

8 Modelización de la calidad del aire.

La modelización es una herramienta fundamental en los estudios ambientales. Los modelos de dispersión de la contaminación atmosférica se vienen utilizando tanto con carácter pronóstico, en las redes de alerta de la contaminación atmosférica, como para obtener datos objetivos que permitan tomar decisiones sobre aspectos técnicos y de gestión, como pueden ser cálculo de la altura de las chimeneas, localización adecuada de focos de emisión con la consiguiente minimización de impactos, diseño de redes de medida, autorización de nuevos focos de vertido, etc. Uno de los aspectos que limita la utilización de este tipo de herramientas es el hecho de no disponer de datos de calidad del aire con un grado de compartimentación que permita la adecuada calibración y validación de los modelos. Las redes de tierra ofrecen datos que son insuficientes para el desarrollo de modelos de calidad del aire, por lo que hay que introducir simplificaciones que necesariamente hacen que los modelos no se ajusten a la realidad cuando la situación ambiental difiere de la simplificación aceptada. Para mejorar estos hechos se requieren datos de los contaminantes en la columna de aire, en este sentido la tecnología LIDAR es de elección, ya que permite obtener un valor de concentración con una resolución aproximada de 9 m, por lo que se pueden validar y calibrar modelos más complejos con mayor precisión.

Como hemos visto en los resultados obtenidos, mediante la técnica LIDAR es posible obtener medidas de concentración de contaminantes en dos dimensiones. Esto nos permite conocer la evolución y dinámica de los componentes presentes en la atmósfera. Existen numerosos modelos para determinar la situación y concentración de contaminantes en la atmósfera. Mediante la técnica LIDAR podemos medir distintos contaminantes: ozono, óxidos de nitrógeno etc. Cada uno de estos contaminantes requiere un modelo de dispersión atmosférica propio ya que cada componente cuenta con unas características determinadas: focos de producción, reacciones de descomposición, interacciones con el medio, etc.

Una de las importantes aplicaciones de la modelización se centra en el desarrollo de modelos de evolución de la concentración de contaminantes, modelos que pueden tener carácter normativo ya que la Directiva 96/62/CE del Consejo de 27 de septiembre de 1996 sobre evaluación y gestión de la calidad del aire ambiente prevé la modelización como técnica de evaluación de la calidad del aire en determinadas condiciones. Así mismo, en la transposición a derecho interno de la directiva 2002/3/CE de 12 de febrero se cita la modelización como metodología para señalar los lugares en los que se estime se puedan

superar los límites establecidos, cuando no se cuenta con datos reales suficientes (menos de 5 años). Siendo esta metodología importante para poder desarrollar mapas de ozono que abarquen la totalidad del territorio.

8.1 Modelos de la concentración de ozono presente en la atmósfera.

Se han desarrollado diferentes modelos aplicables a la evolución de las concentraciones de ozono en la atmósfera, entre los más utilizados podemos señalar:

8.1.1 Modelo de caja.

Se trata de un modelo simple, mediante el cual obtenemos una estimación inicial de la concentración. Su base es el principio de conservación de la masa de un contaminante en una caja. Tomamos como referencia un marco fijo (enfoque euleriano). En este caso la caja representa el barrido efectuado por el LIDAR con una profundidad de 100 metros.

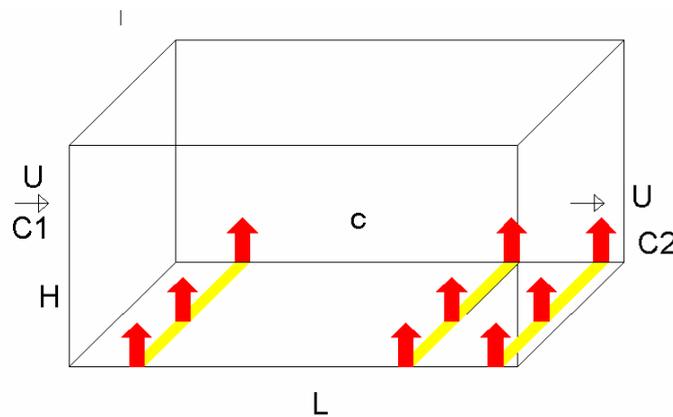


Fig. 1

Como vemos tenemos tres focos contaminantes correspondientes a tres carreteras. El modelo supone que el viento entra en el volumen de control a una velocidad U , y con una concentración C_1 , y sale del volumen de control a una velocidad U y una concentración C_2 .

Las dimensiones de la caja son $L \times H \times y$.

Además asumiremos que los contaminantes son conservativos.

Haciendo un balance de materia dentro del volumen tenemos:

Tasa de variación de contaminación en la caja = Tasa de contaminación entrante - Tasa de contaminación saliente + Tasa de generación/pérdida de la contaminación

Expresándolo en forma de ecuación diferencial:

$$\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \frac{\partial C}{\partial t} = \Delta x \cdot \Delta y \cdot q_s + \Delta y \cdot \Delta z \cdot U(C1 - C2) + \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot r_g \quad (1)$$

Donde q_s es la generación de contaminantes por parte de la carretera.

Como vemos, este modelo nos da una distribución uniforme de contaminantes en el volumen estudiado. No tiene en cuenta que los contaminantes no proceden de una fuente uniforme, ni los movimientos dentro del volumen de control debidas a la gravedad.

Podemos decir que este modelo no nos va a proporcionar información realista y podemos demostrarlo con los datos obtenidos con el LIDAR, en los que claramente vemos que la distribución de ozono no sigue lo dictado por el modelo de caja.

8.1.2 Modelo de cajas.

Como su nombre indica, estos modelos suponen una mejora del modelo de caja visto anteriormente. Toman como hipótesis que dentro de cada caja se produce una distribución homogénea de contaminantes. Este análisis se lleva a cabo subdividiendo el volumen estudiado y estableciendo unas condiciones de contorno para cada subcaja.

Este método se aproxima más a la realidad, ya que no supone una concentración homogénea de todo el conjunto. Además permite afinar el resultado disminuyendo el tamaño de caja. En este modelo es posible tener en cuenta los movimientos vistos en los análisis de datos. Podemos decir que este modelo se acercará a la realidad en cuanto las condiciones de contorno estén correctamente determinadas y la subdivisión sea suficiente.

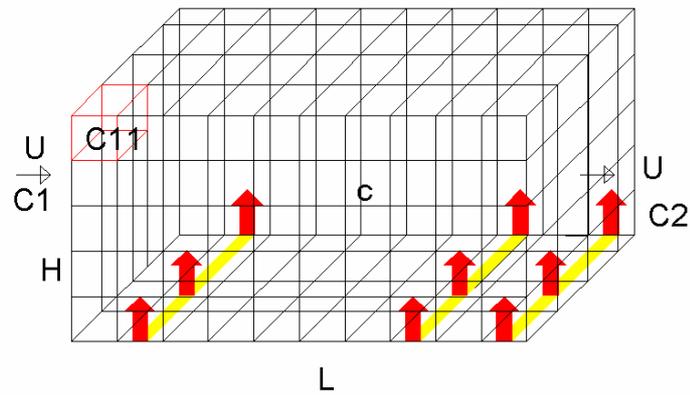


Fig. 2

8.1.3 Modelos fotoquímicos.

La contaminación fotoquímica del aire se forma como resultado de complejas reacciones entre la luz solar, la meteorología y las emisiones básicas de óxidos de nitrógeno e hidrocarburos reactivos. Los modelos fotoquímicos se utilizan en áreas urbanas. Estos modelos tienen en cuenta las reacciones químicas, incluyendo la caída y deposiciones químicas. Este modelo proporciona mayor fidelidad que los modelos de cajas vistas, ya que amplía el estudio a contaminantes no conservativos y productos fotoquímicos. En nuestro caso esto es muy importante, ya que el estudio se centra en el ozono, que como ya hemos visto depende de la radiación solar. (Kiely, 2001)

La difusión atmosférica tiene la siguiente expresión:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{u} \cdot C_i) = -\nabla \cdot \bar{q}_i + R_i + S_i \quad (2)$$

donde:

C_i = concentración en tiempo promediado de la especie química i .

\bar{u} = velocidad vectorial del aire.

R_i = tasa de producción o caída químicas de la especie j .

S_i = Tasa de emisión de la especie i desde las fuentes.

\bar{q} = flujo de masa de la especie i debido a la difusión en remolino

$i = n^\circ$ de especies químicas independientes.

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$$

Este modelo se aplica subdividiendo el espacio estudiado en cuadrículas tal como se vio en el modelo de cajas.

Podemos decir que este modelo será el que más se aproxime a la concentración real obtenida mediante el LIDAR.

8.2 Aplicación de la técnica LIDAR a la modelización atmosférica.

Hay tres pasos fundamentales en el procedimiento utilizado para modelizar un sistema, en este caso un atmosférico. Estas fases son:

- Calibración: Consiste en buscar la relación más adecuada entre los datos observados y los datos obtenidos, mediante la variación de parámetros. Esto puede llevarse a cabo mediante ensayo prueba-error o utilizando aplicaciones informáticas. Algunos modelos no requieren esta fase debido a su simplicidad, sin embargo los modelos atmosféricos resultan complicados debido a los numerosos parámetros que intervienen.
- Verificación: En esta fase se comprueba el funcionamiento del modelo. Si responde como esperamos, si es estable a lo largo del tiempo, si cumple los requerimientos impuestos, etc. En definitiva, estudia el comportamiento del modelo diseñado.
- Validación: Esta fase consiste en probar el funcionamiento del modelo cuando cambian las condiciones del problema. Se estudia la diferencia entre los datos obtenidos del modelo y la realidad, es también importante centrarse en variables que alcancen cotas máximas y mínimas para ver como se comporta ante circunstancias extremas.

Como vemos, la modelización, además del estudio de variables, parámetros, reacciones químicas, etc. necesita conocer el comportamiento real para poder comprobar la validez del modelo.

Mediante el LIDAR podemos obtener la distribución espacial de las concentraciones de los contaminantes en la atmósfera, además las medidas se realizan en largos periodos de tiempo, por lo que podemos observar la evolución de contaminantes a través del tiempo. Estos datos serán de utilidad para calibrar y validar modelos atmosféricos.

8.2.1 Calibración de modelos.

Muchos parámetros utilizados en el estudio de la atmósfera no son conocidos de manera exacta, de manera que hay que recurrir a la literatura o a estimaciones. Estos parámetros pueden ser estimados cuando el número de estos presentes en el modelo no es muy alto, y en cualquier caso introducirá errores en el modelo final. Mediante los datos obtenidos con el LIDAR podemos obtener una mayor precisión en la selección de parámetros, ya que contamos con la evolución real de los contaminantes en la atmósfera con el tiempo.

8.2.2 Verificación y validación.

Es esta fase donde mayor utilidad tiene la utilización de la técnica LIDAR. Hasta ahora, era imposible conocer la distribución real de los componentes de la atmósfera. Ningún sistema ofrecía la posibilidad de obtener barridos de concentración con los que verificar y validar modelos. Las posibilidades que ofrece el LIDAR son muy amplias a la hora de obtener modelos. Permite además identificar y cuantificar las fuentes de contaminantes. Este aspecto es especialmente útil, ya que habitualmente se conocen las fuentes más importantes, pero existen numerosas fuentes variables o fuentes de las que no se tiene constancia.