energía cinética predomina sobre la disipación de energía provocada por la viscosidad. Esta demostración fue realizada por *Viedma Robles A. (2016)*

3.2.2.2 Ecuaciones de Reynolds para flujo turbulento

Como el movimiento turbulento tiene una componente aleatoria, si se quiere describir el flujo turbulento con precisión se deben aplicar a las ecuaciones de Navier-Stokes ciertas técnicas de promediado. Como consecuencia de esto nacen las ecuaciones de Reynolds.

Según *Viedma Robles A. (2016)* “*La idea consiste en que si consideramos las condiciones de contorno como estacionarias, aunque el valor de variables como la velocidad o cualquier otra sean para cada punto del flujo turbulento totalmente aleatorias, se puede esperar que al menos el valor medio de estas variables también sean estacionarias.*”

Por lo tanto si queremos calcular el valor medio de una variable cualquiera que dependa del espacio y el tiempo a la que llamaremos $\phi(\vec{x}, t)$ entonces esta se expresará como:

$$\phi(\vec{x}, t) = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \phi(\vec{x}, t) dt \quad (3.1.6)$$

Donde T debe encontrarse dentro del siguiente intervalo $t_0 \gg T \gg t_{turb}$, siendo t_0 y t_{turb} los tiempos característicos de variación de las condiciones iniciales y de las fluctuaciones turbulentas respectivamente.

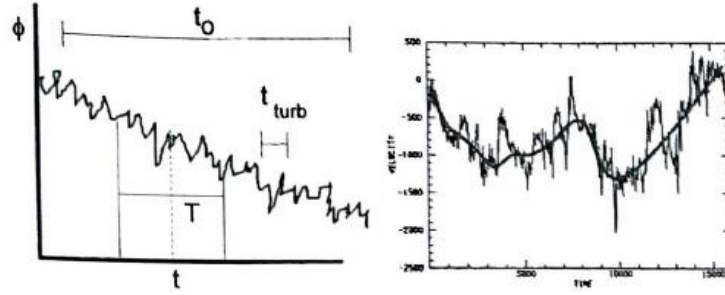


Figura 3.1.2. Evolución temporal de una variable fluida. Viedma Robles, A. (2016)

Una vez definido este valor medio, podemos darnos cuenta de que el valor instantáneo de cada variable fluida puede descomponerse en su valor medio más su fluctuación respecto a ese valor medio de la siguiente manera:

$$\phi(\vec{x}, t) = \bar{\phi}(\vec{x}, t) + \phi'(\vec{x}, t) \quad (3.1.7)$$

A continuación por simplicidad y para no alargar la explicación se expondrá el procedimiento de obtención de estas ecuaciones para el caso de un fluido incompresible de viscosidad y conductividad constantes. Este procedimiento puede encontrarse en los “apuntes de ingeniería de fluidos” realizados por Viedma Robles A. (2016). Posteriormente, se extrapolará el resultado para el caso de fluido compresible, que es el que nos interesa. Para este caso las ecuaciones de Navier–Stokes en forma diferencial son:

- $\nabla \cdot \vec{v} = 0$ para la ecuación de continuidad.
- $\frac{D\vec{v}}{Dt} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \nabla(\vec{v}\vec{v}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{v} + \vec{f}_m$ para la ecuación de cantidad de movimiento.
- $\rho \frac{De}{Dt} = \rho \left[\frac{\partial e}{\partial t} + \vec{v} \nabla e \right] + \nabla(\vec{v}\vec{v}) = \phi_v + k \Delta T + Q_r$ para la ecuación de la energía.

Donde el término ϕ_v se define como:

$$\phi_v = \tau'_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \quad (3.1.8)$$

Siendo $\tau'_{ij} = 2\mu\gamma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$.

Además de tener en cuenta las ecuaciones de estado:

- $de = c(T)dT$ (3.1.9)

- $\rho = cte$ (3.1.10)

Por lo tanto si descomponemos las variables que aparecen en las ecuaciones en valores medios y fluctuantes tenemos que:

- $\vec{v} = \vec{U} + \vec{u}'$ (3.1.11)

- $\vec{p} = \vec{P} + \vec{p}'$ (3.1.12)

- $\vec{T} = \vec{T} + \vec{T}'$ (3.1.13)

Sustituyendo pues estas variables en las ecuaciones anteriores, teniendo en cuenta además las siguientes propiedades de los valores medios:

- $\phi = \phi_1 + \phi_2 \rightarrow \bar{\phi} = \bar{\phi}_1 + \bar{\phi}_2$ (3.1.14)

- $\phi = \phi_1 \cdot \phi_2 \rightarrow \bar{\phi} = \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_2 + \overline{\phi'_1 \phi'_2}$ siendo $\overline{\phi'_1 \phi'_2} = 0$ (3.1.15)

- $\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} = \frac{\partial \phi}{\partial t}$ (3.1.16)

Obtenemos:

- $\nabla \cdot (\vec{U} + \vec{u}') = 0$ para la ecuación de continuidad.

- $\frac{\partial}{\partial t}(\vec{U}) + \nabla(\vec{U}\vec{U} + \overline{\vec{u}'\vec{u}'}) = -\frac{1}{\rho}\nabla\bar{p} + \nu\nabla\vec{U} + \vec{f}_m$ para la ecuación de cantidad de movimiento.

- $\rho c \left[\frac{D\bar{T}}{Dt} + \vec{U}\nabla\bar{T} + \overline{\vec{u}'\nabla T'} \right] = \phi_{\vec{U}} + \phi_{\vec{u}'} + k\Delta\bar{T} + Q_r$ para la ecuación de la energía.

Donde como se puede apreciar la ecuación de disipación de Rayleigh queda separada en dos partes, una primera debida a los gradientes de las fluctuaciones y otra debida a los gradientes de las fluctuaciones:

$$\phi_{\vec{U}} = \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right)^2 \quad (3.1.17)$$

Y

$$(3.1.18)$$

$$\phi_{\vec{u}'} = \mu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j}\right)^2}$$

Pasando entonces los términos que corresponden a las fluctuaciones a segundo término de las ecuaciones y quitando por convenio la barra de promediado de la presión y la temperatura se llega a la forma general de estas ecuaciones:

- $\nabla \cdot \vec{U} = 0$ para la ecuación de continuidad.
- $\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U}\vec{U}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{U} - \nabla \cdot \overline{\vec{u}'\vec{u}'} + \vec{f}_m$ para la ecuación de cantidad de movimiento.
- $\rho c \left[\frac{D\bar{T}}{Dt} + \vec{U} \nabla T \right] = \phi_{\vec{U}} + \phi_{\vec{u}'} + k \Delta T - \rho c \nabla \cdot \overline{\vec{u}'T'} + Q_r$ para la ecuación de la energía.

Según Chris Ramsey (2018), si extrapolamos el mismo procedimiento para el caso de un fluido compresible, como es el caso de nuestro gas de estudio, expresándolas en forma diferencial y adaptándolas a nuestra nomenclatura se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\bullet \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} (\bar{\rho} u_j) = 0 \quad (3.1.19)$$

$$\bullet \frac{\partial (\bar{\rho} u_j)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j \rho u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (3.1.20)$$

$$\bullet \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_j \bar{\rho} \bar{H}) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\sigma}_{ij} \bar{u}_i) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{q}_j + c_p \overline{\rho u_j' T'}) - \bar{u}_i \tau_{ij} + \phi_{\vec{U}} + \phi_{\vec{u}'} \quad (3.1.21)$$

Se trata entonces de un paquete de cinco ecuaciones, pues la de cantidad de movimiento es vectorial (incluye tres ecuaciones, una por cada dirección del espacio) \vec{U} , P y T y una serie de incógnitas en las que aparecen \vec{U} , P y T además de una serie de nuevas variables generadas por el propio movimiento turbulento, las cuales reciben en nombre de:

- Tensor de esfuerzos turbulentos aparentes de Reynolds: $\tau_{ij} = -\overline{u'_i u'_j}$
- Vector de transporte turbulento de calor: $-\overline{u'_i T'}$

➤ Disipación viscosa por fluctuaciones turbulentas: $\phi_{\bar{u}'} = \mu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j}\right)^2}$

Por lo tanto se puede hacer distinción entre la turbulencia térmica ocasionada por el calor de la atmosfera y una turbulencia mecánica causada por el paso del aire alrededor de un obstáculo como consecuencia de la rugosidad del mismo *H.F.Liu, D. y G.Lipták, B. (2000)*.

Normalmente ambos tipos de turbulencia suceden al mismo tiempo en las diferentes situaciones atmosféricas, sin embargo a veces un tipo de turbulencia suele predominar sobre otra, por ejemplo en días soleados con vientos ligeros la turbulencia térmica sería claramente dominante mientras que la turbulencia mecánica suele predominar sobre todo de noche y en presencia de fuertes vientos.

3.2.3 Efecto de la estabilidad de la atmosfera

Se entiende por estabilidad atmosférica, como la tendencia de la misma a resistir el movimiento vertical producido por la convección libre, que tiene lugar en la atmosfera debida a la tanto por diferencia de temperaturas, como por la turbulencia que se produce debido a la velocidad del viento. *Wark, K. y F. Warner, C. (2005)*.

En consecuencia la estabilidad de la atmosfera tiene un efecto directo sobre el transporte y dispersión de los contaminantes emitidos.

En la atmosfera el desplazamiento del aire tiene que ver con la diferencias de presiones entre dos puntos, desplazándose el aire desde los puntos de mayor a menor presión, a su vez, como la presión a la que se encuentra el aire se va reduciendo, la porción de aire que consideramos tiene el efecto de expandirse, lo que reduce la temperatura de la misma. A menudo este fenómeno de expansión suele producirse tan rápidamente que podemos despreciar como causa adyacente de esta variación de temperatura el debido a los fenómenos de transferencia de calor, lo que permite considerar la expansión como adiabática. *Viedma Robles. A. (2016)*.

De lo considerado anteriormente puede concluirse que la estabilidad de la atmosfera depende en última instancia de las variaciones de la temperatura en cada punto de la atmosfera. Por lo tanto, esta variación de temperatura, también llamada tasa de cambio, es lo que habitualmente se utiliza para

medir el grado de estabilidad de la atmosfera. Esta distribución de temperaturas puede ser calculada (según puede encontrarse en “apuntes de mecánica de fluidos” de *Viedma Robles. A. (2014)*) A partir de la ecuación de la fluidoestática:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\rho g \quad (3.1.22)$$

Además, como la expansión es adiabática se cumple que los cambios de densidad solo dependen de las variaciones de presión puesto que la temperatura debe mantenerse. Por lo tanto la densidad puede expresarse como:

$$\rho = \frac{P}{R_g T_0} \quad (3.1.23)$$

Y Sustituyendo este resultado en la ecuación anterior se tiene:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\frac{P g}{R_g T_0} \quad (3.1.24)$$

Como la expansión es adiabática se cumple también:

$$\frac{dp}{p} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{dT}{T} \quad (3.1.25)$$

La condición de atmosfera adiabática implica que la distribución de temperaturas debe estar justo al límite del equilibrio neutro, es decir, que tras elevar una masa de aire esta se expande y se enfría rápidamente de manera que ni tiende a seguir subiendo ni vuelve a la posición original. Por lo que si imponemos esta condición de equilibrio reordenando la primera ecuación e igualándola a la segunda, obtenemos lo que hemos denominado tasa de cambio:

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{g}{c_p} \approx -10^\circ C/Km \quad (3.1.26)$$

Finalmente comparando este gradiente de temperaturas como el de la atmosfera estándar, se obtiene el grado de estabilidad de la atmosfera.

Se conoce como atmosfera estándar a la distribución de temperaturas que por convención se ha definido en base a los datos meteorológicos recogidos para las distintas zonas en la que se divide la atmosfera:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Troposfera } (z < 11\text{km}): T(z) = T(0) - cz \\ \text{Estratosfera } (11 \text{ km} < z < 25\text{km}): T = -56,5^{\circ}\text{C} \\ \text{Ionosfera } (z > 25\text{km}): \frac{dT}{dz} = 3^{\circ}\text{C}/\text{km} \end{array} \right. \quad (3.1.27)$$

Siendo $c = 6,5^{\circ}\text{C}/\text{km}$ y $T(0) = 15^{\circ}\text{C}$

Es decir, al principio, en la troposfera, tenemos que la evolución decrece de manera lineal a razón de $6,5^{\circ}\text{C}$ por cada kilómetro. Posteriormente en la estratosfera la temperatura se mantiene constante a la temperatura de $-56,5^{\circ}\text{C}$, para después seguir creciendo linealmente esta vez a razón de 3°C por cada kilómetro.

3.2.3.1 Análisis de las condiciones de estabilidad.

Como hemos visto, la comparación del gradiente de temperaturas de la atmosfera adiabática con la estándar nos da idea del grado de estabilidad de la atmosfera. Que la atmosfera sea estable significa que no presenta mucho movimiento y por tanto mezclado de los contaminantes. Además, como ya se ha dicho, esta estabilidad se puede ver alterada por dos motivos, la primera es por la turbulencia mecánica provocada por el viento y la segunda es por el gradiente de temperaturas.

En cuanto a este último tipo de mezclado térmico, las comparaciones entre ambas tasas de cambio, la estándar y la adiabática dan lugar a cuatro posibles situaciones bien diferenciadas:

- **Inestable:** Tiene lugar cuando la tasa de cambio estándar es superior a la de la atmosfera adiabática, en este caso, lo que ocurre es que cuando una pequeña cantidad de aire es transportada hacia arriba o hacia abajo, según gane o pierda temperatura ,se expande o comprime de forma adiabática rápidamente dando lugar a que esta porción de aire se encuentre a una temperatura distinta a la del resto del aire que lo rodea de manera que al estar sometido a la misma

presión que este, esta masa de aire pesará menos y continuará ascendiendo(en el caso en el que haya sido transportado por efecto del aumento de su temperatura) o por el contrario pesara más y continuara descendiendo, (en el caso de haber reducido su temperatura y haber descendido por ello).

- **Neutra:** Se produce cuando el gradiente de temperaturas adiabático y estándar tienen aproximadamente el mismo valor, en este caso, lo que ocurre es que cuando una masa de aire es transportada esta se expande o comprime de manera que el aire queda a la misma temperatura que el resto de partículas que lo rodean cuando alcanza la nueva posición, por lo tanto, la masa de aire no tiene ni a seguir subiendo ni a seguir bajando como pasaba en el caso anterior.
- **Estable:** Se trata del caso contrario de la condición de inestabilidad, la diferencia radica en que ahora cualquier movimiento de la masa de aire tiende a regresar a su posición de inicio. Según esta diferencia sea más o menos pronunciada podemos diferenciar entre dos casos:
 - Débilmente estable
 - Fuertemente estable

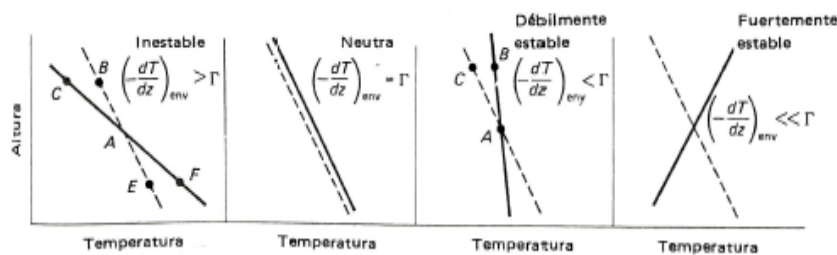


Figura 3.1.3. Tasas de cambio relacionadas con la estabilidad atmosférica. Wark, K. y F. Warner, C. (2005)

Para finalizar con este apartado, añadir que puede darse otro tipo de fenómeno al que se le conoce como inversión, que tiene lugar cuando se

Produce un aumento de temperatura con la altura, el tipo de inversión que más suele intervenir (por desarrollarse en la parte baja de la atmosfera) en la difusión de contaminantes es la inversión por radiación. Se tiene normalmente en días soleados en los que el terreno va absorbiendo energía por radiación y convección durante el día de manera

que cuando cae la noche, este empieza a irradiar calor y se enfría rápidamente de manera que las capas de aire más superficiales se enfrían a una temperatura que se encuentra por debajo de la temperatura que se tiene en las capas de aire situadas a mayor altitud. *Wark, K. y F. Warner, C. (2005).*



Figura 3.1.4. Inversión por radiación. Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

3.2.4 Efecto de la topografía

Al igual que ocurre cuando nuestro gas entra en contacto con las paredes del obstáculo, la superficie terrestre presenta una cierta rugosidad que puede variar debido a la naturaleza del suelo (si hay o no árboles, edificios, colinas, etc...) que influyen en el perfil de velocidades del viento, retrasándolo. Por lo tanto, se puede hablar de una capa límite planetaria, que se encuentra constituida por una capa de aire con un “espesor” de kilómetros de altura. *Wark, K. y F. Warner, C. (2005).*

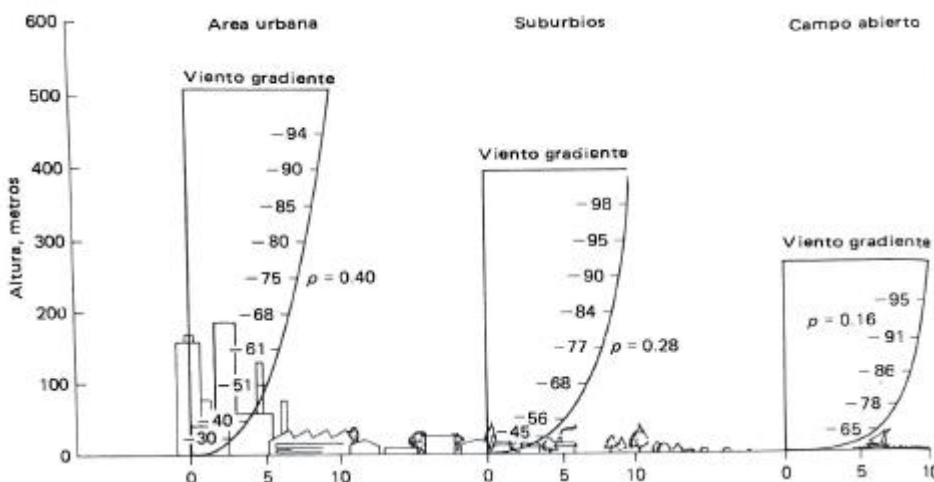


Figura 3.1.5 Efecto de la rugosidad del terreno sobre el perfil de velocidad del viento. Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

Por supuesto, el espesor o altura de esta capa se puede ver influida tanto por los gradientes de temperatura como por la fricción del suelo, predominando el efecto de uno u otro en función de la altura a la que nos encontremos, siendo mayor en el caso de condiciones inestables que en el caso de condiciones estables y mayor también cuanto mayor sea la rugosidad asociada al terreno en el que nos encontremos, tal y como se muestran en los siguientes ejemplos.

Con efecto de relacionar la velocidad del viento con la altura se suelen utilizar, para el caso de capas límites de varios cientos de metros de espesor, la ley de exponenciales de Deacon:

$$\frac{u}{u_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^p \quad (3.1.28)$$

Siendo u la velocidad del viento a la altura z y u_1 la velocidad del viento a la altura z_1 y donde, según Sutton, p está relacionado con la estabilidad de la atmosfera a través del parámetro n de la siguiente manera:

$$p = \frac{n}{2 - n} \quad (3.1.29)$$

Donde los valores de n pueden ser obtenidos de la siguiente tabla:

Condiciones de inestabilidad	n
Tasa de cambio grande	0,20
Tasa de cambio pequeña o cero	0,25
Inversion moderada	0,33
Inversion grande	0,55

Tabla 3.1.1. Relación entre el parámetro n y la condición de estabilidad de la atmosfera. Wark, K. y F. Warner, C. (2005)

Por tanto el perfil de velocidades del viento y por consiguiente su espesor es función de la estabilidad atmosférica

3.3 DINÁMICA DEL CONTAMINANTE ALREDEDOR DEL OBSTÁCULO.

Se analizara ahora el comportamiento de nuestro contaminante cuando se choca contra nuestro obstáculo. Para ello debemos tener en cuenta dos conceptos:

- Concepto de capa límite: Debido al efecto de la fricción de las paredes del material
- Concepto de capa límite térmica: Pues el gas no tiene por qué estar a la misma temperatura que el obstáculo y al tratarse de un gas se pueden generar variaciones en la densidad del fluido provocado por el cambio de temperatura.

Las demostraciones que a continuación se realizan fueron tomadas de “apuntes de mecánica de fluidos” de Viedma Robles. A. (2014)

3.3.1 Concepto de capa límite

Cuando nuestro gas impacta contra los obstáculos la velocidad del flujo del mismo se iguala a la de la pared con la que choca, lo que hace que la viscosidad cobre importancia y sea imposible despreciarla como cuando el gas se encuentra en un régimen turbulento libre, a esta condición se le suele denominar condición de adherencia.

La teoría de la capa límite fue desarrollada por Ludwig Prandtl en 1904, según la cual incluso cuando el número de Reynolds es muy alto es necesario tener en cuenta la viscosidad.

Esta teoría consistía en dividir el campo fluido en dos partes:

- **El campo fluido exterior:** que es donde podemos considerar que la viscosidad es despreciable y el fluido puede considerarse ideal.
- **Capa límite delgada:** La cual se sitúa cerca de las superficies del obstáculo de manera que en el interior de esta región se debe de tener en cuenta la viscosidad para poder describir el flujo alrededor del cuerpo.

Según esta teoría, suponiendo que un determinado fluido se mueve con una velocidad U respecto al sólido y que además posee una determinada densidad y viscosidad ρ y μ , entonces el espesor de la capa límite puede ser calculado igualando los órdenes de magnitud de los términos viscoso y convectivo de la ecuación de cantidad de movimiento expresada a lo largo del eje longitudinal en la que se desarrolla el movimiento.

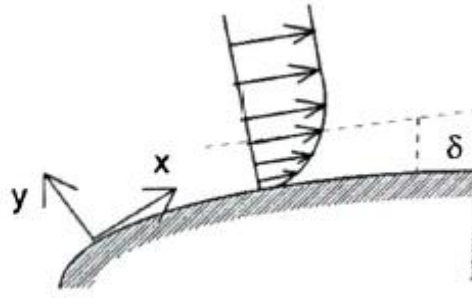


Figura3.2.1. Perfil de velocidades capa limite laminar. Viedma Robles, A. (2016)

Por lo tanto tenemos que la ecuación de cantidad de movimiento bidimensional queda de la siguiente forma:

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (3.2.1)$$

Los órdenes de magnitud de los términos convectivo y viscoso son:

➤ Término convectivo: $\rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) \rightarrow \rho \frac{U^2}{L}$ (3.2.2)

➤ Término viscoso: $\nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \rightarrow \mu \frac{U}{\delta^2}$ (3.2.3)

E igualando tenemos que el espesor es:

$$\rho \frac{U^2}{L} \approx \mu \frac{U}{\delta^2} \rightarrow \frac{\delta}{L} = \frac{1}{\sqrt{Re}} \quad (3.2.4)$$

Donde: $Re = \frac{\rho UL}{\mu}$

Este último resultado nos indica que cuanto mayor es el número de Reynolds el espesor de la capa límite, que se extiende en dirección transversal a la superficie del obstáculo, es mucho menor que el tamaño o dimensión característica del sólido.

Por otro lado, mediante un análisis similar, relacionando los órdenes de magnitud de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento llegamos a la conclusión de que las diferencias de presión dentro de la capa límite en dirección transversal es insignificante lo que hace que prácticamente la presión sea la misma que la que tenemos en el exterior. Por lo tanto las ecuaciones de la capa límite serían, sin considerar efectos térmicos de momento:

- $\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0$, para la ecuación de continuidad
- $u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$, para la ecuación de cantidad de movimiento en el eje longitudinal

Quedando la ecuación de cantidad de movimiento en la dimensión transversal reducida a: $\frac{\partial P}{\partial y} = 0$ donde la P se denomina presión motriz o reducida y está compuesta por la suma de la presión y las fuerzas másicas $P = p + \rho U_p$. Este último desarrollo se encuentra reflejado en los

3.3.2 Concepto de capa límite térmica

Estas ecuaciones se encuentran incompletas pues al tratarse el fluido con el que estamos tratando de un gas, resulta que se trata de un fluido compresible, esto quiere decir que su densidad puede ir variando en función de la diferencias de temperaturas a la que se encuentren sometida, por lo tanto no se puede dejar de lado en las ecuaciones. En consecuencia es también necesario realizar el análisis de la capa límite desde el punto de vista térmico.

Por lo tanto si suponemos que estamos en disposición de la distribución de temperaturas entorno a la dirección longitudinal de la superficie del sólido, entonces el calor que se transmite a la pared del sólido por parte del gas puede ser calculado a partir del flujo de calor que viene dado por la ley de Fourier:

$$\vec{q} = -k\nabla T \quad (3.2.5)$$

Una vez obtenido el flujo de calor no tenemos más que multiplicarlo por el vector unitario normal a la superficie del obstáculo:

$$\vec{q} \cdot \vec{n} = -k\nabla T \cdot \vec{n} = -k \frac{\partial T}{\partial n} \quad (3.2.6)$$

Y como estamos sobre la superficie del sólido: tendremos que: $q_p = -k \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_{y=0}$

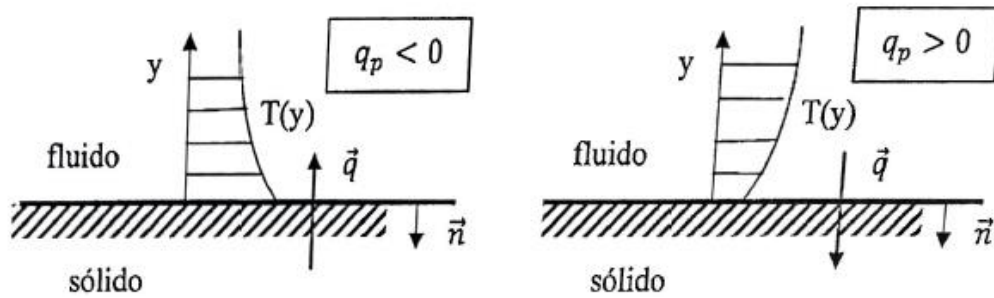


Figura3.2.2. Evolución de la temperatura en la capa límite térmico. Viedma Robles, A. (2016)

Siguiendo entonces un razonamiento similar al utilizado al caso de la capa límite que nos daba el perfil de velocidades en el que a través del análisis de los órdenes de magnitud surgía el número de Reynolds, en este caso nos encontramos con lo siguiente:

$$\frac{\rho U c_p \Delta T / L}{k \Delta T / L^2} = \frac{\rho U L}{\mu} \frac{\mu c_p}{k} = Re Pr = Pe \quad (3.2.7)$$

Es decir, como resultado de relacionar los órdenes de magnitud de las ecuaciones involucradas en este caso, surge el número de Péclet. Lo que indica este resultado es que cuanto mayor es el número de Péclet, el efecto de la convección térmica predomina sobre el de la conducción del calor siendo los efectos de este último más importantes conforme nos encontramos junto a las paredes del sólido, a esta zona donde predomina el efecto de la conducción frente a la de convección térmica se le denomina pues, capa límite térmica. Por lo tanto en el interior de esta capa la temperatura variará desde la temperatura exterior hasta la temperatura a la que se encuentra la pared.

El espesor de esta capa se puede estimar igualando los términos de convección y conducción térmica transversal de la ecuación de la energía:

$$\rho U c_p \Delta T / L \approx k \Delta T / \delta^2 \quad (3.2.8)$$

Quedando pues:

$$\frac{\delta_T}{L} = \sqrt{\frac{\mu}{\rho U L} \frac{\mu c_p}{k}} = \sqrt{\frac{1}{Re Pr}} = \frac{1}{\sqrt{Pe}} \quad (3.2.9)$$

Como podemos observar, el caso de que $Pr = 1$ (caso de gases), entonces se cumple que $\delta = \delta_T$

Una vez introducido este concepto ya podemos completar las ecuaciones que se habían obtenido anteriormente y pasamos por tanto a obtener las ecuaciones que rigen comportamiento de un fluido compresible como es el caso del gas de estudio cuando se encuentra en zonas cercanas al obstáculo.

Para empezar suponemos que se trata de un día soleado y que la velocidad del viento y por tanto la velocidad del flujo exterior a la capa limite que se genera en las zonas cercanas al objeto es baja, ya que aparte de ser el caso más habitual supone poder utilizar ciertas simplificaciones.

Si esto es así entonces las ecuaciones se simplifican pues supone que las diferencias de presión que produce el flujo exterior pueden considerarse despreciables respecto a las diferencias de temperatura lo que en las ecuaciones se traduce en que el término de gradiente de presión longitudinal es despreciable frente al término de convección térmica.

Por el mismo motivo que acabamos de comentar, el término de disipación viscosa también se hace despreciable respecto al término de convección térmica.

Y si por ultimo suponemos que la temperatura del flujo exterior de la capa limite, la viscosidad, la conductividad y el calor específico son constantes con la temperatura, entonces las ecuaciones que se obtienen son las siguientes:

- $\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0$, para la ecuación de continuidad.
- $u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$, para la ecuación de cantidad de movimiento.
- $u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\nu}{Pr} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$, para la ecuación de la energía.

Si además el flujo se considera ideal entonces se puede sustituir: $-\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} =$

$$U_e \frac{\partial U_e}{\partial x}$$

3.3.3 Ecuaciones de la capa limite turbulenta para un gas que se choca contra un obstáculo:

También puede darse el caso de que las condiciones sean tales que la capa limite que se encuentra alrededor del obstáculo sea turbulenta. Según la información consultada las ecuaciones de la capa limite turbulenta en el caso de fluido compresible quedarían de la siguiente manera:

- $\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0$
- $u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(v \frac{\partial u}{\partial y} - \overline{u'v'} \right)$
- $\rho c_p \left[\frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} + \tau'_{xy} \right) \frac{\partial u}{\partial y} + u \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{\partial q'_y}{\partial y}$

Para resolver este conjunto de ecuaciones se suele usar el modelo multicapa de Von Karman, según en el cual la capa limite se divide en dos regiones:

- Región exterior ($y = \delta$): Donde predominan los términos turbulentos y convectivos.
- Región interior : que a su vez se subdivide en:
 - Subcapa intermedia o logarítmica ($\delta_v < y \ll \delta$): Donde predominan los términos turbulentos y viscosos
 - Subcapa viscosa o laminar. ($y \approx \delta_v$)

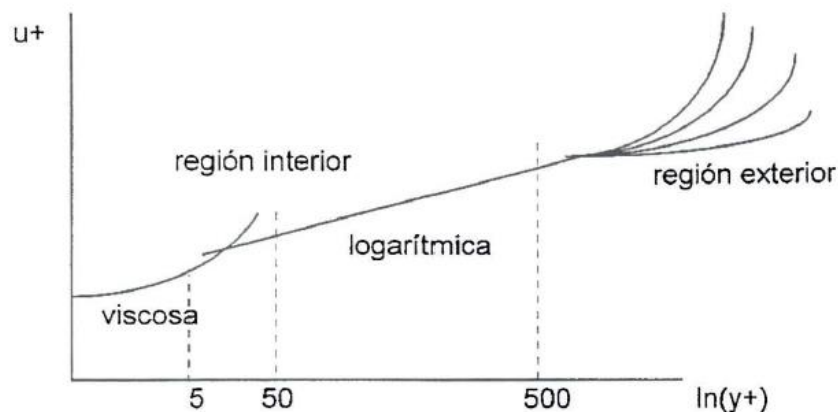


Figura3.2.3. Evolución del perfil de velocidades en presencia de paredes en régimen turbulento Viedma Robles, A. (2016)

La rugosidad de las paredes también influye, se suele comparar su efecto comparándola con la subcapa viscosa “ δ_v ” antes mencionada pudiendo modificar la evolución del perfil antes planteada.

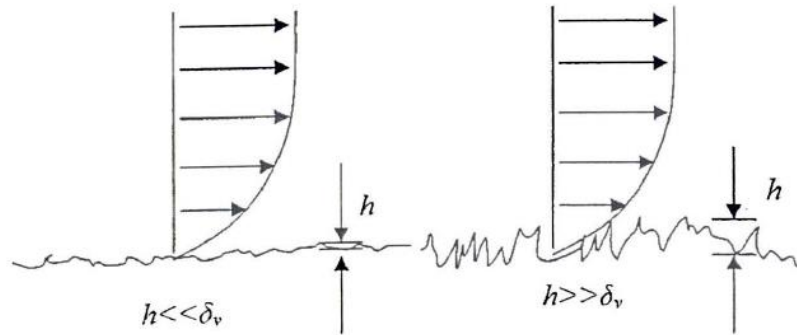


Figura 3.2.4. Efecto de la rugosidad en el perfil de velocidades. Viedma Robles, A. (2016)

De manera que:

- Si $h \ll \delta_v$, la rugosidad no afecta a la capa límite
- Si $h \gg \delta_v$, la rugosidad es tan grande que no se tiene subcapa viscosa y la subcapa logarítmica está escalada con h .
- Si h es lo suficientemente grande, el perfil puede solo depender de la rugosidad.

Como la complejidad de la resolución de estos perfiles es muy grande normalmente se usan otras expresiones aproximadas del tipo:

$$\frac{u}{U} = \left(\frac{y}{\delta}\right)^{1/n} \quad (3.2.10)$$

Expresión que coincide con la fórmula de Deacon antes mencionada.

3.4 DISPERSIÓN DEL CONTAMINANTE EN LA SALIDA DE LA CHIMENEA

Como hemos visto, el transporte y dispersión del contaminante se ve influenciado tanto por la dirección y velocidad del viento como por las turbulencias de origen mecánico o térmico. Todas ellas suelen actuar, por norma general, al mismo tiempo produciendo unos determinados perfiles de velocidad y modificando las condiciones de estabilidad de la atmósfera. Estas condiciones que se crean tienen su efecto también en la geometría de dispersión de las plumas del contaminante en la atmósfera.

- Pluma en espiral: Tiene lugar en condiciones de inestabilidad, cuando se presenta una tasa de cambio superadiabática, generándose entonces una turbulencia de carácter convectivo que crea remolinos lo suficientemente grandes como para que parte de la pluma llegue al nivel del suelo, en estas condiciones el perfil de velocidad del

viento tiene la forma característica de los flujos turbulentos. A pesar de que la turbulencia tiende a dispersar los contaminantes, en este caso, es frecuente que se tenga altas concentraciones del contaminante en ciertas partes del terreno.

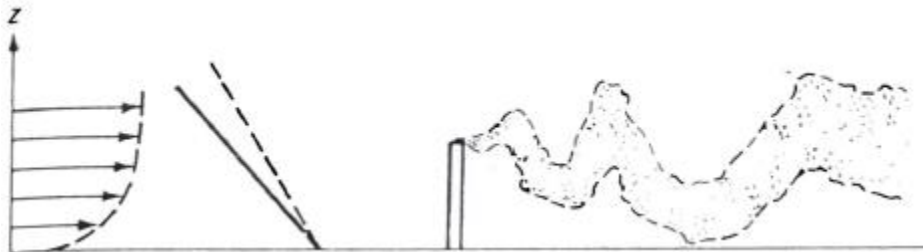


Figura 3.3.1. Perfil de velocidad, temperatura y forma de pluma en espiral Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

- **Pluma de cono:** Se da en presencia de una atmosfera estable, en este caso la turbulencia solo se generaría a pequeña escala, en las paredes del obstáculo, mientras que el flujo exterior del viento tendría un perfil de velocidades característico de un movimiento en régimen laminar debido a que los efectos de los términos convectivos son prácticamente despreciables, el contaminante suele ser arrastrado bastante lejos, llegando al nivel del suelo con una concentración bastante importante, suele darse por las noches o en días nublados.

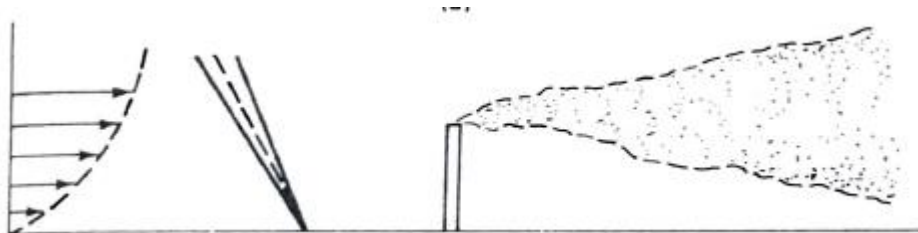


Figura 3.3.2. Perfil de velocidad, temperatura y forma de pluma de cono. Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

- **Pluma de abanico:** Se suele generar en presencia de una atmosfera altamente estable, de manera que se produce turbulencia de ningún tipo. En este caso el contaminante se dispersa en la dirección del viento a una elevación más o menos constante lo que sugiere que este tipo de pluma se debe a algún fenómeno de inversión térmica, generalmente por radiación, por lo que suele darse por las noches cuando la tierra se enfría. Los niveles de concentración que se alcanzan son difíciles de pronosticar para este caso, pero si se puede

asegurar, salvo en raras ocasiones, que la pluma de gas no llega al nivel del suelo.

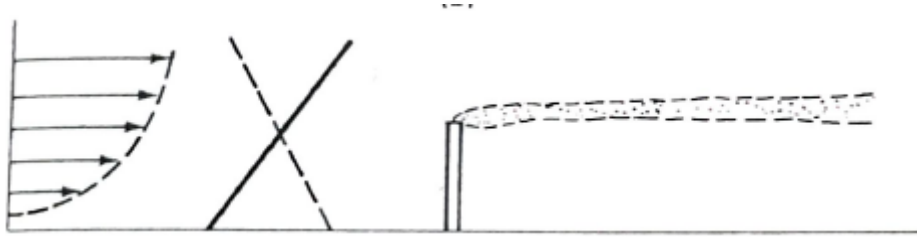


Figura 3.3.3. Perfil de velocidad, temperatura y forma de pluma de abanico Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

- **Pluma de fumigación:** Se presenta cuando por encima de la chimenea se tiene una capa de aire estable y por debajo de ella esta capa de aire es inestable, como consecuencia el viento tiene un perfil de velocidades más ancho en su parte baja propia de un movimiento turbulento y más delgada en la capa superior más propia de un régimen laminar y estable. Se produce por las mañanas, bajo cielos despejados, cuando el sol calienta el suelo lo que va produciendo que desaparezca el fenómeno de inversión que tiene lugar durante la noche y la capa inestable vaya subiendo en altura. Cuando esta se encuentra situada a la altura de la chimenea la dispersión del contaminante llega a la superficie del terreno por consecuencia del arrastre del viento.

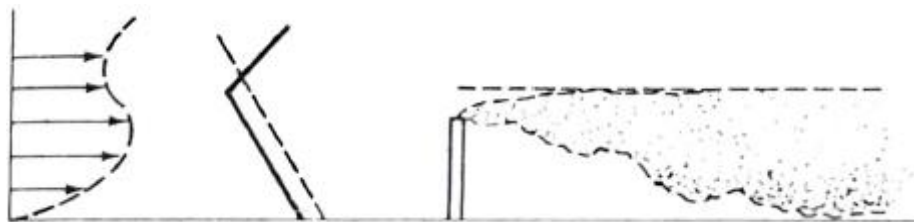


Figura 3.3.4. Perfil de velocidad, temperatura y forma de pluma de fumigación Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

- **Pluma de flotación:** Es fenómeno inverso al de fumigación, suele darse al atardecer con cielos despejados. Se produce pues cuando la parte donde se produce la estabilidad queda por debajo de la chimenea y las capas inestables se sitúan por dentro y por encima de la pluma de gases. El perfil de velocidades que se tiene en este caso es más ancho en la parte alta debido a que es donde se sitúa ahora la parte inestable y turbulenta y la capa inferior presenta un perfil más fino por ser la parte más estable, haciendo que el flujo alcance

en esa parte un régimen laminar. Cuando la capa de inversión alcanza la chimenea, la dispersión del contaminante se dirige hacia capas superiores.

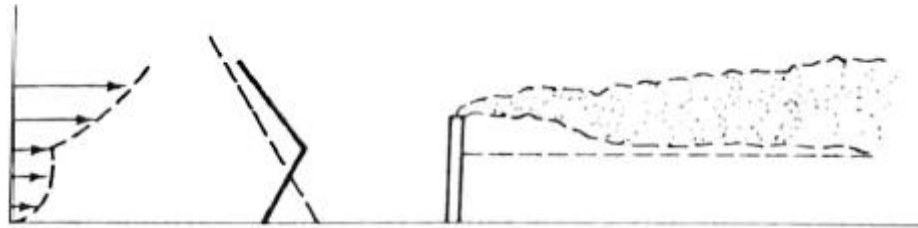


Figura 3.3.5. Perfil de velocidad, temperatura y forma de pluma de flotación Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

- Pluma de atrapamiento: Tiene lugar cuando el fenómeno de inversión queda localizado por encima y por debajo de la chimenea al mismo tiempo. El perfil de velocidades que tendremos será una combinación de las dos últimas.

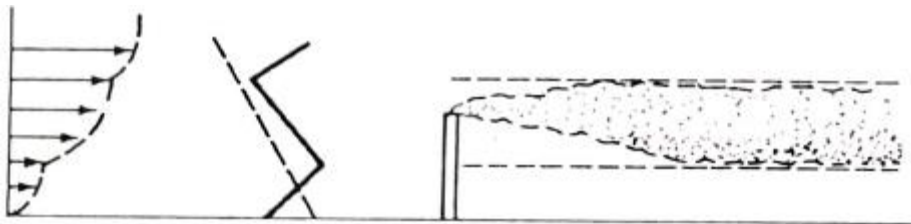


Figura 3.3.6. Perfil de velocidad, temperatura y forma de pluma de atrapamiento Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

También influye en el comportamiento de la pluma la presencia de obstáculos de manera, que el perfil de velocidades se ve alterado de la siguiente manera:

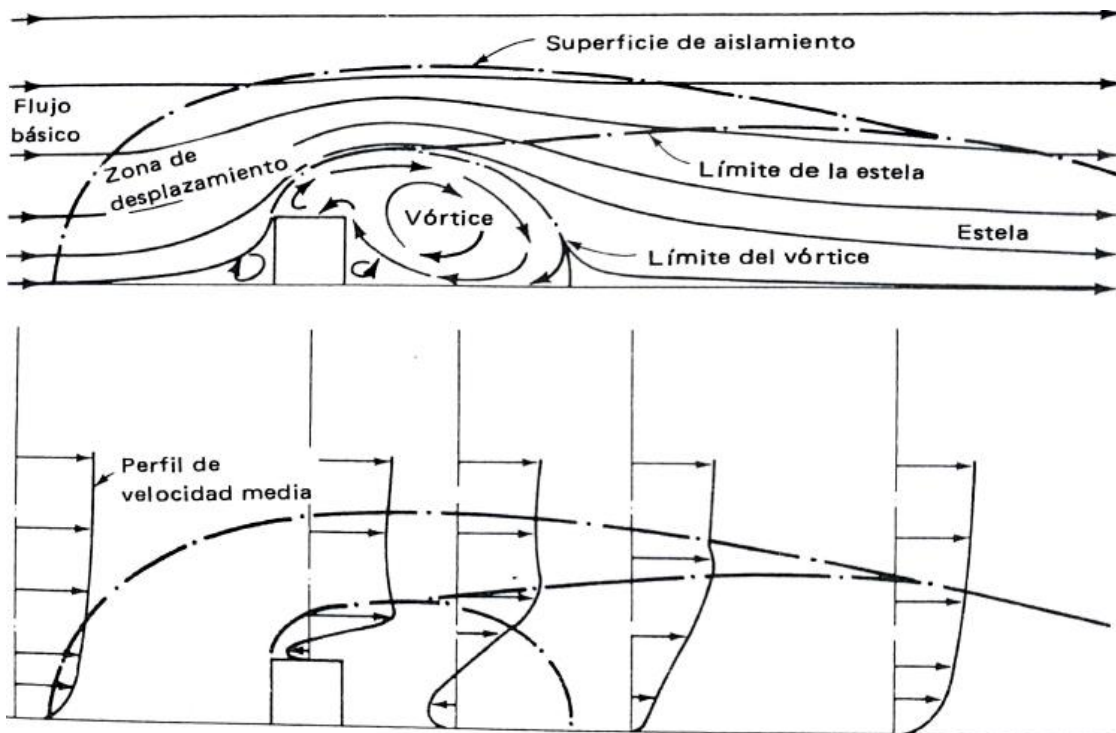


Figura 3.3.7. Patrón del flujo alrededor de un edificio Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

Como puede apreciarse, se forman remolinos justamente detrás del obstáculo pues el perfil de velocidades del flujo llega a invertir su dirección justo detrás de él. Si la chimenea que tenemos se sitúa pues en una posición en la que se encuentre a favor del viento, entonces los remolinos producen un importante efecto en la dispersión del contaminante tal y como se ve en la figura:

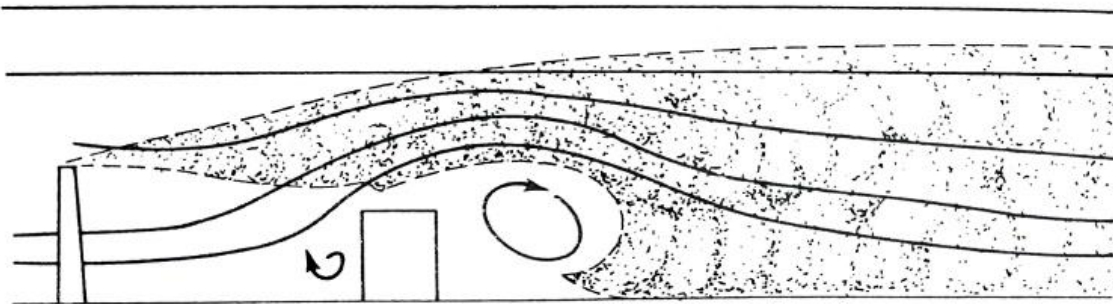


Figura 3.3.8. Formación de remolinos alrededor del obstáculo Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

Si además la altura de la chimenea es inferior a la que tiene el obstáculo, se crea una contracorriente que hace que los niveles de concentración sean más altos en las paredes del obstáculo que se encuentran orientadas en la dirección favorable del viento. Siendo esta concentración mayor conforme se aumenta esta diferencia de alturas. Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

CAPÍTULO 4

MODELOS DE DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA

CAPÍTULO 4

MODELOS DE DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA

4.1 INTRODUCCIÓN

Como hemos visto en los anteriores apartados, en la dispersión del contaminante entran en juego multitud de factores relacionados con la dinámica atmosférica, se ha visto de forma detallada como afecta la turbulencia atmosférica a la columna de humos emitida por una chimenea y los efectos que sobre ella provoca, se ha visto también el movimiento que puede producirse cuando estos humos entran en contacto con las paredes de un obstáculo, sin embargo, aún no hemos hablado de cómo evoluciona la concentración del penacho de contaminante emitido por la chimenea y eso es lo que se pretende en este apartado.

Como acabamos de comentar, en la evolución de la concentración del contaminante emitido influyen una serie de factores que se encuentran relacionados, la ecuación que nos proporciona la evolución de la concentración teniendo en cuenta estos efectos se conoce como “*ecuación de difusión de Fick*” y es la que a continuación se presenta:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial(uc)}{\partial x} + \frac{\partial(vc)}{\partial y} + \frac{\partial(wc)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_v \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (4.1)$$

Dónde:

c: Es la concentración de la sustancia que se difunde

K_H, K_v : Son los coeficientes horizontal y vertical de difusión de Eddy.

Además, se introduce el tratamiento de la turbulencia, el término de la izquierda quedaría:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_v \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + Tf - Ts \quad (4.2)$$

Donde:

Tf, Ts : Son los términos fuentes y sumidero, que en general sirven para tener cuenta si se producen reacciones químicas etc...

Por otro lado el coeficiente de difusión de Eddy K_v , sirve para tener en cuenta la turbulencia generada por la convección y depende de la altura y la estabilidad de la atmosfera.

Sin embargo, esta ecuación no suele aplicarse directamente si no que son considerados una serie de hipótesis que disminuyen la complejidad del problema:

- La sustancia vertida es conservativa, de manera que los términos fuente y sumidero son cero: $Tf = 0, Ts = 0$
- Se trata de un proceso en régimen estacionario, lo que implica que $\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = 0$
- Se escoge que la dirección principal del viento vaya a lo largo del eje x.
- Se selecciona la velocidad del viento u para que sea constante en cualquier punto del sistema de coordenadas x,y,z
- La velocidad es uniforme en la dimensión vertical
- El penacho está completamente desarrollado en la dimensión horizontal
- El transporte de contaminantes debido al viento a lo largo de la dirección x predomina sobre la difusión descendente, esto conlleva que: $\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \gg \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) = K_{xx} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2}$

Teniendo en cuenta, pues, estas simplificaciones la ecuación de Fick queda reducida a:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = K_{yy} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_{zz} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (4.3)$$

Siendo $K_{yy} \neq K_{zz}$. Estos coeficientes provienen de derivar los coeficientes K_H y K_v , respectivamente.

A su vez estas ecuaciones deben cumplir ciertas condiciones de frontera:

- $\begin{cases} C \rightarrow \infty & \text{si } x \rightarrow 0 \\ C \rightarrow 0 & \text{si } x, y, z \rightarrow \infty \end{cases}$ Es decir, la máxima concentración radica en la fuente y la concentración del contaminante a gran distancia es nula
- $K_v \frac{\partial C}{\partial z} \rightarrow 0$ Indica que no existe difusión en la superficie
- $\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty uC(x, y, z) dy dz = Q$ si $x > 0$ (la tasa de transporte del contaminante en la dirección del viento coincide con la tasa de emisión emitida por la fuente)

La solución aproximada a la ecuación anterior, imponiendo las anteriores condiciones de frontera, fue proporcionada por *Lowry y Boubel* (1967):

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{4\pi r (K_{yy} K_{zz})^{1/2}} \exp \left[\frac{-u}{4x} \left(\frac{y^2}{K_{yy}} + \frac{z^2}{K_{zz}} \right) \right] \quad (4.4)$$

Donde $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

No obstante esta expresión presenta algunas desviaciones con respecto a los resultados experimentales, sobre todo en zonas cercanas al suelo, de manera que no suele ser utilizada pero constituye un punto de partida para la búsqueda de nuevos modelos.

4.2 MODELOS DE DISPERSIÓN GAUSSIANO.

La ecuación anterior sugiere que la concentración varía tanto en la dirección vertical como transversal a la que sopla el viento siguiendo una distribución normal, de manera que la concentración va decayendo según nos acercamos a los extremos.

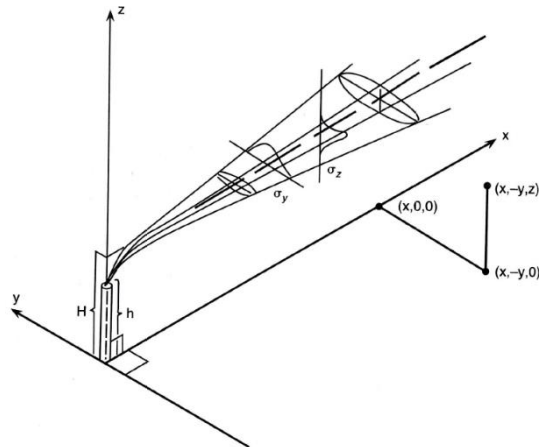


Figura 4.1.1. Sistema de coordenadas que muestra la distribución gaussiana en el eje vertical y horizontal. H.F.Liu, D. y G.Lipták, B. (2000).

Por lo que estas ecuaciones de dispersión tomarán la forma de una doble distribución gaussiana, que no es más que el resultado del producto de la distribución normal que tienen lugar en cada una de las direcciones mencionadas:

$$C(y, z) = \frac{1}{2\pi\sigma_y\sigma_z} \exp \left[\frac{-(y - \mu_y)^2}{2\sigma_y^2} + \frac{-(z - \mu_z)^2}{2\sigma_z^2} \right] \quad (4.1.1)$$

Donde el valor de μ_y, μ_z indicaría la situación donde tiene lugar la mayor concentración tanto en la dirección longitudinal como transversal, suele ser el centro de la pluma. Por otro lado los parámetros σ_y, σ_z tienen el efecto de aumentar o disminuir el ancho de la curva de distribución gaussiana. Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

4.3 APLICACIÓN AL CASO DE LA EMISIÓN DE UN CONTAMINANTE POR UNA CHIMENEA DE ALTURA H.

Para el caso que nos ocupa, la fuente de las plumas emitidas se encuentra emitidas a una altura h (altura de la chimenea) tal y como se muestra en la figura:

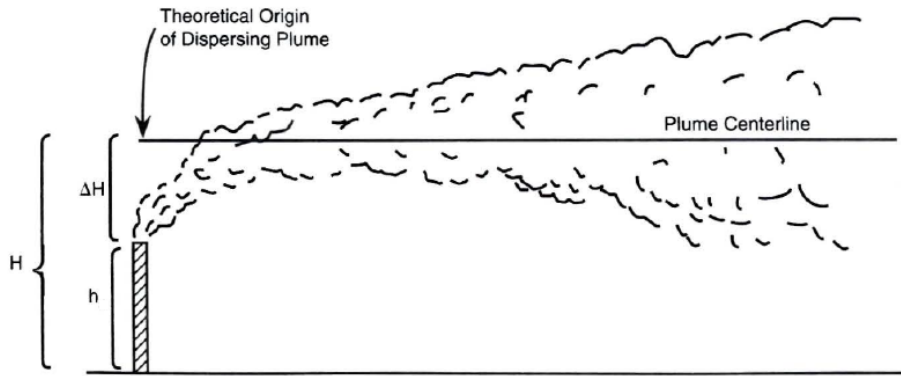


Figura 4.3.1. Altura efectiva de la fuente virtual, H , con punto teórico del comienzo de la dispersión por encima de la chimenea. H.F.Liu, D. y G.Lipták, B. (2000).

Sin embargo, como se puede apreciar, debido a que los gases emitidos de la chimenea están más calientes que los del medio que lo rodea estos tienden a ascender una altura Δh , altura en la cual los gases ya han igualado más o menos su temperatura y se estabilizan formándose entonces la pluma antes mencionada, Por lo tanto se considera que la pluma de gases se forma a una altura $h + \Delta h$ de la chimenea, lo que implica que el centro de esta fuente equivalente este situado un poco más atrás de la chimenea, sin embargo esta distancia se puede considerar despreciable y podemos situar el origen de esta fuente en $x = 0$. Por otro lado estos gases, salen de la chimenea a una velocidad " V_s " la cual es debida a la cantidad de movimiento de los gases que salen de la atmosfera.

Como se ha visto en el apartado anterior, los modelos de dispersión suelen desarrollarse aplicando un balance de materia a un volumen definido en el espacio cuyas dimensiones son dx, dy, dz . Tras lo cual, resolviendo el balance y aplicando las simplificaciones adecuadas, obteníamos una ecuación diferencial cuya solución era la siguiente:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{4\pi r(K_{yy}K_{zz})^{1/2}} \exp\left[\frac{-u}{4x}\left(\frac{y^2}{K_{yy}} + \frac{z^2}{K_{zz}}\right)\right] \quad (4.2.1)$$

En este caso, al movernos en el eje x suponemos que el parámetro r de la ecuación para una determinada dirección ya sea transversal o longitudinal vale $r = x$, teniendo en cuenta además que la ecuación anterior se puede dejar en función de los parámetros de una distribución normal (σ_y, σ_z) mediante las siguientes relaciones:

$$\sigma_y = \frac{2K_{yy}x}{u}, \sigma_z = \frac{2K_{zz}z}{u} \quad (4.2.2)$$

Y sabiendo que el término μ_z de la distribución gaussiana se corresponde en este caso, con el valor de la altura $H = h + \Delta h$

La ecuación que caracteriza la dispersión del contaminante emitida por una chimenea de altura H queda de la siguiente manera:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{(z - H)^2}{\sigma_z^2} \right) \right] \quad (4.2.3)$$

Aparte de esto, si el contaminante llega al suelo ($Z = 0$), se puede producir un fenómeno conocido como reflexión, que tiene el efecto de aumentar significativamente la concentración del contaminante en el punto donde se produce el mismo. Ya que al chocar el contaminante en el suelo, este tiende a devolver el contaminante a la atmosfera produciéndose en ese punto la suma de la concentración que llega con la que regresa del suelo.

Para poder expresar matemáticamente este fenómeno se hace uso de una fuente imaginaria invertida de altura $-H$ que nos proporciona una ecuación similar a la anterior pero cambiada de signo:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{(z + H)^2}{\sigma_z^2} \right) \right] \quad (4.2.4)$$

Y aplicando superposición obtenemos la expresión que tiene en cuenta este fenómeno:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \left[\exp - \frac{y^2}{\sigma_y^2} \right] \left(\exp \left[\frac{(z - H)^2}{\sigma_z^2} \right] + \exp \left[\frac{(z + H)^2}{\sigma_z^2} \right] \right) \quad (4.2.5)$$

En la siguiente figura se muestra de manera gráfica el sentido físico de este proceso:

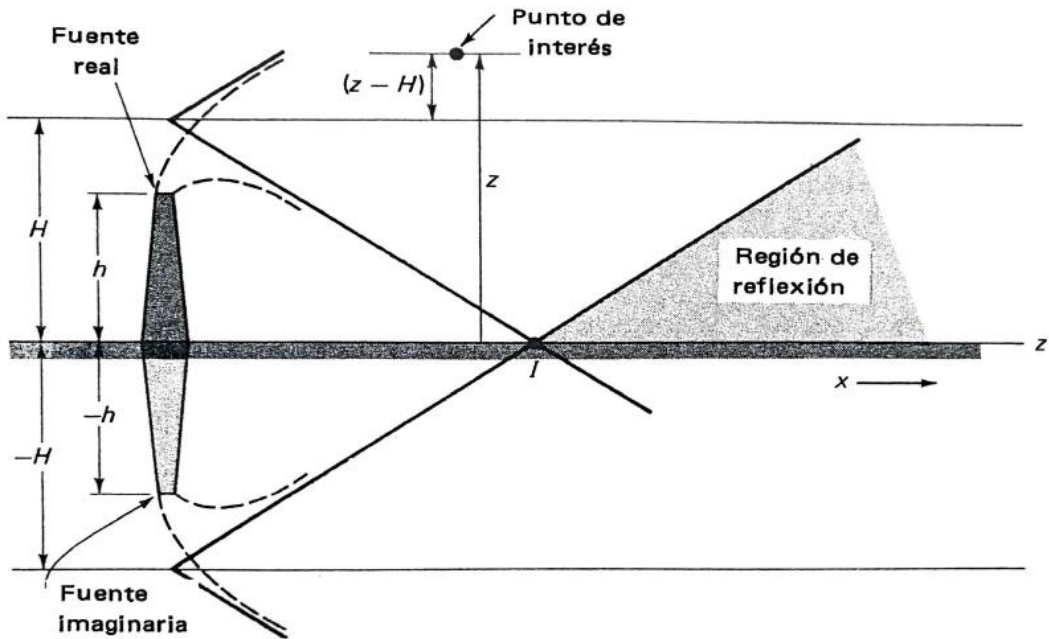


Figura 4.3.2. Fuente imaginaria para describir el fenómeno de reflexión en la superficie terrestre. Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

4.4 DESVIACIONES DE LOS PARÁMETROS DE DISPERSIÓN.

Por lo general se suele tener unos perfiles de concentración de los contaminantes a lo largo de los ejes que se suelen corresponder con los de la siguiente figura:

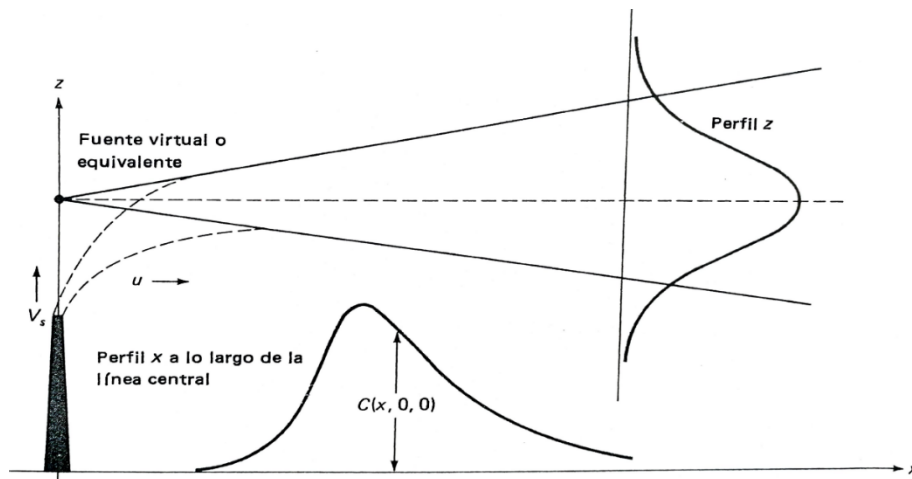


Figura 4.4.1. Perfiles de concentración a lo largo del eje X y Z. Wark, K. y F. Warner, C. (2005).

Sin embargo, como hemos anticipado antes, los parámetros de dispersión σ_y, σ_z tienen el efecto de aumentar o disminuir el ancho de la curva de distribución gaussiana.

Y es la corrección de estos parámetros la manera que tienen estos modelos de considerar los efectos de la turbulencia convectiva y mecánica provocada por fenómenos relativos a la estabilidad atmosférica o como es el caso que nos interesa, la presencia de obstáculos o cualquier otro elemento que pueda añadir cierta rugosidad al terreno.

- Estabilidad atmosférica: Como puede provocar turbulencias de ambos tipos, el grado de estabilidad tiene su influencia en ambos parámetros de dispersión (σ_y, σ_z). El método más utilizado es el método de Martin (Martin, 1976), el cual, calcula los parámetros de dispersión mediante las siguientes correlaciones:

$$\begin{cases} \sigma_y = ax^{0,894} \\ \sigma_z = cxd + f \end{cases} \quad (4.3.1)$$

Donde:

x : Es la distancia expresada en Km.

a, c, d, f : Son coeficientes que se relacionan con el grado de estabilidad mediante la siguiente tabla:

Estabil.Categoría	$X \leq 1$				$X > 1$		
	a	c	d	f	c	d	f
A	213	440,8	1,941	9,27	459,7	2,094	-9,6
B	156	106,6	1,149	3,3	108,2	1,098	2
C	104	61	0,911	0	61	0,911	0
D	68	33,2	0,725	-1,7	44,5	0,516	-13
E	50,05	22,8	0,678	-1,3	55,4	0,305	-34
F	34	14,35	0,74	-0,35	62,6	0,18	-48,6

Tabla 4.4.1 Valores de las constantes para el cálculo de σ_y y σ_z como función de la distancia en la dirección del viento y de la condición de estabilidad. D.O. Martin (1976)

Otro método que se suele utilizar es el método gráfico, en el que se utiliza las llamadas gráficas de Turner (Turner, 1970)

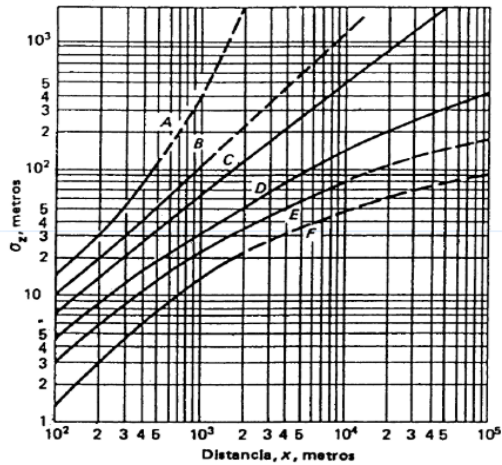


Figura 4.4.2. Desviación normal, σ_y en la dirección del viento cruzado como una función de la distancia del viento. Turner (1970)

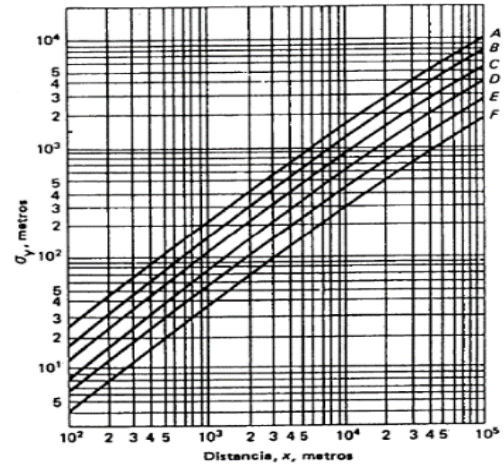


Figura 4.4.3. Desviación normal, σ_z en la dirección del viento cruzado como una función de la distancia del viento. Turner (1970)

Que relacionan el valor de los parámetros de dispersión con la estabilidad.

- Corrección de la rugosidad del terreno: Esta corrección solo afecta al parámetro de dispersión vertical σ_z , y lo hace por medio de la rugosidad del terreno, esta rugosidad sin embargo abarca tanto el efecto de la vegetación como el efecto de obstáculos como edificios etc...Esto se hace mediante un coeficiente de rugosidad del terreno (Z_0) propuesto por Pasquill que se aplica a la siguiente ecuación:

$$\sigma_z = b' \cdot (Z_0) \cdot x^m \quad (4.3.2)$$

Donde:

b' : Depende tanto de la estabilidad como de la rugosidad del terreno.

m : Depende solo de la estabilidad atmosférica.

A continuación se presenta una tabla donde se incluyen los valores que puede adquirir el coeficiente Z_0 :

Tipo de superficie	Descripción	Zo(m)
Terreno llano	Áreas abiertas con pocos arboles	0,03
Terreno agrícola	Aeropuertos, tierras arables, áreas con muchos arboles	0,10
Terreno cultivado	Invernaderos, Áreas abiertas con vegetación densa, casa dispersas, etc.	0,30
Área residencial	Área con alta densidad de casas bajas, áreas arboladas, zonas industriales con obstáculos no demasiado grandes	1,00
Área Urbana	Ciudades con edificios elevados, áreas industriales con obstáculos grandes	3,00

Tabla 4.4.2. Valores rugosidad Z_0 del terreno en función del tipo de superficie. Pasquill (1954)

Vemos como en nuestro caso Z_0 Tendría un valor de $Z_0 = 3$

Y los valores de b' y m en función de la estabilidad y la rugosidad son considerados en la siguiente tabla.

	a	p	Zo=0,03 m		Zo=0,10 m		Zo=0,30 m		Zo=1,00 m		Zo=3,00 m	
			b'	m	b'	m	b'	m	b'	m	b'	m
A	0,527	0,865	0,193	0,932	0,28	0,9	0,383	0,873	0,842	0,842	0,76	0,814
B	0,371	0,866	0,16	0,891	0,23	0,85	0,317	0,822	0,792	0,792	0,631	0,763
C	0,209	0,897	0,155	0,83	0,22	0,8	0,308	0,771	0,74	0,74	0,612	0,712
D	0,128	0,905	0,136	0,791	0,2	0,76	0,276	0,732	0,701	0,701	0,548	0,673
E	0,098	0,902	0,104	0,761	0,15	0,73	0,207	0,702	0,671	0,671	0,411	0,643
F	0,065	0,902	0,083	0,701	0,12	0,67	0,164	0,642	0,611	0,611	0,327	0,583

Tabla 4.4.3. Valores de los parámetros b' y m en función de la clase de estabilidad atmosférica. Pasquill (1954)

También es posible hacer correcciones de otros parámetros como la velocidad, la tasa de emisión, etc...Para hacer los resultados más precisos. Para ello se suele hacer uso de tablas o de ecuaciones algunas de las cuales ya han sido nombradas en este trabajo, por ejemplo para el caso de la velocidad se ha planteado, la ley de exponenciales de Deacon.

CAPÍTULO 5

DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO
DE SIMULACIÓN POR REDES

CAPÍTULO 5

DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO DE SIMULACIÓN POR REDES

5.1 MÉTODO DE SIMULACIÓN POR REDES.

A menudo en la naturaleza se presentan situaciones prácticas donde por complejidad de la geometría o la continua variación de las condiciones de frontera no es posible hallar una solución analítica al problema o si esta es posible su evaluación numérica puede resultar demasiado compleja, para tales casos lo más común es valernos de las aproximaciones numéricas que nos proporcionan los métodos numéricos convencionales como por ejemplo los métodos de diferencias finitas tanto explícito como implícito o los métodos iterativos.

La mayoría de estos métodos consisten en realizar una reticulación del espacio, es decir, una división del mismo en elementos de volúmenes muy pequeños pero finitos de tal manera que se adaptan al problema. Cuantos más pequeños se hacen estos elementos de volumen más se aproxima la solución dada por el método a la proporcionada por el modelo diferencial.

Al centro de cada uno de estos elementos de volumen se le denomina nudo, de manera que si consideramos el análisis de una determinada variable, por ejemplo la concentración de un contaminante, entonces la concentración que tenemos en un nudo se corresponde con la concentración que tendríamos en todo el elemento de volumen que contiene a dicho nudo. El conjunto de todos estos elementos de volumen es lo que constituye un modelo de red correspondiente a todo el medio finito que es tanto más preciso como mayor es el número de celdas. El método consiste entonces en aplicar las ecuaciones diferenciales a estos elementos de volumen de manera que las condiciones iniciales y de contorno que permiten resolverlas son añadidas al modelo en red mediante un elemento eléctrico adecuado que sea capaz de describir la naturaleza del problema.

En resumen, la aplicación de esta clase de métodos supone la sustitución del sistema de ecuaciones diferenciales que resuelven el problema por un circuito eléctrico equivalente que posteriormente es resuelto.

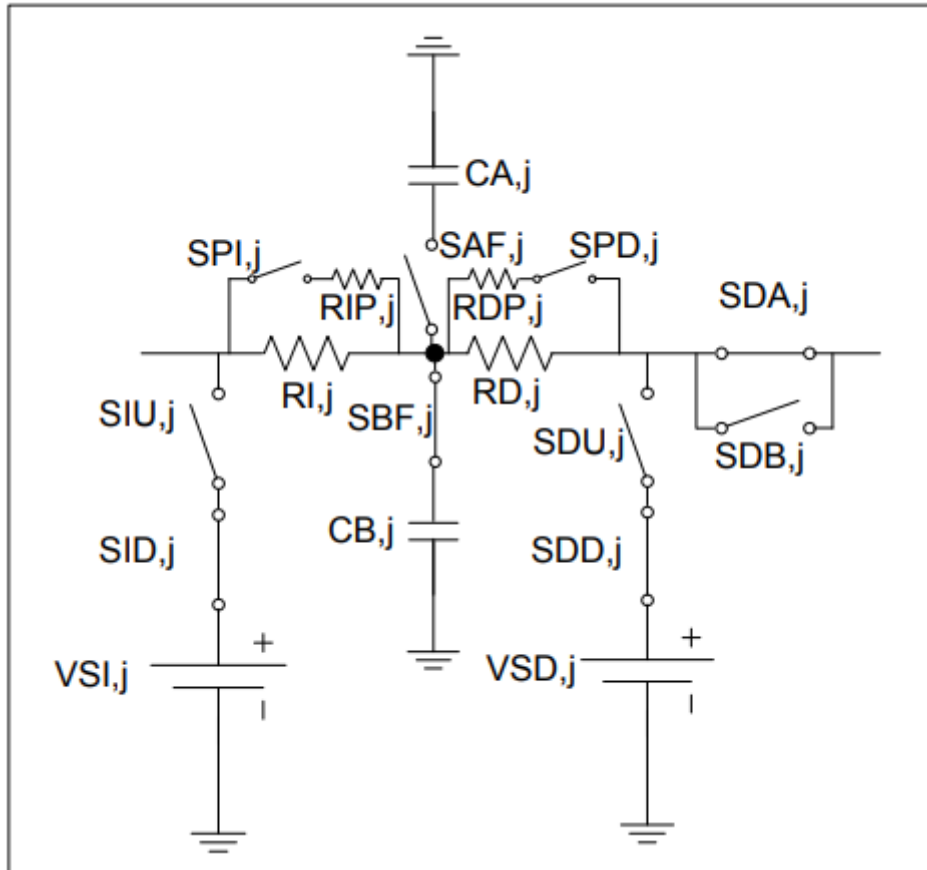


Figura5.1.1 Ejemplo de modelo en red de una celda intermedia para proceso de difusión en el sistema óxido-metal. Sánchez Pérez J.F. (2012).

El método de simulación por redes (MESIR) es el que se ha utilizado en este estudio debido a que presenta una serie de ventajas con respecto a otros métodos numéricos. En primer lugar la resolución del problema eléctrico es realizado mediante un software de resolución de circuitos en nuestro caso PSPICE, que nos proporciona directamente soluciones numéricas del sistema.

Por otro lado en vez de realizar una discretización simultánea de las variables espacio y tiempo solo es necesario discretizar la primera de ellas, esto no es necesario ya que la reticulación espacial se realiza de forma sucesiva por NGSPICE durante la parte de la simulación.

5.2 VIABILIDAD DEL MODELO EN RED Y CLASIFICACIÓN DE LOS ELEMENTOS DEL MODELO.

Al igual que si se tratara de un circuito eléctrico normal, las variables de este circuito equivalente deben cumplir con la primera y segunda ley de Kirchhoff solo que en lugar de tener como variables la corriente y el voltaje en cada nudo del circuito, estas variables flujo por un lado y potencial por otro. Así por ejemplo en el caso del transporte de un contaminante como es el caso que se nos ocupa, la variable flujo podría simbolizar el flujo de masa que tiene lugar y la variable potencial podría ser la concentración del contaminante.

Según *Alhama López, F. et al (2010)*, se puede establecer que para el modelo de red sea viable se debe cumplir que:

- Las variables del circuito eléctrico cumplan con las leyes de Kirchhoff, es decir.
 - Existe una magnitud j en cada rama del circuito que obedece la ley de intensidades de Kirchhoff
 - Existe una determinada variable φ tal que la diferencia de esta variable en cada nudo $\varphi_{N'} - \varphi_N = X(t)$, a la que se le llama fuerza, cumple la ley de voltajes de Kirchhoff
- La red debe ser independiente de la variable tiempo.

Sin embargo, las leyes de Kirchhoff solo proporcionan relaciones que involucran a los flujos y a las fuerzas por separados pero como interaccionan entre ellos.

Las relaciones que precisamente definen los elementos que deben situarse en cada rama del circuito aquellas que se dan entre los flujos y las fuerzas,

estas relaciones reciben en nombre de ecuaciones constitutivas. Cuando las relaciones constitutivas se dan entre las variables de un par flujo-fuerza reciben el nombre de monpuertas. A su vez estas monpuertas pueden ser pasivas si se dedican a disipar la energía o activas si por el contrario la generan:

- **Monpuertas pasivas:** Se dividen a su vez en :
 - **Monpuertas resistivas:** Se da cuando el proceso físico que se quiere describir es disipativo por ejemplo, en el caso de fricciones o efectos viscosos. En este caso la relación entre las variables flujo y resistencia vienen dadas por una constante que es independiente del tiempo:

$$\frac{dX(t)}{dt} = R \frac{dj(t)}{dt} \quad (5.2.1)$$

Una monpuerta resistiva puede tener relacionadas estas variables de manera lineal o no-lineal y en función de ello tendremos un equivalente eléctrico diferente, así si la relación es lineal, esta puede ser representada mediante una simple resistencia, en cambio si no lo es, lo más común es que esté representada por una fuente controlada de tensión o de intensidad.

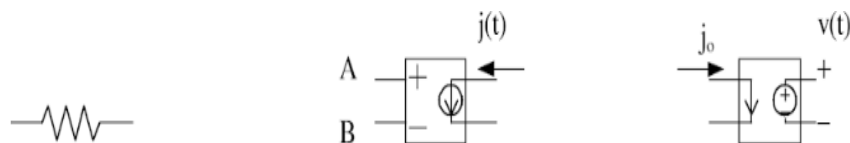


Figura 5.2.1. Representación de monpuertas resistivas. Cánovas, F. Alhama, I. Alhama, M. Alcaraz (2010)

- **Monpuertas Capacitivas:** estas monpuertas se tienen en cuenta cuando el proceso físico que se quiere describir presenta algún fenómeno en el que se produce alguna clase de almacenamiento energético. Efectivamente el equivalente eléctrico que produce tal efecto se trata de un condensador y por lo tanto las ecuaciones que relacionan las variables flujo y

fuerza en este caso deben ser similares a las que ecuaciones de definición de la bobina por lo que se tiene que:

$$j(t) = C \frac{dX(t)}{dt} \quad (5.2.2)$$

Donde la función que establece la relación entre ambas variables es independiente del tiempo y recibe el nombre de capacidad, a continuación se muestra la representación de dicho elemento:



Figura 5.2.2. .Representación de monopuerta capacitiva. Cánovas, F. Alhama, I. Alhama, M.Alcaraz (2010).

- **Monopuertas Activas:** Se dividen a su vez en :
 - **Fuente constante:** El único cometido de estas fuentes suele ser indicar en qué dirección va el flujo sus expresiones son dependiendo de si tenemos una u otra :

$$F_j(j) = 0 \quad y \quad F_x(j) = 0 \quad (5.2.3)$$

Eléctricamente se representan por una fuente de tensión o de intensidad normal:

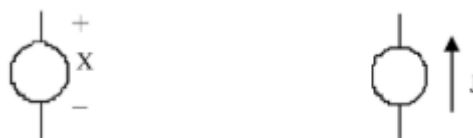


Figura 5.2.4. .Representación de monopuertas activas: Fuentes constantes. Cánovas, F. Alhama, I. Alhama, M.Alcaraz (2010).

- **Fuente dependientes en el tiempo:** Las ecuaciones constitutivas son similares que en el caso anterior, sin embargo a estas hay que añadir:

$$X = X(t) \text{ y } j = j(t) \quad (5.2.4)$$

Eléctricamente se caracterizan como una fuente cuya forma de onda puede variar en el tiempo, pudiendo ser esta de cualquier tipo: cuadrada, triangular, etc...:

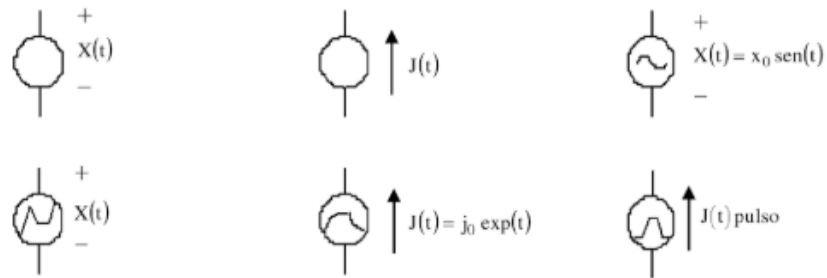


Figura 5.2.5. .Representación de monopuertas activas: Fuentes dependientes del tiempo. Cánovas, F. Alhama, I. Alhama, M.Alcaraz (2010).

- **Fuentes controladas:** Es el caso de todas aquellas relaciones que tienen lugar entre flujo y fuerza por medio de funciones que no necesariamente depende del tiempo sino que a menudo lo suelen hacer de los flujos y fuerzas de otras ramas ajenas, estas fuentes permiten introducir acoplamientos magnéticos al modelo de red. Eléctricamente pueden estar caracterizadas por una fuente de tensión controlada por tensión, una fuente de tensión controlada por corriente, una fuente de corriente controlada por tensión y una fuente de corriente controlada por corriente:

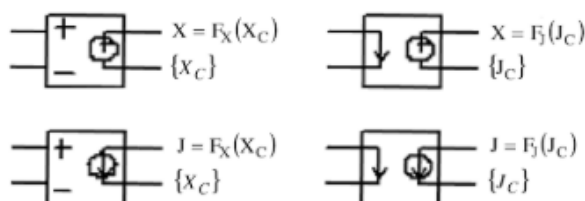


Figura 5.2.6. .Representación de monopuertas activas: Fuentes controladas. Cánovas, F. Alhama, I. Alhama, M.Alcaraz (2010).

5.3 EXPLICACIÓN DEL SOFTWARE DE RESOLUCIÓN DE CIRCUITOS PSPICE.

Una vez se ha transformado el modelo a un lenguaje que el programa puede leer se procede a iniciar la simulación. Esta simulación se encuentra formada por cinco subprogramas que son capaces de interactuar entre sí debido a que se dispone de una estructura de datos que es creada cuando arranca la simulación y al que pueden acceder el resto de los subprogramas, lo que permite la comunicación entre ellos. *Sánchez Pérez J.F. et al (2012)*

Estos subprogramas son los siguientes:

- Entrada: Es el que se encarga de interpretar el archivo, además de que construye la de la estructura de datos antes mencionada y archivo chequea e
- Organización: Este subprograma constituye una parte muy importante de la simulación puesto que se encarga de la creación de estructuras adicionales de datos que pueden ser requeridas posteriormente por el programa.
- Análisis: Es el subprograma que cuenta con más peso dentro de la simulación pues es el encargado de ejecutar la resolución de los circuitos teniendo en cuenta los datos proporcionados por el subprograma de entrada para luego volcarlos en la memoria central para que sean procesados por el subprograma de salida. Al ser el programa que tarda más tiempo en ejecutarse, es el que determina la eficiencia de la simulación.
- Salida: Se encarga de organizar los resultados en la memoria central o en discos y de mostrarlos en la forma indicada por el usuario (tablas, gráficas, etc...)
- Utilidades: Constituye, tal vez la parte menos importante de la simulación puesto que no participa activamente en el si no que se encarga de otros aspectos como la organización y almacenaje de los componentes o partes del modelo para compartirlos con otros usuarios si fuera necesario.

A continuación se muestra un esquema que representa el diagrama de bloques de la simulación:

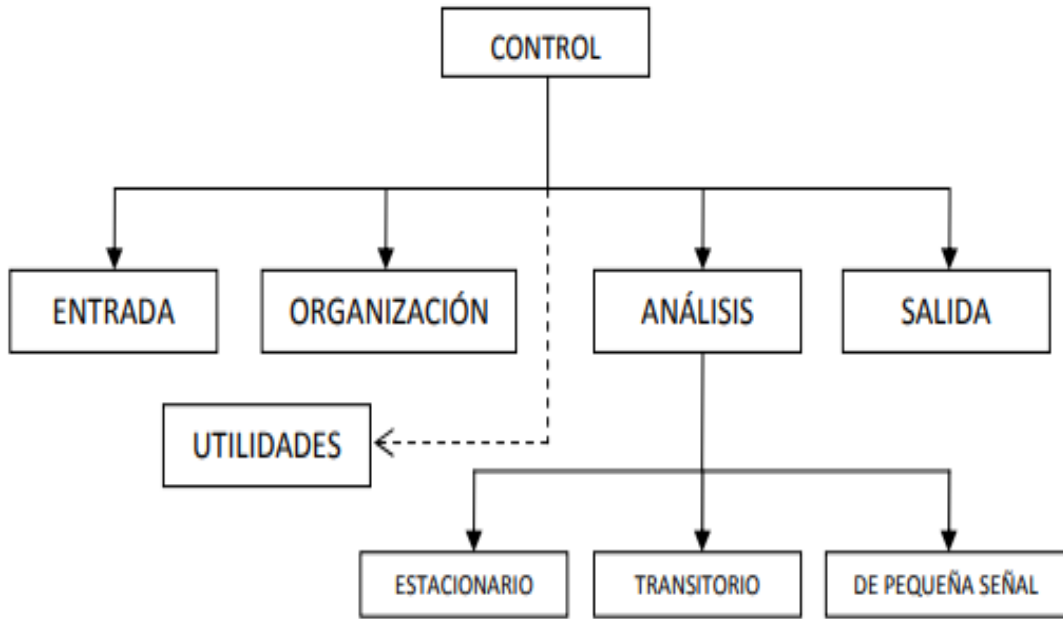


Figura 5.3.1. Diagrama de bloques del programa de simulación de circuitos PSPICE. Sánchez Pérez J.F. (2012).

CAPÍTULO 6

RESULTADOS

CAPÍTULO 6

RESULTADOS

6.1 DESARROLLO EXPERIMENTAL

El objetivo de este experimento es el de estudiar el comportamiento de la nube de contaminante en presencia de un obstáculo. En primer lugar se tratara de estudiar que efecto tiene la distancia de separación del obstáculo a la fuente de emisión. En segundo lugar se tratara de analizar cuál es la influencia de las dimensiones del obstáculo. Para ello se realizan dos experimentos:

- Primer experimento: Consiste en variar la posición de un obstáculo cuyas dimensiones son 20 metros de alto ,40 metros de ancho y 9 metros de alto medidos sobre los ejes X, Y y Z respectivamente .Como la dirección en la que se propaga la nube es el eje X, la pared que se encuentra enfrente a la pluma de gases es la correspondiente a 40 metros de ancho y 9 de alto. Para la realización de las simulaciones se posicionará el objeto justo por delante de la chimenea y se irá variando la posición del obstáculo a lo largo de la dirección X, incrementando la separación entre el obstáculo y la chimenea para cada simulación. En total se realizaran seis simulaciones distintas.
- Segundo Experimento: Para este experimento se utilizará un obstáculo cuyas dimensiones son el doble de las del obstáculo utilizado en el primer experimento. Igualmente se ira variando la distancia de separación entre el obstáculo y la chimenea. Se realizaran por tanto otras seis simulaciones.

Posteriormente también se simulará la evolución de la concentración para el caso en el que no haya obstáculo y se comparan las diferencias de concentración que se producen en una determinada zona como consecuencia de la colocación del obstáculo.

Esto se realizara tanto para el obstáculo del primer experimento como para el obstáculo del segundo experimento.

Para todos los experimentos, la chimenea se encontrará respecto del origen a una longitud de 50 metros en el eje "X", una latitud de 400 metros en el eje "Y" y tendrá una altura de 9 metros.

6.2 INTRODUCCIÓN DE DATOS

Para la realización de las simulaciones se ha utilizado un programa denominado Aircon, el cual se encuentra implementado en Matlab. Este programa es capaz de mostrarnos la evolución de las concentraciones para diferentes alturas. En nuestro caso las simulaciones serán realizadas para una altura de 6 metros.

El escenario donde se realizan las simulaciones presenta las siguientes dimensiones: 5000 metros en el eje X, 2200 en el eje Y y 100 metros en el eje Z, los cuales caracterizan longitud, latitud y altura respectivamente. El mallado los ejes es diferente en cada uno de ellos siendo este número de divisiones mayor cuanto más cerca nos encontramos del foco para aumentar la precisión de la predicción, pues en la periferia de la chimenea es donde ocurren los mayores cambios de concentración con la distancia.

El software, además, nos permitirá elegir el tipo de graficas de concentraciones que queramos visualizar al terminar la simulación manteniendo fijas una o más dimensiones según le indiquemos introduciendo el número correspondiente en "*permiso*". Por lo tanto, si fijamos la altura el programa nos arrojará el resultado de las simulaciones en un escenario como el que se presenta en la figura 6.2.1 donde se puede apreciar el diferente mallado antes comentado entre dos de los ejes:

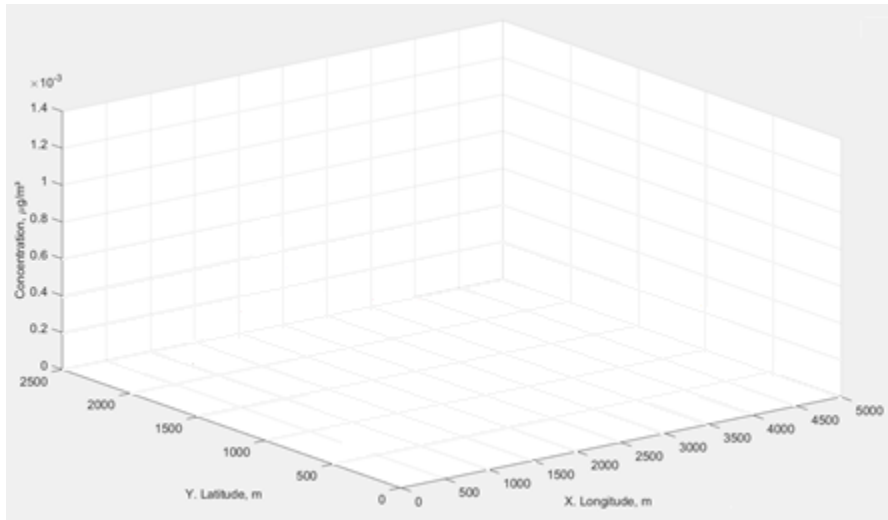


Figura 6.2.1. Escenario para las simulaciones

A continuación se muestran los datos iniciales que se han introducido en el programa para realizar las simulaciones. En primer lugar vemos como se realiza el mallado de las simulaciones.

```
% Celdas pequeñas
distanciax=750;
distanciay=800;
distanciaz=30;
ncx=15;
ncy=10;
ncz=10;
dx=distanciax/ncx;
dy=distanciay/ncy;
dz=distanciaz/ncz;
DXZ=num2str(dx,nundem);
DYZ=num2str(dy,nundem);
DZZ=num2str(dz,nundem);
```

Figura 6.2.2. Parte del código en el que se establece las dimensiones de las celdas pequeñas.

Se definen ahora las condiciones de la emisión y la posición de la chimenea:

```
% Condiciones y posición de emisión
continua=1;
% Continua = 1 es emisión continua
% Continua = 0 es emisión discontinua TEMI horas
cambiouni=1E5; % Cambio de unidades para aumentar velocidad en el cálculo y perdiendo precisión
valorlimiteemi=0.0001; % Límite de emisión en mg/Nm³ ug/Nm³ o ng/Nm³
valorlimiteemision=valorlimiteemi*cambiouni; % Cambio de unidades en el valor límite de emisión
Caudal=1400; %Nm³/h Valor medio de caudal
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 en ug/s
%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

% Datos emisión discontinua
TEMI=8; % Tiempo de emisión en horas
nuemroemisiones=365; % Repetición de la emisión
TEMIN=24-TEMI; % Tiempo sin emisión en horas

TEMI1=TEMI*3600;
TEMIN1=TEMIN*3600;
QZ=num2str(QQ,nundem);
TEMI2=num2str(TEMI,nundem);
TEMIN2=num2str(TEMIN,nundem);
```

Figura 6.2.3. Parte del código en el que se establece los datos de emisión.

```

% Posición de la chimenea
posx=50; % Posición de la chimenea en la coordenada x
posy=round(distanciay/2); % Posición de la chimenea en la coordenada y. Si se quiere en el centro poner "round(distanciay/2)"
posz=9; % Posición de la chimenea en la coordenada z
posi=round(posx/dx);
posj=round(posy/dy)+round(ncyg/2); % Si se quiere en el centro poner "+round(ncyg/2)"
posk=round(posz/dz);
    
```

Figura 6.2.4. Parte del código en el que se establece la posición de la chimenea

Como se había adelantado antes, la chimenea tendrá 9 metros de altura y se encuentra justo en el centro del mallado en la dirección del eje “Y” y a 50 metros del origen en la dirección del eje “X”. La chimenea emitirá de manera continua con un caudal de 1400 Nm³/h.

A continuación se indica donde se han introducido los parámetros de los obstáculos, la rugosidad del medio, día, mes hora, temperatura, porcentaje de nubosidad, insolación y dirección y velocidad del viento.

```

% Parámetros de obstaculos
obsta=1; % obsta=0 no hay obstaculo obsta=1 hay obstaculo

posedx=250; % Posición del obstaculo en la coordenada x
posedy=400; % Posición del obstaculo en la coordenada y
posedz=9; % Posición del obstaculo en la coordenada z
longx=20; % Longitud del edificación en x
longy=40; % Longitud del edificación en y
longz=posedz; % Longitud del edificación en z
posedini=round((posedx-(longx/2))/dx);
posedinj=round((posedy-(longy/2))/dy);
posedink=0; %round((posedz-(longz/2))/dz)
posedfini=round((posedx+(longx/2))/dx);
posedfinj=round((posedy+(longy/2))/dy);
posedfink=round(longz/dz); % round((posedz-(longz/2))/dz)

%Valores del .TRAN (Temporales)
dias=0.08333333333333333333333333333333; % Tiempo de dispersión o tiempo final
    
```

Figura 6.2.5. Parte del código en el que se establece las dimensiones del obstáculo

```

KKM=0.41; % Constante de von Karman
KKM2=num2str(KKM,nundem);

reac=0; % reac=0 no hay reccion quimica; reac=1 hay rección química
KA=0.08/3600; % Constante cinética s^-1
KAZ=num2str(KA,nundem);

%%% RUGOSIDAD %%%
% Terreno llano sin vegetación RUG=1E-3
% Terreno llano con hierba menor 10cm RUG=1E-2
% Terreno llano con hierba mayor 10cm RUG=3E-2
% Terreno agrícola complejo RUG=0.2
% Ciudad o bosque RUG=1-3

RUG=1; % Rugosidad

% Concentración de fondo
cini=0; % Concentración de fondo en las mismas unidades que la emisión (g o mg o ug)
    
```

Figura 6.2.6. Parte del código en el que se establece el parámetro de rugosidad.

CAPÍTULO 6: RESULTADOS

```
% DATOS CAMBIANTES EN LA SIMULACIÓN
mesin=7; % Mes del año de inicio
dia=5; % Día del mes
tri=1; % Hora en sistema universal (GMT) de inicio (horas) España: invierno GMT+1 verano GMT+2

% DATOS DE POSICIÓN
Long=-0.019774580425096; % Longitud (rad). Murcia=-0.019774580425096 rad. Cartagena=-0.017138155870203
Lat=0.662928409785006; % Latitud (rad). Murcia=0.662928409785006 rad. Cartagena=0.656941930450666

% TEMPERATURAS DEL AÑO POR MESES
%Temperatura de día
T(1)=19.5; % Temperatura (°C)
T(2)=20.1; % Temperatura (°C)
T(3)=21.5; % Temperatura (°C)
T(4)=18.2; % Temperatura (°C)
T(5)=27.3; % Temperatura (°C)
T(6)=33; % Temperatura (°C)
T(7)=34.9; % Temperatura (°C)
T(8)=34.1; % Temperatura (°C)
T(9)=32.7; % Temperatura (°C)
T(10)=27.5; % Temperatura (°C)
T(11)=21.2; % Temperatura (°C)
T(12)=17.2; % Temperatura (°C)
```

Figura 6.2.7. Parte del código en el que se establece la temperatura de la simulación.

```
% NUBOSIDAD DEL AÑO POR MESES
NN(1)=0; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
NN(2)=0; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
NN(3)=0; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
NN(4)=0.55; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
NN(5)=0.42; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
NN(6)=0.31; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
NN(7)=0.18; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
NN(8)=0.24; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
NN(9)=0.41; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
NN(10)=0.58; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
NN(11)=0.51; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
NN(12)=0.6; % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)
```

Figura 6.2.8. Parte del código en el que se establece el porcentaje de nubosidad.

```
% Parámetros de nubosidad
NN=NN(mes); % Porcentaje de nubes tanto por 1 (0-1)

% Parametros del aire
hr=0.3; % Humedad relativa
dens=1.2; % Densidad del aire (kg/m³)
cp=1000; % Calor específico a presión coonstante (J/kg·K)
g=9.81; % Gravedad (m/s²)
```

Figura 6.2.9. Parte del código en el que se establece los parámetros del aire

```
%%% INSOLACIÓN %%%
%insolacion=4;
% insolacion 1 es insolación diurna y fuerte
% insolacion 2 es insolación diurna y moderada
% insolacion 3 es insolación diurna y ligera
% insolacion 4 es noche y cubierto 4/8 (0.5) o más
% insolacion 5 es noche y cubierto 3/8 (0.375) o menos

% Estabilidad para velocidad en x
```

Figura 6.2.10. Parte del código en el que se establece el parámetro de insolación

```
% Parámetros de viento y temperatura
%%% ELECCIÓN DE TIPO PERFIL DE VIENTO
pot=1; % Potencial Pot=1; Logaritmico Pot=0

URDIA=URMES(mes); % m/s % Velocidad de viento en la dirección principal (hipotenusa entre Vx y Vy)
URNOCHE=URNMES(mes); % m/s % Velocidad de viento en la dirección principal (hipotenusa entre Vx y Vy)

TAMBDIA=T(mes)+273; % Temperatura (K)
TAMBNOCHE=T(mes)+273; % Temperatura (K)

ZR=10; % m altura de referencia
ang=0; % Ángulo de desviación del viento en la dirección principal respecto de X varía de 0 a 90 grados
ang=pi*ang/180;
```

Figura 6.2.11. Parte del código en el que se establece los parámetros del viento

```

    *** DIRECCIÓN DEL VIENTO ***
    vientoydrecha=0;
    % vientoydrecha 1 es el viento en y de izquierda a derecha
    % vientoydrecha 0 es el viento en y de derecha a izquierda

    VD=0.02; % m/s Velocidad de deposición
    WT=7.272;
    ff=2*WT*sin(Lat);
    UG=(-g/ff)*(dz/dy);
    RO=OG/(ff*ROG);
    CO=0.16/(log10(abs(RO))-1.8); % La ecuación lleva un valor absoluto en el logaritmo

    *** INSOLACIÓN ***
    %insolacion=:
    % insolacion 1 es insolación diurna y fuerte
    % insolacion 2 es insolación diurna y moderada
    % insolacion 3 es insolación diurna y ligera
    % insolacion 4 es noche y cubierto 4/8 (0.5) o más
    % insolacion 5 es noche y cubierto 3/8 (0.375) o menos

    % Estabilidad para velocidad en x
  
```

Figura 6.2.12. Parte del código en el que se establece la dirección del viento.

Por lo tanto nuestra simulación será realizada un 5 de julio a las 11:00 horas, la temperatura es de 34,9°C, el porcentaje de nubosidad es del 18 %, Donde tenemos unas condiciones de estabilidad ligeras. Por otro lado, el ángulo de desviación del viento en la dirección principal respecto de X es nulo por lo que el viento sopla desde atrás con una velocidad de 1 m/s

6.3. RESULTADOS DE LAS SIMULACIONES Y GRAFICAS

Para analizar mejor los efectos ocasionados por los obstáculos se mantendrán invariantes las condiciones ambientales y de emisión antes comentadas.

Como las simulaciones de ambos experimentos se han realizado colocando los obstáculos en las mismas posiciones se mostrarán de forma conjunta los resultados obtenidos en el caso de ambos experimentos para una misma posición con el fin de facilitar la comparación entre ellos.

Estos resultados mostrarán la evolución de la concentración a lo largo del eje "X" tanto en dos como en tres dimensiones.

- **150m**

- Primer experimento

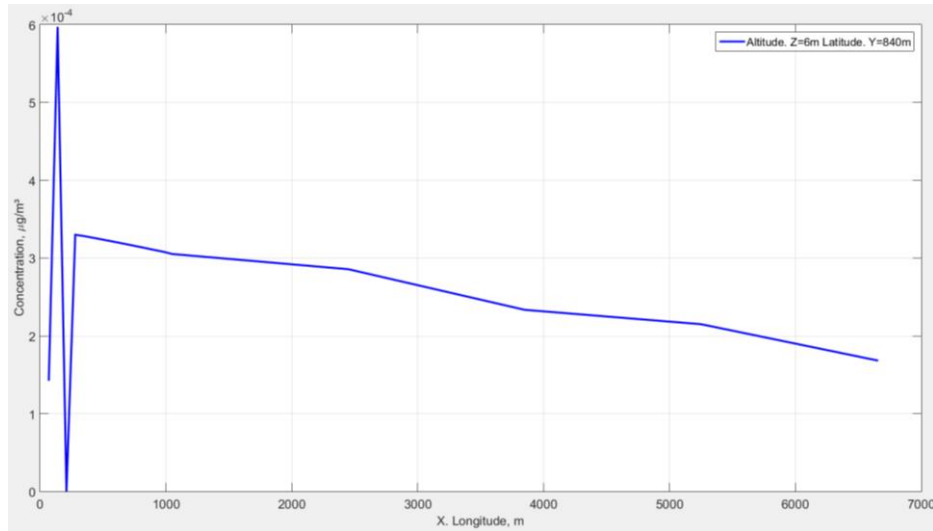


Figura 6.3.1. Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y del primer obstáculo a 150 m

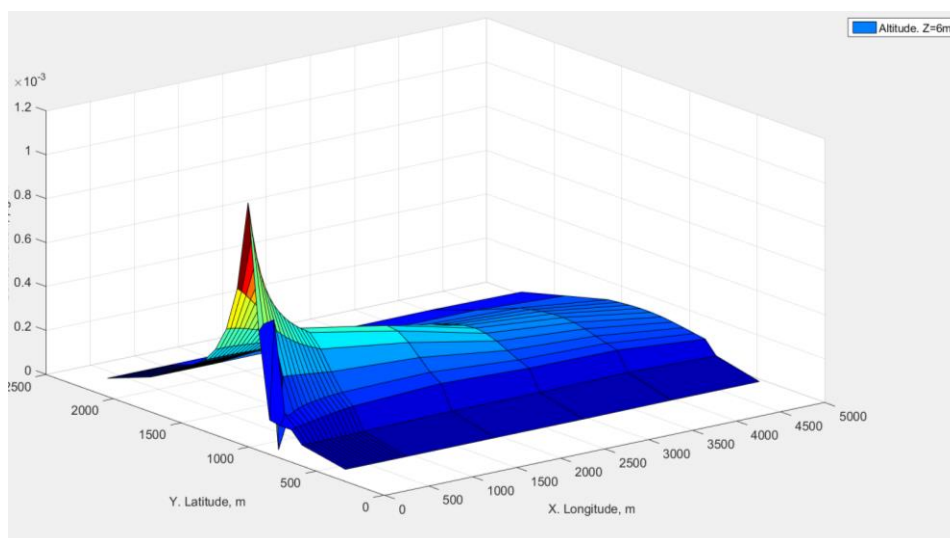


Figura 6.3.2.. Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m del primer obstáculo a 150 m.

➤ Segundo experimento

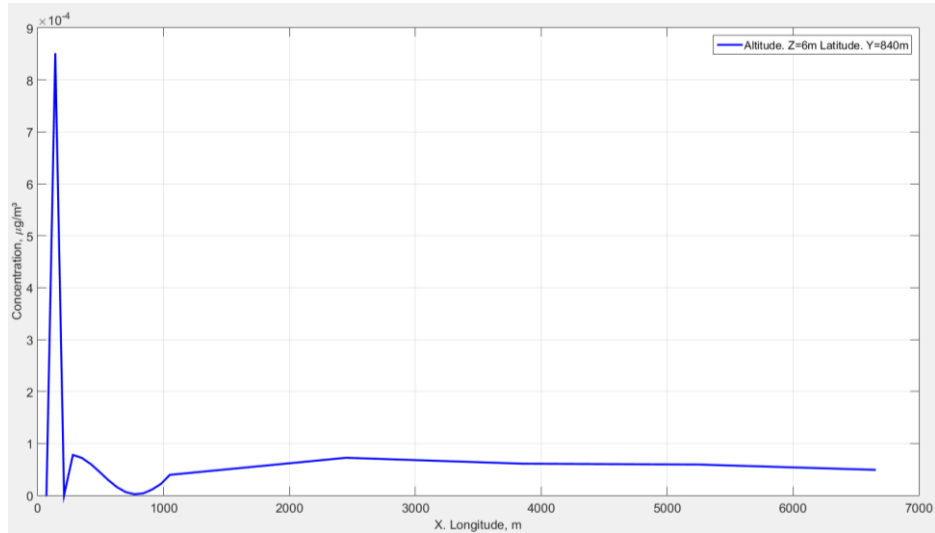


Figura 6.3.3. Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y del segundo obstáculo a 150 m

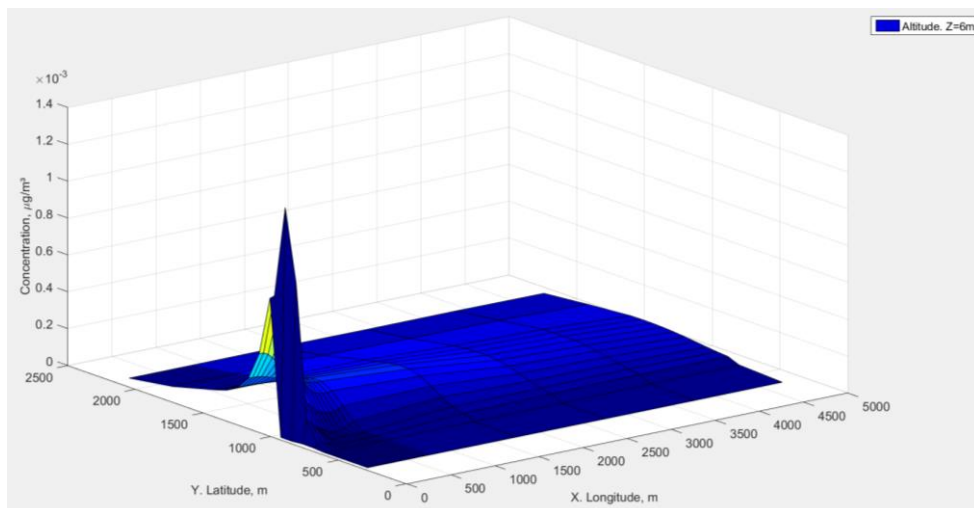


Figura 6.3.4 Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m del segundo obstáculo a 150 m

- **250m**

- Primer experimento

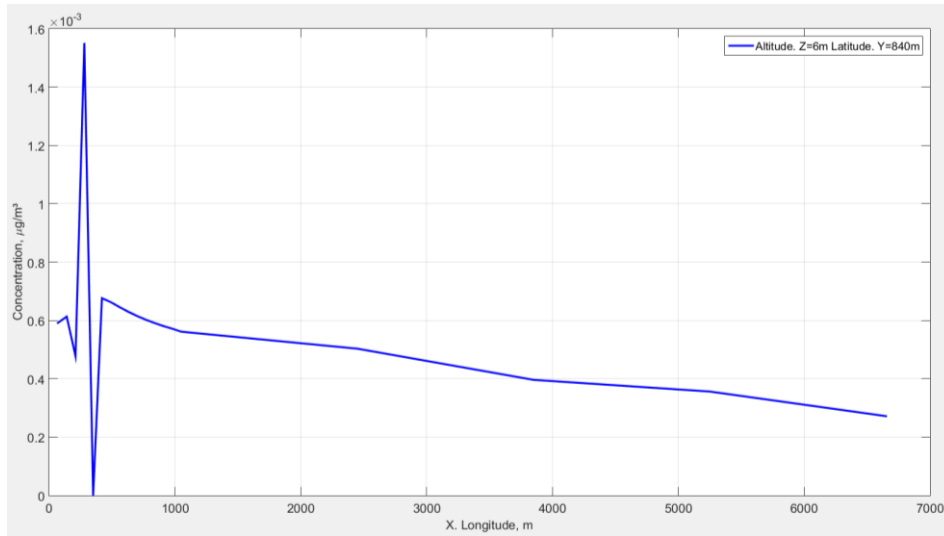


Figura 6.3.5. Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y del primer obstáculo a 250 m

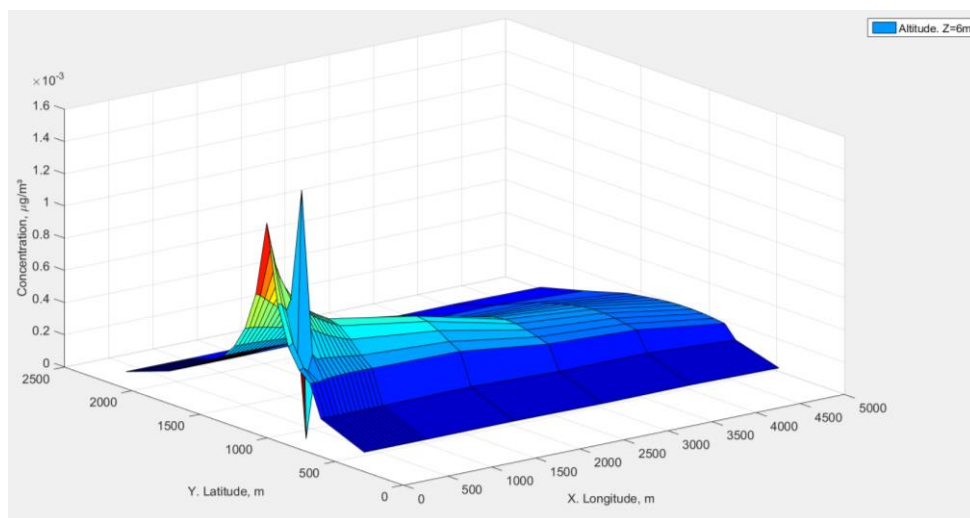


Figura 6.3.6. Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m del primer obstáculo a 250 m.

➤ Segundo experimento

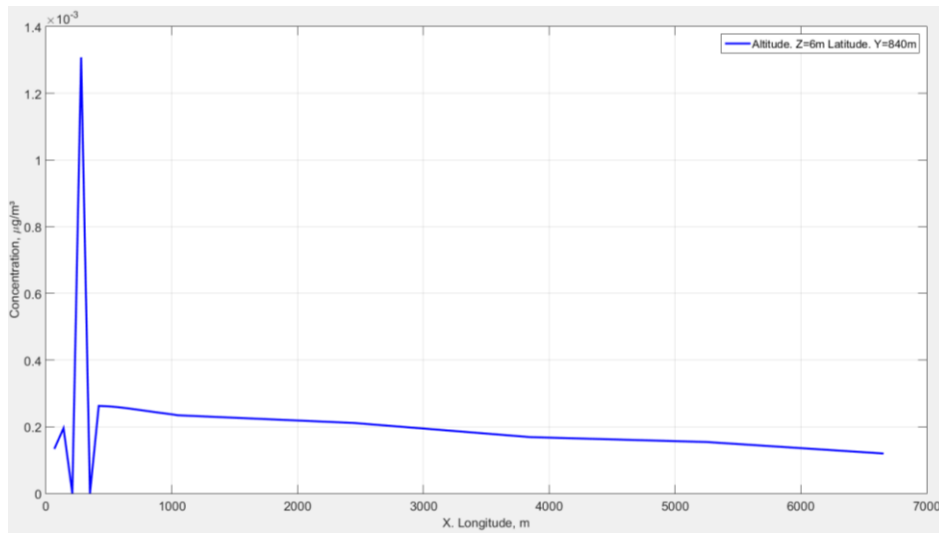


Figura 6.3.7. Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y del segundo obstáculo a 250 m

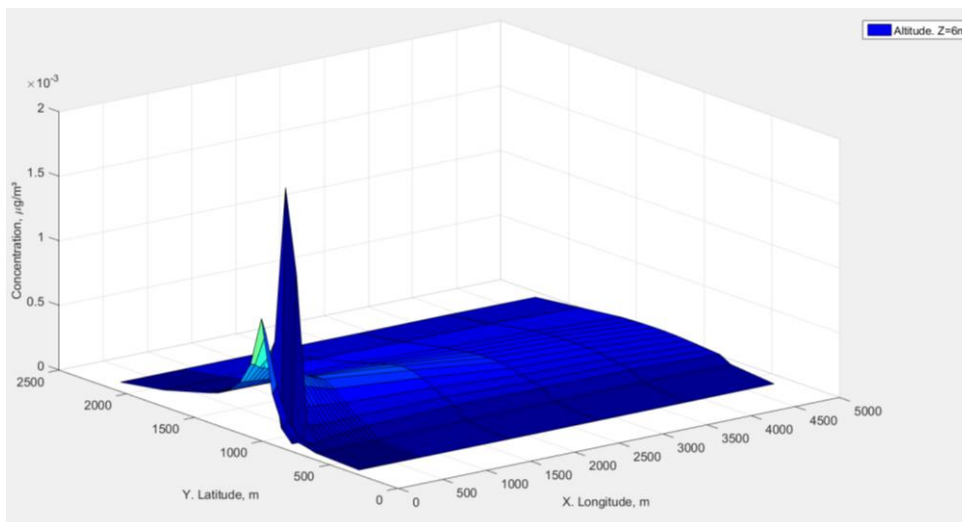


Figura 6.3.8 Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m del segundo obstáculo a 250 m.

- **350m**

- Primer experimento

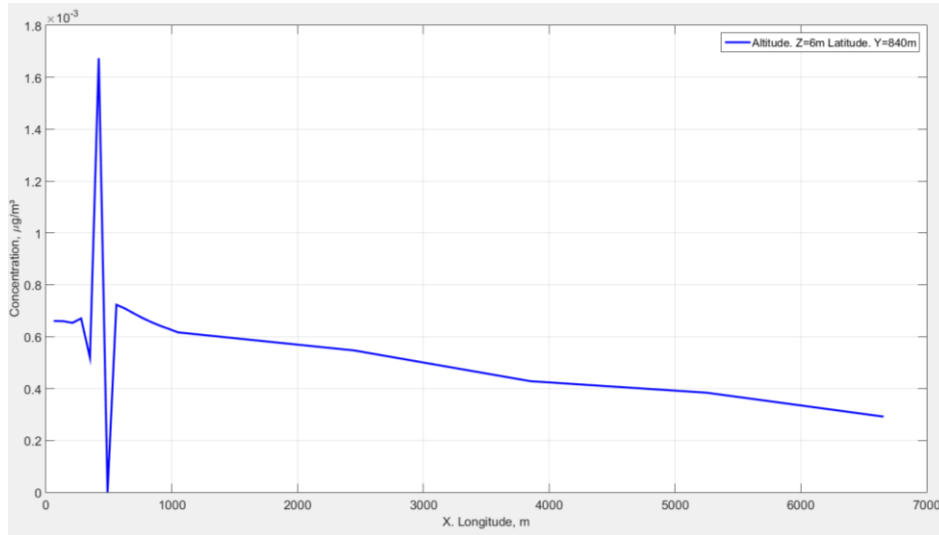


Figura 6.3.9 Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y del primer obstáculo a 350 m.

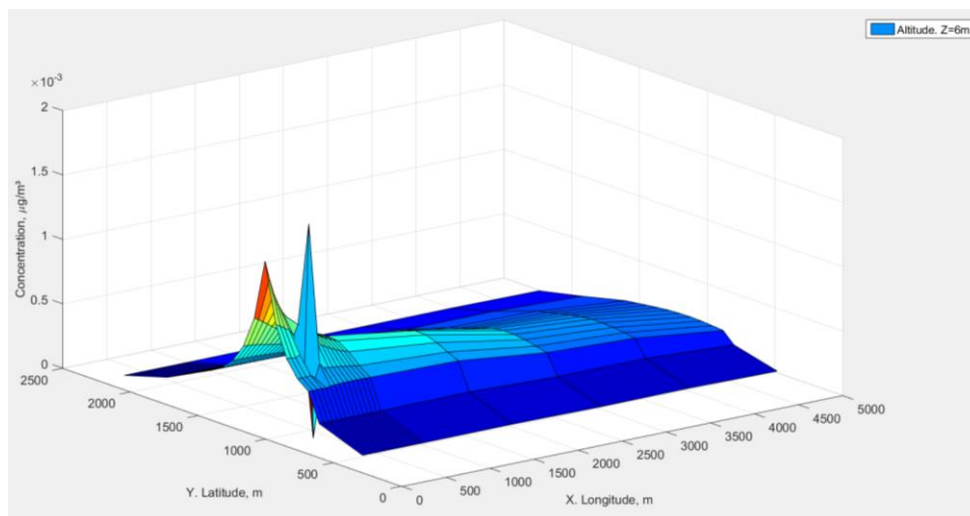


Figura 6.3.10. Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m del primer obstáculo a 350 m.

➤ Segundo experimento

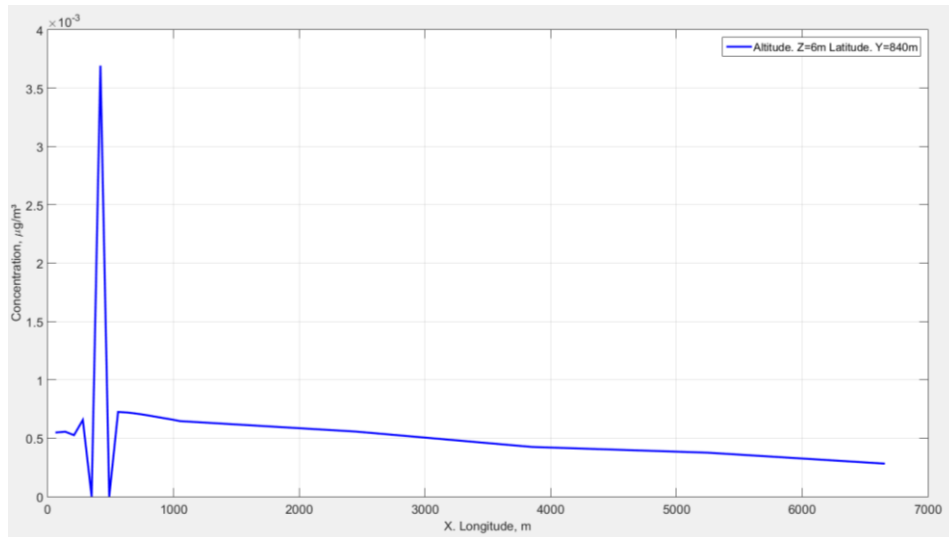


Figura 6.3.11. Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y del segundo obstáculo a 350 m.

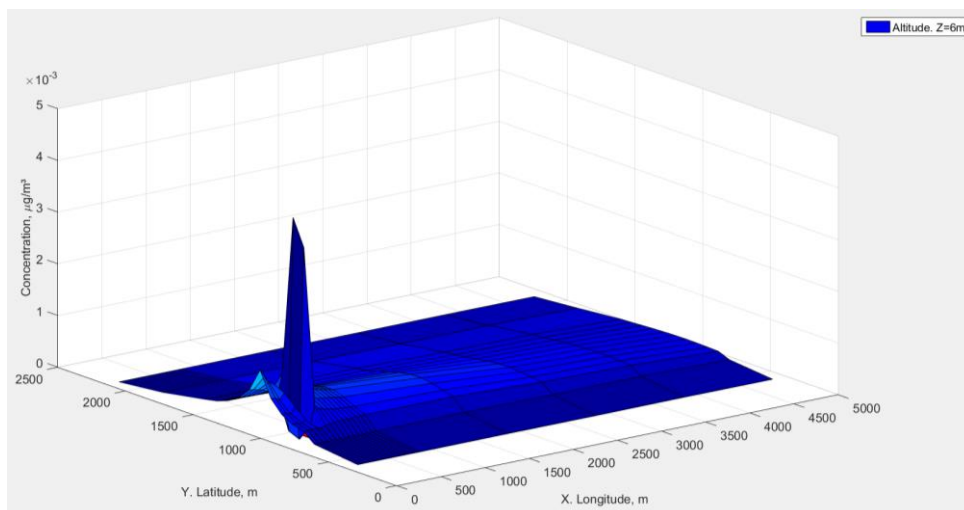


Figura 6.3.12. Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m del segundo obstáculo a 350 m.

- **550m**

- Primer experimento

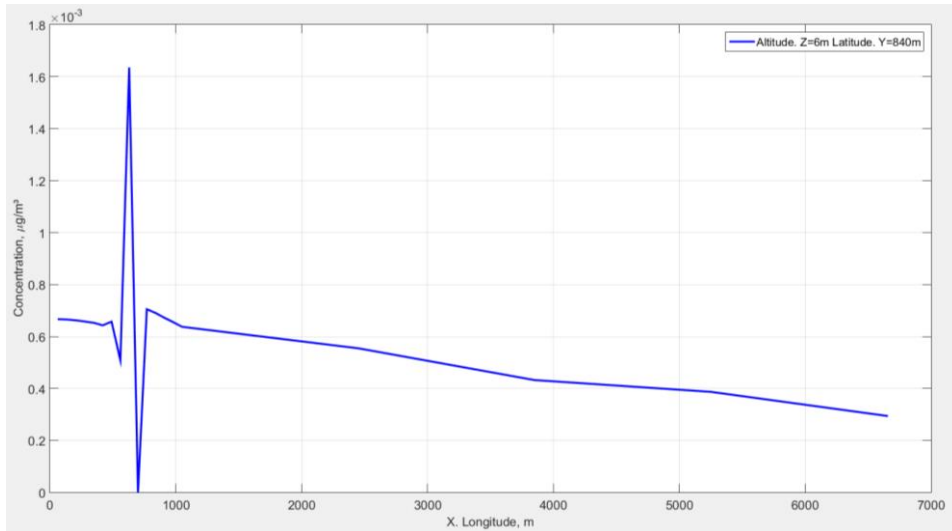


Figura 6.3.13. Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y del primer obstáculo a 550 m.

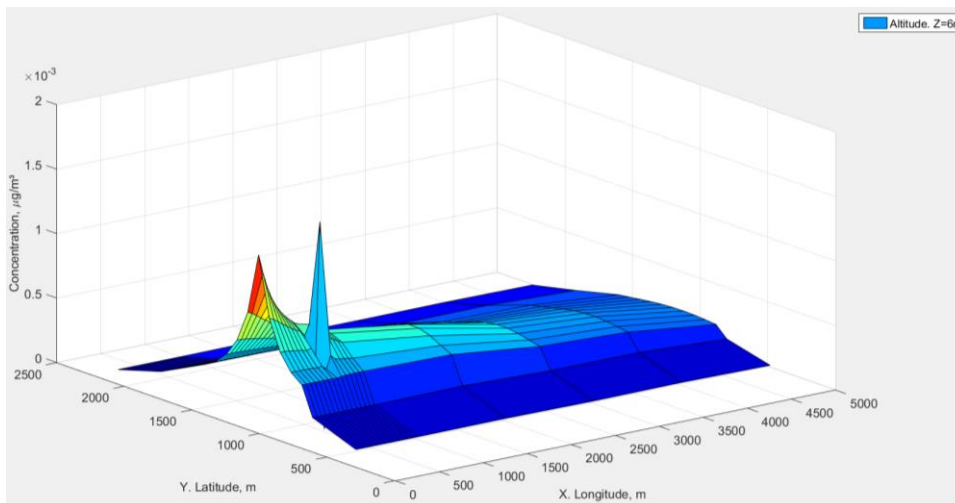


Figura 6.3.14. Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m del primer obstáculo a 550 m.

➤ Segundo experimento

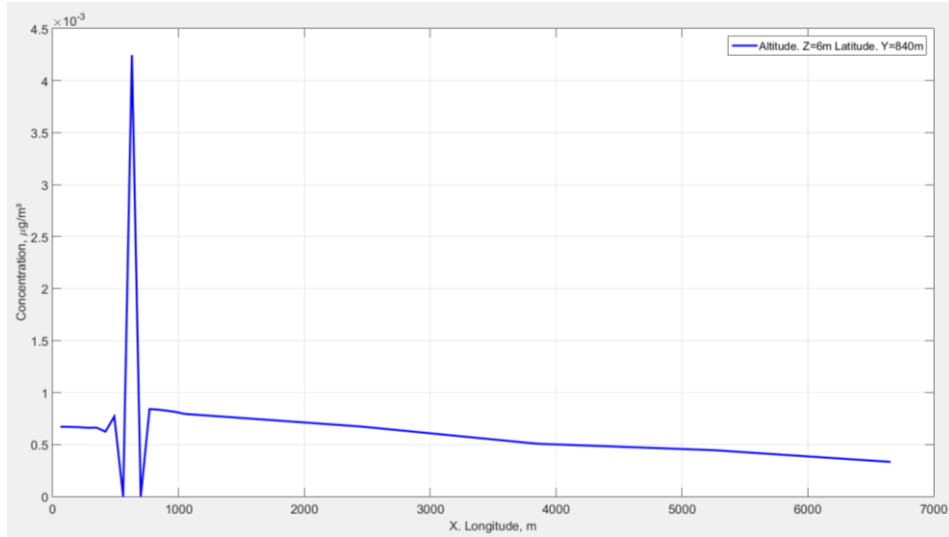


Figura 6.3.15. Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y del segundo obstáculo a 550 m.

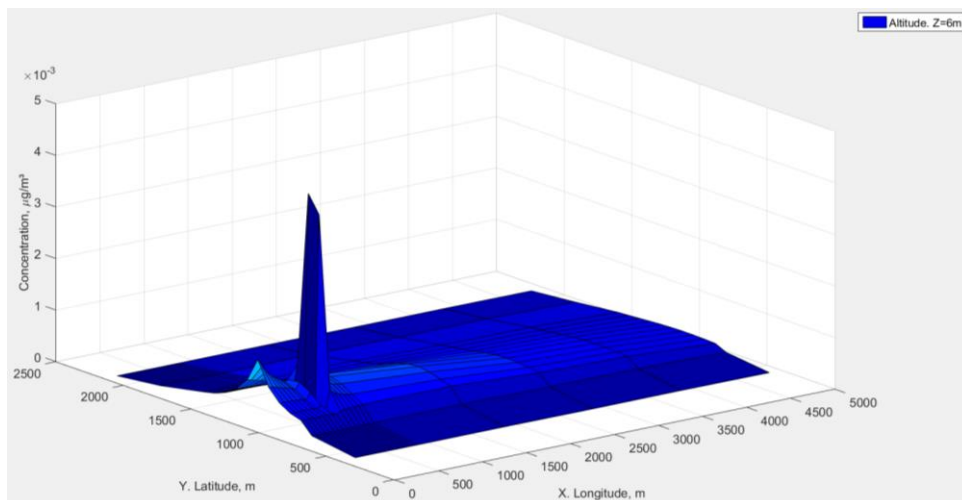


Figura 6.3.16. Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m del segundo obstáculo a 550 m.

- **650m**

- Primer experimento

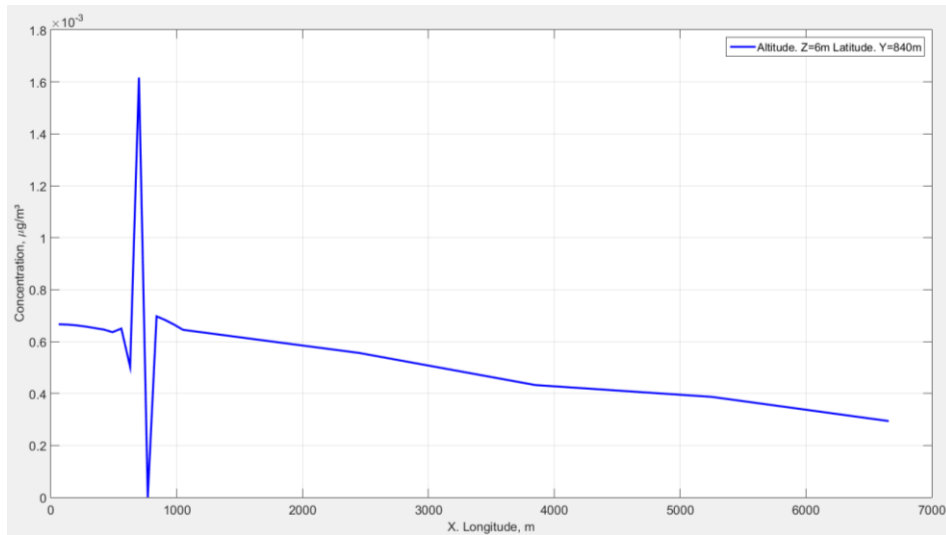


Figura 6.3.17. Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y del primer obstáculo a 650 m

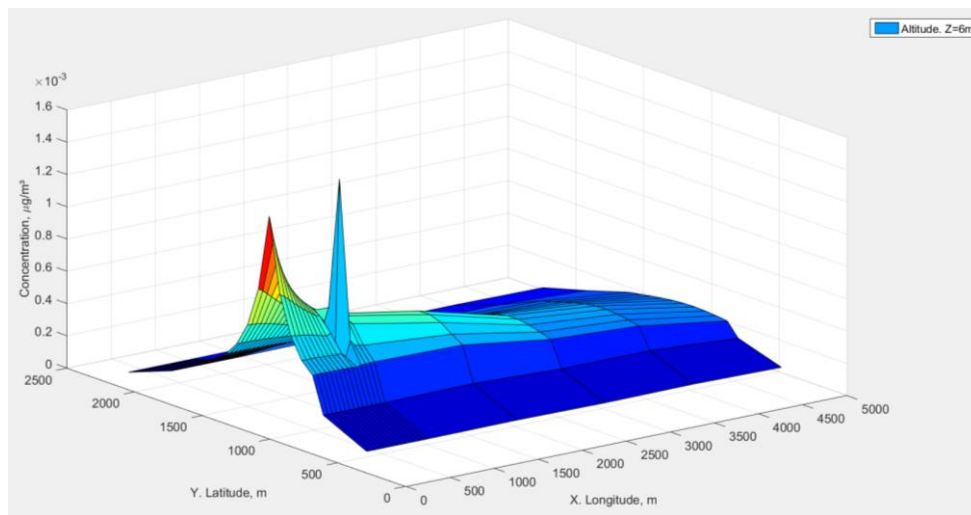


Figura 6.3.18. Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m del primer obstáculo a 650 m.

➤ Segundo experimento

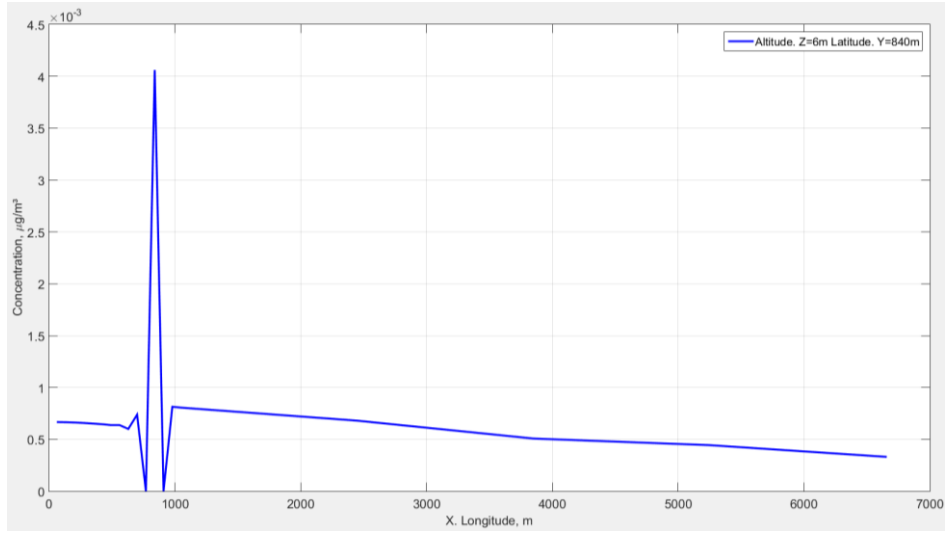


Figura 6.3.19. Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y del segundo obstáculo a 650 m.

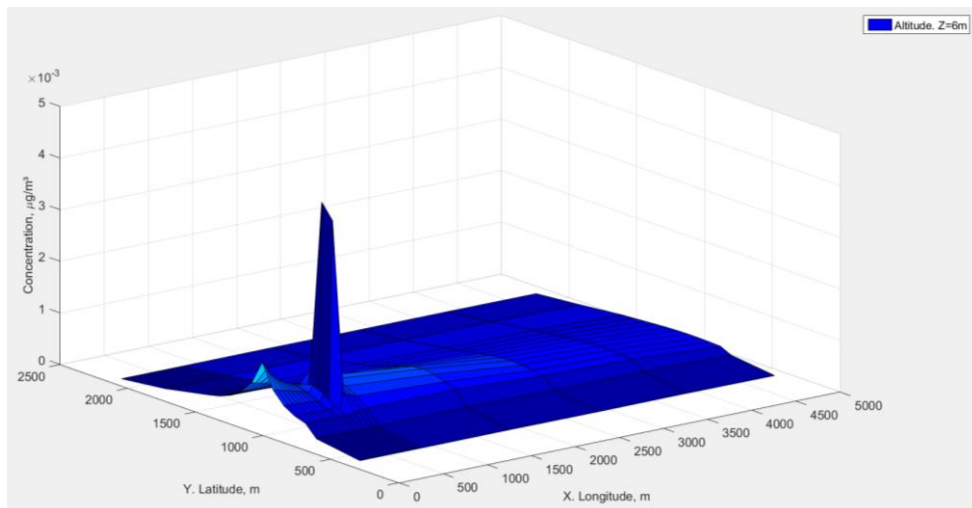


Figura 6.3.20. Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m del segundo obstáculo a 650 m.

Tablas

• **150m**

X	Y	Z	Concentracion
50	880	6	14,3469046
100	880	6	59,7179942
150	880	6	0
200	880	6	32,9924257
250	880	6	32,8198989
300	880	6	32,6090156
350	880	6	32,3943078
400	880	6	32,1781826
450	880	6	31,9582647
500	880	6	31,7335197
550	880	6	31,5037706
600	880	6	31,2713385
650	880	6	31,0324171
700	880	6	30,8066824
750	880	6	30,5196518
1750	880	6	28,5615881
2750	880	6	23,3420517
3750	880	6	21,4972151
4750	880	6	16,8369279

Tabla 6.3.1.Tabla de datos simulación primer obstáculo 150 m

X	Y	Z	Concentracion
50	880	6	0
100	880	6	85,1447662
150	880	6	0
200	880	6	7,76170114
250	880	6	7,19459335
300	880	6	6,05245837
350	880	6	4,53838163
400	880	6	2,94632873
450	880	6	1,56162236
500	880	6	0,603399836
550	880	6	0,199890142
600	880	6	0,380852904
650	880	6	1,11766516
700	880	6	2,19567188
750	880	6	3,93173659
1750	880	6	7,21724476
2750	880	6	6,08233465
3750	880	6	5,91692655
4750	880	6	4,89862098

Tabla 6.3.2.Tabla de datos simulación segundo obstáculo 150 m

CAPÍTULO 6: RESULTADOS

• **250m**

X	Y	Z	Concentracion($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
50	880	6	59,2152301
100	880	6	61,3435418
150	880	6	47,7727573
200	880	6	155,182083
250	880	6	0
300	880	6	67,6711433
350	880	6	66,3062039
400	880	6	64,6087309
450	880	6	62,9874644
500	880	6	61,5381961
550	880	6	60,2565936
600	880	6	59,1201199
650	880	6	58,087392
700	880	6	57,1908705
750	880	6	56,1780891
1750	880	6	50,351735
2750	880	6	39,6659851
3750	880	6	35,6623774
4750	880	6	27,2270515

Tabla 6.3.3.Tabla de datos simulación primer obstáculo 250 m

X	Y	Z	Concentracion($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
50	880	6	13,6123283
100	880	6	19,5624091
150	880	6	0
200	880	6	130,802964
250	880	6	0
300	880	6	26,2459186
350	880	6	26,1379124
400	880	6	25,9169329
450	880	6	25,6131132
500	880	6	25,2624683
550	880	6	24,8924901
600	880	6	24,5225321
650	880	6	24,1572451
700	880	6	23,8234637
750	880	6	23,4296842
1750	880	6	21,1198472
2750	880	6	16,884327
3750	880	6	15,4137048
4750	880	6	11,9819325

Tabla 6.3.4.Tabla de datos simulación segundo obstáculo 250 m

• **350m**

X	Y	Z	Concentracion($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
50	880	6	66,0159091
100	880	6	65,9507792
150	880	6	65,2925758
200	880	6	66,996968
250	880	6	51,889848
300	880	6	167,393205
350	880	6	0
400	880	6	72,3071594
450	880	6	70,7969736
500	880	6	68,9211704
550	880	6	67,1337828
600	880	6	65,5450725
650	880	6	64,1337486
700	880	6	62,9359046
750	880	6	61,6321661
1750	880	6	54,6659251
2750	880	6	42,8180295
3750	880	6	38,3763825
4750	880	6	29,1952603

Tabla 6.3.5.Tabla de datos simulación primer obstáculo 350 m

X	Y	Z	Concentracion($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
50	880	6	54,958634
100	880	6	55,6137262
150	880	6	52,6484802
200	880	6	65,6941471
250	880	6	0
300	880	6	369,283479
350	880	6	0
400	880	6	72,5328423
450	880	6	72,0823579
500	880	6	71,2280429
550	880	6	70,0969031
600	880	6	68,8262362
650	880	6	67,4904443
700	880	6	66,234555
750	880	6	64,7277103
1750	880	6	55,7288017
2750	880	6	42,5846385
3750	880	6	37,6268012
4750	880	6	28,3129113

Tabla 6.3.6.Tabla de datos simulación segundo obstáculo 350 m

CAPÍTULO 6: RESULTADOS

• **550 m**

X	Y	Z	Concentracion($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
50	880	6	66,6227914
100	880	6	66,4772658
150	880	6	66,1646681
200	880	6	65,7183375
250	880	6	65,1549153
300	880	6	64,6003706
350	880	6	63,5903302
400	880	6	64,9707448
450	880	6	50,1992262
500	880	6	161,646385
550	880	6	0
600	880	6	69,6984888
650	880	6	68,2264166
700	880	6	66,4781131
750	880	6	64,4883954
1750	880	6	55,5815006
2750	880	6	43,2181958
3750	880	6	38,6747791
4750	880	6	29,4019092

Figura 6.3.7. Tabla de datos simulación primer obstáculo 550 m

X	Y	Z	Concentracion($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
50	880	6	66,4777676
100	880	6	66,3360167
150	880	6	66,0144614
200	880	6	65,6079417
250	880	6	64,8922584
300	880	6	64,9801246
350	880	6	61,1699032
400	880	6	75,3591462
450	880	6	0
500	880	6	415,795692
550	880	6	0
600	880	6	82,4350798
650	880	6	81,8860969
700	880	6	80,9723444
750	880	6	79,3478257
1750	880	6	67,011979
2750	880	6	50,347806
3750	880	6	44,1655705
4750	880	6	33,0283419

Figura 6.3.8. Tabla de datos simulación segundo obstáculo 550 m

• **650 m**

X	Y	Z	Concentracion($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
50	880	6	66,6278471
100	880	6	66,4821141
150	880	6	66,1700996
200	880	6	65,7209775
250	880	6	65,1700234
300	880	6	64,5535243
350	880	6	63,8774191
400	880	6	63,2524838
450	880	6	62,2134051
500	880	6	63,5346178
550	880	6	49,0753383
600	880	6	158,057087
650	880	6	0
700	880	6	68,3343409
750	880	6	66,5192891
1750	880	6	56,0294847
2750	880	6	43,2865245
3750	880	6	38,6941968
4750	880	6	29,4091409

Figura 6.3.9. Tabla de datos simulación primer obstáculo 650 m

X	Y	Z	Concentracion($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
50	880	6	66,6102897
100	880	6	66,4648721
150	880	6	66,152199
200	880	6	65,7058927
250	880	6	65,1452185
300	880	6	64,5663916
350	880	6	63,7408261
400	880	6	63,7404902
450	880	6	59,9716957
500	880	6	73,7760561
550	880	6	0
600	880	6	406,065248
650	880	6	0
700	880	6	81,3892998
750	880	6	80,5049481
1750	880	6	67,9555893
2750	880	6	50,7150328
3750	880	6	44,3568221
4750	880	6	33,1180297

Figura 6.3.10. Tabla de datos simulación segundo obstáculo 650 m

6.4. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

En base a los resultados expuestos en las tablas y graficas anteriores se analizará el efecto de las dimensiones del obstáculo, el efecto de la distancia de separación entre el obstáculo y la chimenea y se analizara la reducción de la concentración que se produciría en una hipotética ciudad situada a 400 metros del foco emisor como consecuencia de la presencia del obstáculo.

6.4.1. Efecto de las dimensiones del obstáculo

En este apartado se analizará el efecto de las dimensiones del obstáculo produce en la dispersión de la nube de contaminante:

- Primer experimento: Fijándonos, por ejemplo, en los resultados obtenidos para el caso en el que el obstáculo se encuentra a 550 metros. Inicialmente se puede ver como el valor del nivel de concentración oscila entre 64-66 $\mu\text{g}/\text{m}^3$. También puede apreciarse como a 100 metros antes de llegar al obstáculo tiene lugar una reducción del nivel de concentración hasta alcanzar un valor de 50,19 $\mu\text{g}/\text{m}^3$. A partir de este punto y hasta llegar al obstáculo tiene lugar un incremento de la concentración, llegando a alcanzar un valor de 161,64 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ a 50 metros del mismo.

Finalmente, tras pasar el obstáculo vemos como el nivel de concentración vuelve al valor que tenía inicialmente para ir desapareciendo gradualmente con el tiempo.

- Segundo experimento: Para analizar este caso volvemos a tomar como ejemplo la simulación realizada cuando este segundo obstáculo se encuentra 550 metros. Inicialmente vemos como el valor de la concentración oscila entre 64-66 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, similar al del caso anterior. Sin embargo a 150 metros antes de llegar al obstáculo tiene lugar un pequeño aumento de la concentración hasta un valor de 75,35 $\mu\text{g}/\text{m}^3$. Después de producirse este incremento, vemos que para un punto situado a 100 metros por delante del obstáculo, el valor de la concentración se anula. Como ocurría en el caso anterior, después de este punto el valor de la concentración vuelve a incrementarse llegando a alcanzar a 50 metros antes de llegar al obstáculo un valor de 415,79 $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

Tras pasar el obstáculo, el valor de la concentración se va reduciendo lentamente hasta desaparecer.

Tras lo expuesto anteriormente, parece que el efecto que tienen las dimensiones del obstáculo es el de dispersar parte del contaminante hacia capas superiores de la atmósfera.

Este hecho puede explicarse basándonos en los fenómenos de difusión de contaminantes que se comentaron en el capítulo 3. En primer lugar, el efecto de la turbulencia que se genera al chocar la nube de contaminante contra las paredes del obstáculo genera una diferencia de presiones que tiene el efecto de hacer ascender la nube de contaminante. Conforme este gas va subiendo la presión se va igualando con la de la atmósfera y la velocidad a la que se propaga la nube va aumentando de manera que se ocasiona el desprendimiento de la capa límite y parte de la nube se dispersa. El resto de la nube que queda desciende por la parte de atrás del obstáculo con una concentración menor. A su vez, la vorticidad generada favorece el aumento de las concentraciones en los puntos situados alrededor del obstáculo.

También es posible que como consecuencia del choque del gas contra la pared se produzca algún fenómeno de reflexión, que como se comentó en su momento, tiene el efecto de aumentar la concentración del contaminante en el punto donde se produce el mismo, siendo la concentración en ese punto la suma de la concentración que llega con la que rebota en la pared del obstáculo.

Por último mencionar que las condiciones ambientales en las que nos encontremos, es decir, el grado de estabilidad atmosférica, también tendrían un efecto importante en la concentración del contaminante pudiendo producirse inversiones o cualquier otro fenómeno relacionado con la estabilidad atmosférica los cuales se comentaron en capítulos anteriores.

6.4.2. Efecto de la distancia de separación entre el obstáculo y la chimenea.

Los resultados antes obtenidos nos servirán también para estudiar la influencia que tiene en la concentración la distancia de separación entre el obstáculo y la chimenea. Para ello escogemos un punto situado a 750 metros del foco de emisión y se analizara el valor de la concentración que obtenemos en este punto para las diferentes posiciones en las que se coloca el obstáculo en los experimentos.

Cogiendo por tanto, de cada una de las tablas anteriores, los valores de concentración correspondientes a la posición de 750 metros y representándolas gráficamente se obtiene:

➤ **Primer experimento:**

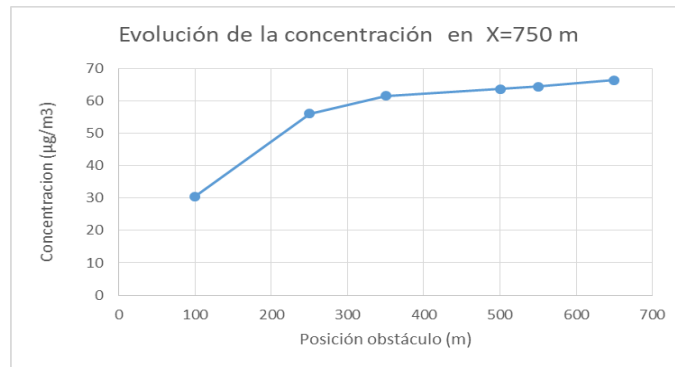


Figura 6.4.1 Representación de la evolución de la concentración en una determinada posición X=750m para diferentes posiciones del primer obstáculo

➤ **Segundo experimento:**

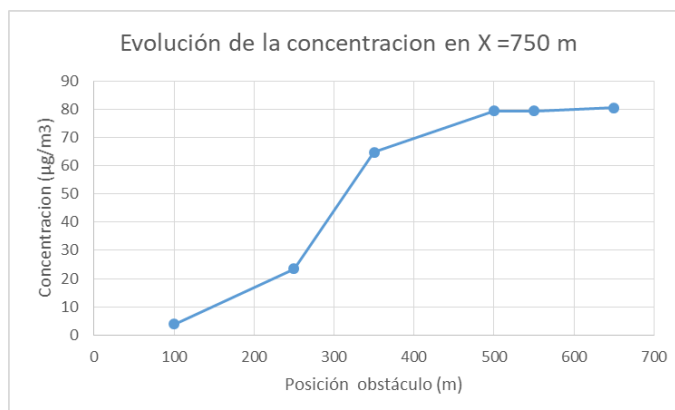


Figura 6.4.2 Representación de la evolución de la concentración en una determinada posición X=750m para diferentes posiciones del segundo obstáculo.

En ambos casos se puede observar cómo a medida que se va separando el obstáculo la concentración va aumentando en este punto. Esto indica que

cuanto menor es la separación existente entre el obstáculo y la chimenea menor es la concentración que se tiene en los puntos situados por detrás del obstáculo.

Por otro lado, también se observa que en función de lo grande que sea esta separación, las dimensiones del obstáculo influirán de la siguiente manera:

- Si la separación entre el obstáculo y la chimenea es menor de 500 metros entonces las dimensiones del obstáculo influyen en las concentraciones de los puntos situados detrás de él. Estas concentraciones serán menores cuanto más grandes sean las dimensiones del obstáculo.
- Si la separación del obstáculo y la chimenea es mayor de 500 metros entonces las dimensiones del obstáculo dejan de influir en las concentraciones de los puntos situados detrás de él.

En definitiva, si lo que queremos es obtener la mayor reducción de concentración en una determinada región debemos procurar que el obstáculo sea lo más grande posible y este situado lo más cerca posible al foco de emisión.

6.4.3 Aplicación del estudio para disminuir la concentración en una ciudad situada 400 metros del foco de emisión.

Para terminar analizaremos los efectos que tiene la presencia del obstáculo sobre una hipotética ciudad situada a 400 metros del foco emisor. Para ello simularemos en primer lugar que concentración se tiene en este punto cuando no hay obstáculos y compararemos este resultado con los obtenidos en los experimentos para ver en cuanto se consigue reducir la concentración.

La evolución de la concentración con la distancia cuando no se tiene obstáculos es la siguiente:

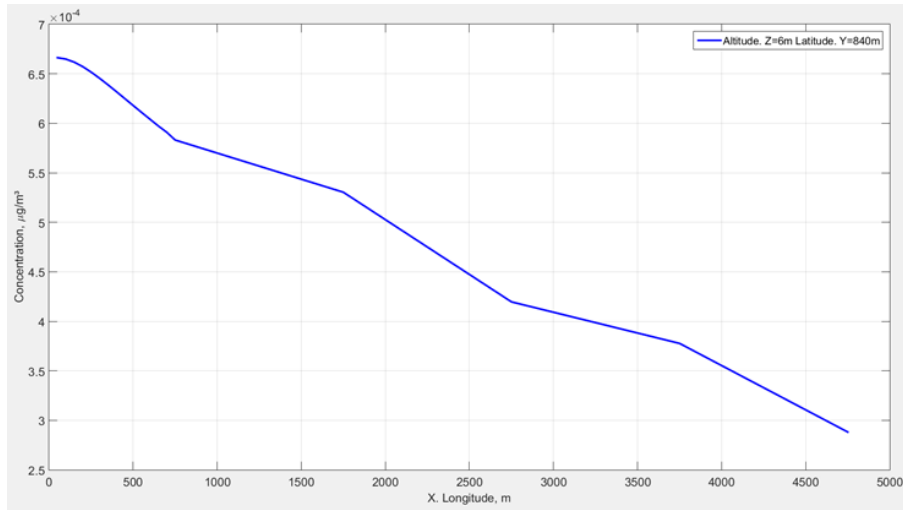


Figura 6.4.3. Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y

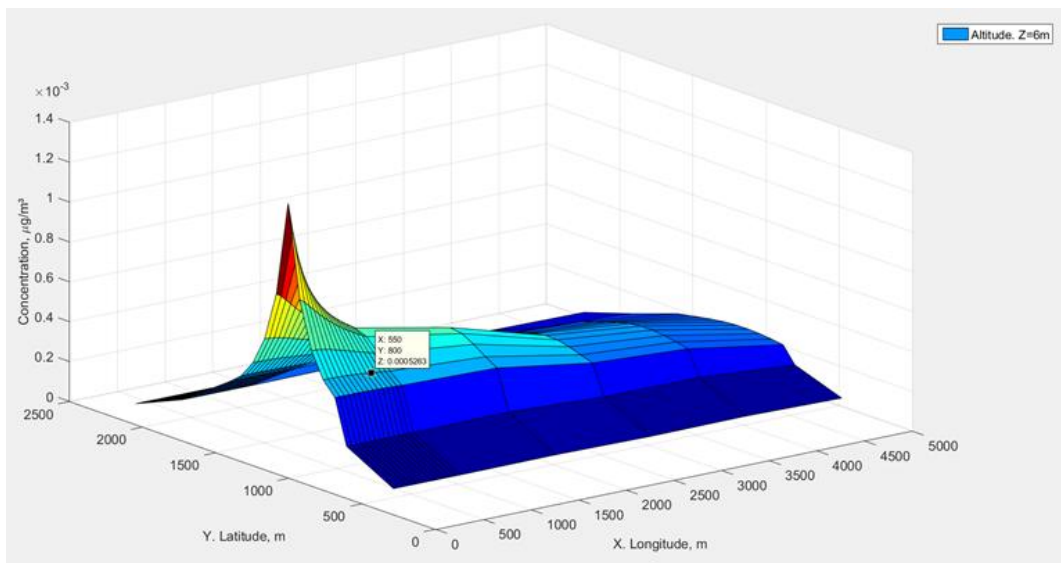


Figura 6.4.4. Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m

Y la tabla que representa la evolución de la concentración a lo largo de la coordenada X es:

X	Y	Z	Concentracion($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
50	880	6	66,6284777
100	880	6	66,4827282
150	880	6	66,1707522
200	880	6	65,7214584
250	880	6	65,1711646
300	880	6	64,5518234
350	880	6	63,8886134
400	880	6	63,200372
450	880	6	62,5005226
500	880	6	61,7988117
550	880	6	61,1005035
600	880	6	60,4133794
650	880	6	59,7268522
700	880	6	59,0916697
750	880	6	58,3083975
1750	880	6	53,0366866
2750	880	6	41,9634434
3750	880	6	37,7672985
4750	880	6	28,8186188

Tabla 6.4.1. Tabla de datos simulación

Como puede verse, la evolución de la concentración varía muy lentamente con la distancia y aunque fijándonos en la gráfica parece decrecer de manera lineal, la realización de una recta de regresión en Excel nos indica que este decrecimiento se corresponde mejor con una función exponencial

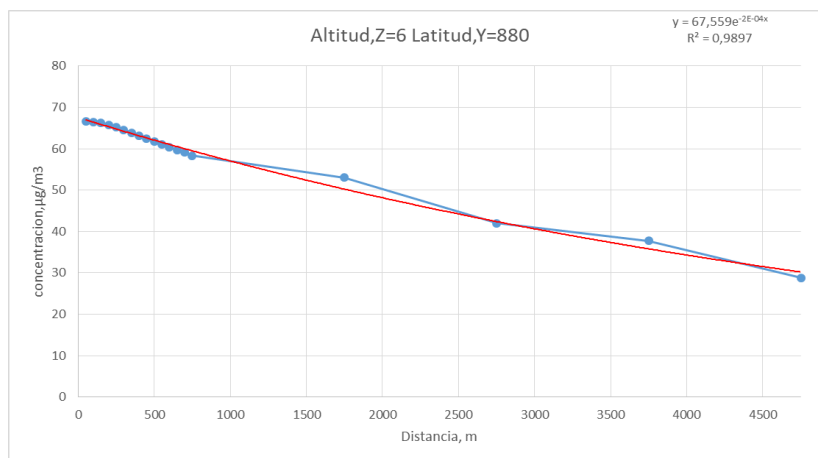


Figura 6.4.5. Representación 2D de X en una posición fija de Z e Y en Excel

Siendo esta función del tipo:

$$y = 67,559e^{-2 \cdot 10^{-4}x} \quad (6.4.1)$$

Lo que no resulta raro ya que la función de distribución gaussiana en las que están basadas los modelos de dispersión no deja de ser una función exponencial.

Por otro lado, según lo visto, disponemos de dos opciones para reducir el nivel de concentración en la ciudad situada a 400 m. La primera consiste en situar el obstáculo lo más cerca posible de la chimenea. La segunda consistiría en situar el obstáculo a una distancia de 100 metros por detrás de la ciudad. Sin embargo esta segunda opción carece de sentido desde el punto de vista práctico pues normalmente no solo interesa reducir la concentración en un punto sino también en un área más amplia.

A continuación se obtendrá la reducción en la concentración que se obtiene al colocar el obstáculo a 150 metros de la chimenea:

- Obstáculo a 150 m:

- Primer experimento: Si nos vamos a la tabla, el valor de la concentración a 400 metros es de 32,17 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ mientras que el mismo valor en el caso de no haber obstáculo sería de 63,2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, por lo tanto:

$$\Delta\text{Concentracion de } SO_2(\%) = \frac{63,2 - 32,17}{63,2} \cdot 100 = 49,09\% \quad (6.4.2)$$

- Segundo experimento: En el caso de este segundo obstáculo el valor de la concentración a 400 metros es de 2,94 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, obteniendo:

$$\Delta\text{Concentracion de } SO_2(\%) = \frac{63,2 - 2,94}{63,2} \cdot 100 = 95,34\% \quad (6.4.3)$$

Se puede observar que la presencia del obstáculo del primer experimento contribuye a reducir la concentración casi a la mitad y que en el caso del segundo experimento se consigue reducir la concentración casi por completo.

CAPÍTULO 7

CONCLUSIONES

CAPÍTULO 7

CONCLUSIONES

7.1 CONCLUSIONES

Tras el análisis de los resultados se ha concluido que efectivamente, las dimensiones del objeto y la distancia de separación entre la fuente de emisión y el obstáculo son factores que hay que tener en cuenta a la hora de estudiar la concentración en una determinada zona.

En cuanto a las dimensiones del obstáculo, en el capítulo 3 se nos mostraba tanto en la figura 3.3.7 como en la figura 3.3.8 que se formaban remolinos cerca de las paredes del obstáculo y que además la vorticidad de ellos tendía a aumentar la concentración en estos puntos. Por otra parte, También se comentó que si el obstáculo era más pequeño que la fuente de emisión las concentraciones se incrementaban por detrás del obstáculo.

En este estudio se ha trabajado en cambio con obstáculos cuyas dimensiones son iguales o superiores a los de la chimenea obteniéndose justo lo contrario. La concentración en este caso tiende a elevarse a unos metros justo por delante del obstáculo. Sin embargo, se observó que en todas las simulaciones se producía un descenso de la concentración a una distancia de 100 metros por delante del obstáculo. Llegando esta concentración a anularse si las dimensiones del obstáculo eran lo suficientemente grandes. En la figura 7.1 se puede apreciar mejor esto que se acaba de explicar.

Por otro lado, en cuanto a la distancia de separación entre el obstáculo y la fuente de emisiones se observó que cuando el obstáculo se encuentra lo suficientemente cerca del foco de emisión, este tiene el efecto de dispersar el contaminante reduciéndose de forma considerable el nivel de concentración de las zonas situadas detrás del mismo. El valor de esta reducción va incrementándose conforme se aumentan las dimensiones del obstáculo.

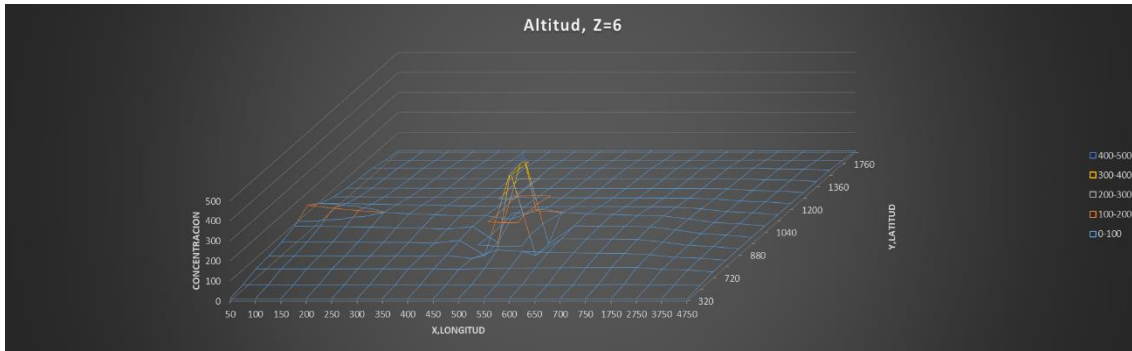


Figura 7.1. Representación 3D de XZ en una posición fija de Z=6m en Excel del segundo obstáculo a 500 m

También se observó que cuanto más alejado se encuentra el obstáculo, las dimensiones del mismo dejan de tener influencia en la concentración de SO_2 en puntos situados por detrás de él.

Finalmente, se llegó a la conclusión de que si se quiere reducir la concentración de contaminante en una determinada región se debe tener en cuenta de forma conjunta ambos factores. En concreto, en este estudio se consiguió reducir la concentración en una ciudad situada a 400 metros de la fuente de emisión en un 95,34 % colocando un obstáculo de dimensiones 40 x 80 x 18 metros a una distancia de 150 metros del foco de emisión.

Se ha podido por tanto cumplir con el objetivo de estudiar cual es el efecto de los obstáculos en la dispersión de contaminantes y se ha podido comprobar como los resultados obtenidos en las simulaciones realizadas guardan relación con lo teóricamente expuesto quedando demostrada la eficiencia del método de simulación por redes para la predicción de la dispersión de contaminantes y por tanto la fiabilidad del estudio.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA

- Prandtl L(1933). *Fecent results of turbulence research Tech.Mem.NACA 720*
- Winnacker, K. y Weingaertner.E. (1954). *Tecnología química: Tomo II Química industrial inorgánica*. Barcelona: Gustavo Gili S.A.650p
- Hutchinson, E. (1960). *Química los elementos y sus reacciones. Barcelona: Reverté S.A. 676-701*.ISBN 84-291-7270-X
- H.F.Liu, D. y G.Lipták, B. (2000). *Air Pollution*.Washington.D.C.:CRC Press.256p. ISBN 1-56670-513-4
- Wayne T, D. (2000). *Air Pollution Engineering Manual* .Universidad de Tennessee: Wiley-Interscience.912p.ISBN 0-471-33333-6
- Wark, K. y F. Warner, C. (2005). *Contaminación del aire: Origen y control*. Universidad de Purdue: Limusa.637p.ISBN 968-18-1954-3
- Madrid García C.N. y Navarro Andreu J.R. (2004). *Transmisión del calor*. Universidad politécnica de Cartagena: Horacio Escarabajal Editores. 224p
- Albert Cotton, F. y Geoffrey Wilkinson, F.R.S.(1969). *Química inorganica avanzada*. Instituto tecnológico de Massachusetts:Limusa-Wiley S.A. 1161p
- Viedma Robles A. (2016). *Apuntes de ingeniería de fluidos*. Universidad politécnica de Cartagena: Horacio Escarabajal Editores.
- Viedma Robles A. (2014). *Apuntes de mecánica de fluido*. Universidad politécnica de Cartagena: Horacio Escarabajal Editores.
- ALHAMA LOPEZ, F. *Simulación y diseño de problemas de conducción térmica con PROCCA- 09*[en línea]. Universidad de Murcia, 2010. [Consultado noviembre 2018]. Disponible en:<https://books.google.es/books?id=SsUAPJPSLn0C&pg=PA7&lpg=PA7&dq=MESIR+Metodo+de+simulacion+por+rede&source=bl&ots=uzRzpPWSJb&sig=sGyBNOGRZdvhvwPGLTxLo4xoWRY&hl=es&sa=X&ved=2ahUKEwjA29qKiv eAhWkJsAKHcHMC7QQ6AEwCXoECAoQAQ>

Irene Lizarán .*Modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos* [en línea] [fecha de consulta: noviembre 2018]. Disponible en:<https://www.studocu.com/es/u/2414499>

Chris Rumsey. *Turbulence Modeling Resource* [en línea] [fecha de consulta: noviembre 2018]. Disponible en: <https://turbmodels.larc.nasa.gov/index.html>

Modelo Gaussiano de dispersión de contaminantes [En línea].En: YouTube, presentado y dirigido por López Jiménez Petra Amparo, 28 noviembre 2011. Universidad politécnica de valencia. [Fecha de consulta: noviembre 2018]. Disponible en: <https://www.youtube.com/watch?v=MNVdW0mO3LE>

S.M. Santa Cruz, A. *Difusión de contaminantes gaseosos en la atmosfera* [en línea] [fecha de consulta: noviembre 2018]. Disponible en: https://www.frro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/quimica/5_anio/orientadora2/apuntes_catedra/Estabilidad%20Atmosfrica.pdf

Sánchez Pérez J.F.*Solución numérica de problemas de oxidación el método de simulación por redes* [En línea].Tesis doctoral. Universidad politécnica de Cartagena, 2012. [Fecha de consulta: noviembre 2018]. Disponible en: <http://repositorio.upct.es/bitstream/handle/10317/3395/jfsp.pdf?sequence=1>

Velázquez Jiménez.Minas de Riotinto.2017.[imagen en línea]Disponible en: <https://cursosfotografiamadridlamaquina.com/blog/antonio-vazquez-jimenez-publica-su-libro-la-huelva-minera-diez-itinerarios-para-conocerla/>

Politrópicas del azufre.2014 [Imagen digital en línea].Disponible en : <https://www.mitask.com/blogs/phase-transformation-and-purity-determination-of-sulfur-in-controlled-atmosphere-using-tga-dta-dsc/>

Datos Factores de emisión implícitos.2014 [Imagen digital en línea].Disponible en: https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/sistema-espanol-de-inventario-sei-/040401-produccion-so4h_tcm30-429855.pdf