

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE INGENIERÍA CIVIL

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSTGRADO



UN MODELO PARA LA ESTIMACIÓN DEL IMPACTO QUE LAS EMISIONES  
DE ÓXIDOS DE NITRÓGENO Y ÓXIDOS DE AZUFRE DE UNA PLANTA  
TERMOELÉCTRICA CAUSAN SOBRE LA CONCENTRACIÓN  
ATMOSFÉRICA DE  
OZONO.

Por

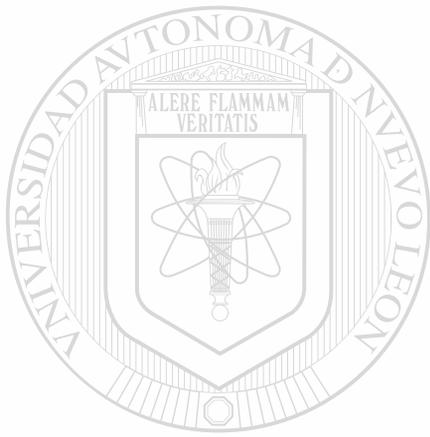
ADRIANA GUADALUPE MENDOZA ARGÜELLO

Como requisito parcial para obtener el Grado de  
MAESTRÍA EN CIENCIAS con Especialidad en  
Ingeniería Ambiental

Noviembre 1998



1080087083



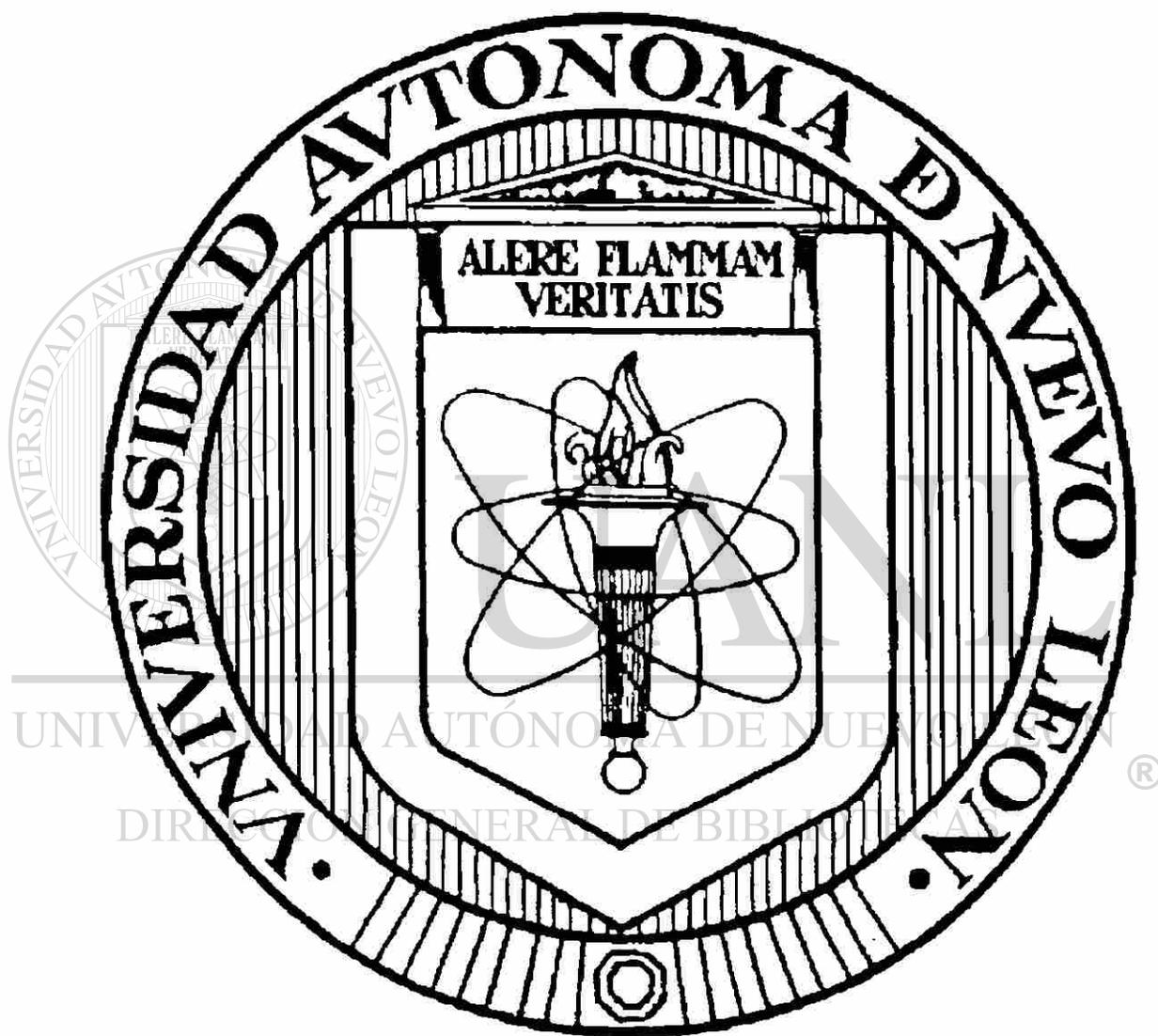
# UANL

---

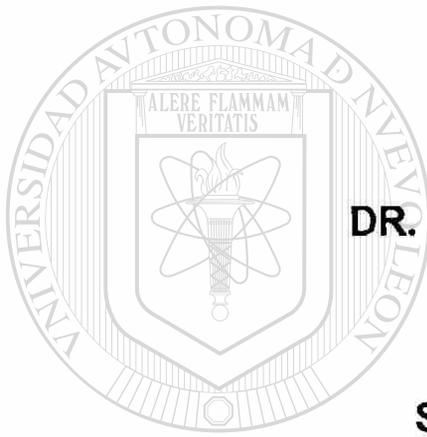
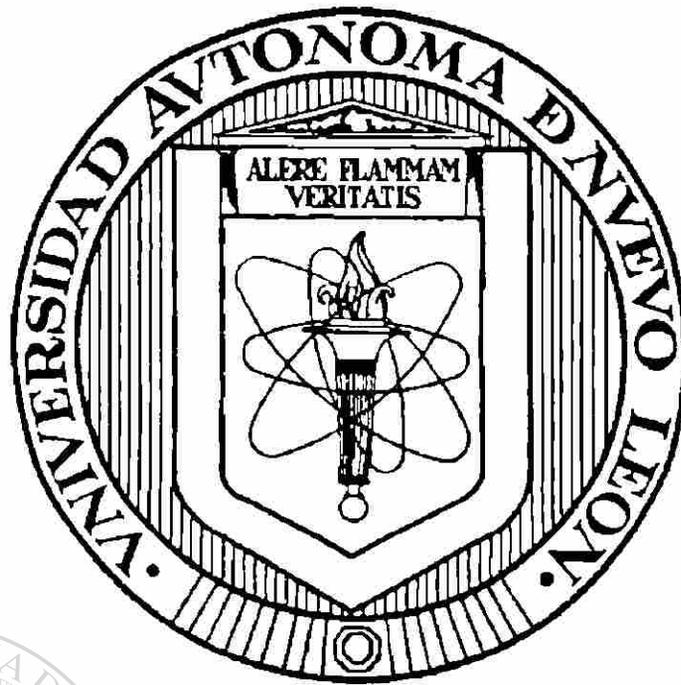
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN  
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECA



**RECTOR**  
**DR. REYES S. TAMEZ GUERRA**

**SECRETARIO GENERAL**  
**DR. LUIS J. GALÁN WONG**

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN**

®

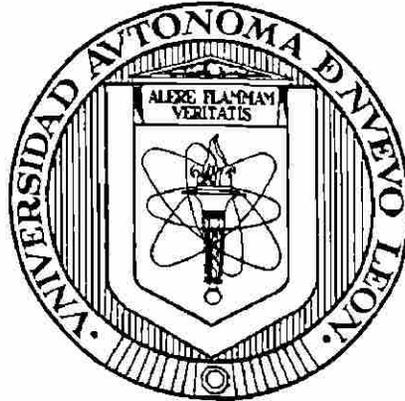
**DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS**  
**SECRETARIO ACADÉMICO**  
**ING. JOSÉ ANTONIO GONZÁLEZ TREVIÑO**

**DIRECTOR GENERAL DE ESTUDIOS DE POSTGRADO**  
**DR. UBALDO ORTIZ MENDEZ**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE INGENIERÍA CIVIL

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSTGRADO



**UN MODELO PARA LA ESTIMACIÓN DEL IMPACTO QUE LAS EMISIONES  
DE ÓXIDOS DE NITRÓGENO Y ÓXIDOS DE AZUFRE DE UNA PLANTA  
TERMOELÉCTRICA CAUSAN SOBRE LA CONCENTRACIÓN  
ATMOSFÉRICA DE**

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN**  
**OZONO.**

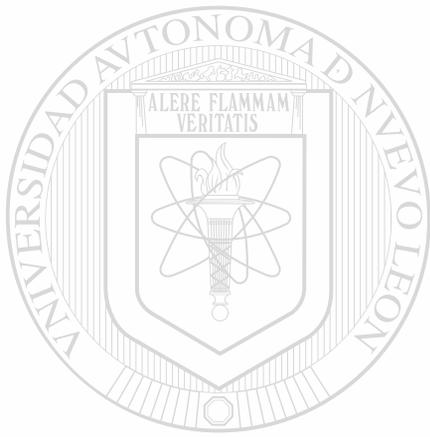
**DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS**  
Por

**ADRIANA GUADALUPE MENDOZA ARGÜELLO**

**Como requisito parcial para obtener el Grado de  
MAESTRÍA EN CIENCIAS con Especialidad en  
Ingeniería Ambiental**

**Noviembre 1998**

TM  
TD885  
.5  
.N5  
M4  
1998



# UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

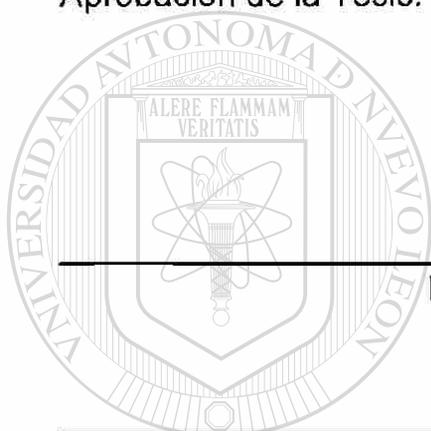
®

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



**UN MODELO PARA LA ESTIMACIÓN DEL IMPACTO QUE LAS  
EMISIONES DE ÓXIDOS DE NITRÓGENO Y ÓXIDOS DE AZUFRE DE  
UNA PLANTA TERMOELÉCTRICA CAUSAN SOBRE LA  
CONCENTRACIÓN ATMOSFÉRICA DE OZONO**

Aprobación de la Tesis:



---

Lic. Ricardo Pedraza García  
Asesor de la Tesis

---

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

---

Dr. Ricardo González Alcorta  
Secretario de Estudios de Postgrado



Monterrey, N. L. 15 de Octubre de 1998.

**DR. RICARDO GONZALEZ ALCORTA**  
SECRETARIO DE ESTUDIOS DE POSTGRADO  
FACULTAD DE INGENIERÍA CIVIL  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN.

Estimado Dr. Ricardo González:

Por este conducto me permito comunicar a usted, que la C. I.Q. Adriana Guadalupe Mendoza Argüello, pasante de la Maestría en Ciencias con Especialidad en Ingeniería Ambiental, ha concluido con su tesis titulada "Un Modelo para la Estimación del Impacto que la Emisiones de Óxidos de Nitrógeno y Óxidos de Azufre de una Planta Termoeléctrica causan sobre la Concentración Atmosférica de Ozono", por lo que no hay ningún inconveniente para atender a su solicitud de Examen de Grado, con los requisitos que exige el reglamento de exámenes profesionales de nuestra Institución. He de agradecerle pasar las instrucciones necesarias para que le de el trámite correspondiente en ese departamento a su digno cargo.

Sin más por el momento, quedo de Usted, agradeciendo de antemano la atención.

**ATENTAMENTE**



---

**LIC. RICARDO PEDRAZA GARCÍA**  
ASESOR DE TESIS



UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON  
 FACULTAD DE INGENIERIA CIVIL  
 SECRETARIA DE ESTUDIOS DE POSTGRADO



COMPROBANTE DE CORRECCION

Tesista: ADRIANA GUADALUPE MENDOZA ARGÜELLO

Tema de la tesis: UN MODELO PARA LA ESTIMACION DEL IMPACTO QUE LAS EMISIONES DE ÓXIDOS DE NITRÓGENO Y ÓXIDOS DE AZUFRE DE UNA PLANTA TERMOELÉCTRICA CAUSAN SOBRE LA CONCENTRACION ATMOSFÉRICA DE OZONO

Este documento certifica la corrección \_\_\_\_\_ del trabajo de tesis arriba identificado, en los aspectos: ortográficos, metológico y estilístico.

Recomendaciones adicionales: (NINGUNA)

Nombre y firma de quien corrigió: *Ramón Longoria*  
 Atq. Ramon Longoria Ramirez

El Secretario de Postgrado: *Ricardo*  
 Dr. Ricardo González Alcorta

Ciudad Universitaria, a 20 de octubre de 1998

Cd. del Carmen, Campeche; 21 de Octubre de 1998.

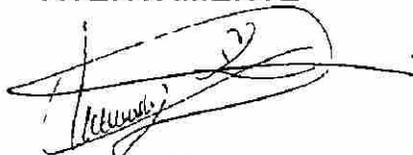
**DR. RICARDO GONZALEZ ALCORTA**  
SECRETARIO DE ESTUDIOS DE POSTGRADO  
FACULTAD DE INGENIERÍA CIVIL  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN.

Estimado Dr. Ricardo González:

Por medio de la presente, solicito la tramitación correspondiente, para sustentar mi examen de grado, ya que he concluido con la elaboración de mi tesis, la cual lleva por nombre: "Un modelo para la Estimación del Impacto que la Emisiones de Óxidos de Nitrógeno y Óxidos de Azufre de una Planta Termoeléctrica causan sobre la Concentración Atmosférica de Ozono".

La aprobación de la tesis en cuanto a la parte teórica, fue de mi asesor, el Lic. Ricardo Pedraza García y en cuanto a la parte de estilo y ortografía, fue el Arq. Ramón Longoria Ramírez.

**ATENTAMENTE**



**I.Q. ADRIANA GPE. MENDOZA ARGÜELLO**

---

---

## **AGRADECIMIENTOS**

**A DIOS NUESTRO SEÑOR JESUS** por darme la oportunidad de vivir, por acompañarme en mi camino y permitirme cumplir mis metas.

**AL INSTITUTO DE POSGRADO DE INGENIERÍA CIVIL, U.A.N.L Y A TODOS MIS MAESTROS** que contribuyeron a mi formación profesional.

**AL CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA (CONACYT)** por permitirme estar dentro de la lista de becarios y por el apoyo económico que nos proporciona a todos los jóvenes con deseos de superación profesional.

**AL INSTITUTO DE INVESTIGACIONES ELÉCTRICAS** por darme la oportunidad de desarrollar el presente trabajo en el Departamento de Sistemas de Combustión, por proporcionarme la asesoría de personas especializadas como la del Dr. Alejandro Salcido González, por permitirme utilizar sus equipos y por su ayuda económica lo cual hizo posible la realización de mi tesis.

**AL LIC. RICARDO PEDRAZA GARCÍA** por su apoyo y asesoramiento en el presente trabajo.

**A TODOS MIS COMPAÑEROS** que me han brindado su amistad especialmente a Gilberto y al Sr Ramiro por su apoyo para llegar a la culminación de este trabajo.

**A LA M en C. ANA TERESA CELADA** , por su apoyo en la elaboración del presente trabajo.

---

---

## **DEDICATORIAS**

### **A MIS PADRES**

**OLGA ARGÜELLO MARTINEZ Y LEOPOLDO MENDOZA HIDALGO**

*Por brindarme la vida y su cariño.*

### **A MIS HERMANOS**

**GLORIA, GUILLERMO Y MARGARITA**

*Por que siempre me han apoyado en mis decisiones, aconsejado y brindado su confianza, por que con su ejemplo me han enseñado a vencer todos los obstáculos y llegar a nuestras metas.*

### **A MI AMOR**

**ALEJANDRO RAMIRO ROJAS MAZA**

*Por la confianza que siempre me tuvo a pesar de la distancia que nos separo, por todo el apoyo que me ha brindado y por todo su amor que me ayudo a concluir este trabajo.*

### **A MIS SOBRINOS**

**MARELYN, YANINCY, CRISTOPHER,  
GUILLERMO, IRVIN Y MONSERRAT**

*Para que este trabajo les sirva como ejemplo en su superación personal de cada uno de ellos en el transcurso de su vida y que consideren que todo lo que nos proponemos se puede lograr con empeño, paciencia y mucha dedicación.*

# TABLA DE CONTENIDO

OBJETIVOS DEL PROYECTO.....	XI
HIPOTESIS.....	XII
LISTA DE TABLAS.....	XIII
LISTA DE FIGURAS.....	XIV
LISTA DE VARIABLES.....	XVI
INTRODUCCIÓN.....	XIX

## CAPITULO 1 ANTECEDENTES.

1.1	Nuestro Planeta en Peligro de Extinción.....	1
1.2	Contaminación Atmosférica.....	3
1.3	Contaminantes del Aire.....	5
1.4	Importancia de la Modelación de la Calidad del Aire.....	10
1.5	Metodo de la Modelación de la Calidad del Aire.....	12
1.6	Tipos de Modelos de la Calidad del Aire.....	16

## CAPITULO 2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA..... 19

## CAPITULO 3 IMPACTO SOBRE LA CALIDAD DEL AIRE, DE LAS EMISIONES DE OXIDOS DE NITROGENO Y OXIDOS DE AZUFRE..... 35

## CAPITULO 4 METEOROLOGIA EN LA DISPERSION DE CONTAMINANTES.

4.1	Estructura de la Capa Atmosférica.....	43
4.2	La capa Limite Planetaria (PBL).....	45
4.3	Los Movimientos Atmosféricos.....	47
4.4	La Estructura de la PBL.....	51
4.5	Condiciones de Estabilidad de la Atmósfera.....	54
4.6	Principales Aspectos Importantes de la Meteorología en la Dispersión de Contaminantes.....	57

## CAPITULO 5 MODELO QUIMICO MATEMATICO PARA LA ESTIMACION DE LA CONCENTRACION DE OXIDOS DE NITROGENO Y OXIDOS DE AZUFRE.

5.1	Definición e Implementación del Modelo.....	61
5.2	Modelo de Campo de Viento ARIANNA.....	67
5.3	Modelo Reticular de Cajas.....	69
5.4	Modelo de Intercambio de Masa.....	71
5.5	Modelo Químico.....	76

## CAPITULO 6 ANALISIS DE RESULTADOS Y VALIDACION DEL MODELO QUIMICO MATEMATICO.

6.1	Resultados y Validación del Modelo en base a la Información Disponible en la Bibliografía Consultada.....	84
-----	--	----

CAPITULO 7 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	99
BIBLIOGRAFIA.....	101

## OBJETIVOS DEL PROYECTO.

### OBJETIVO GENERAL.

Desarrollar un modelo numérico para la estimación del impacto que las emisiones de óxidos de nitrógeno y óxidos de azufre provenientes de una fuente puntual causan sobre la concentración atmosférica de ozono en zonas continentales.

### OBJETIVO ESPECÍFICO.

Validar el modelo desarrollado utilizando datos de experimentos de experimentos de dispersión turbulenta de plumas reactivas en túnel de viento reportadas en las fuentes consultadas.



UANL

---

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

## HIPOTESIS.

- Las emisiones de hidrocarburos de una Central Termoeléctrica que usa combustóleo o gas natural como combustible primario son despreciablemente pequeñas y no contribuyen de manera importante a la formación de ozono en la atmósfera.
- La responsabilidad de una Central Termoeléctrica respecto a la contribución de sus emisiones de óxidos de nitrógeno y óxidos de azufre a la formación de ozono en la atmósfera puede y debe evaluarse considerando que tales emisiones son descargadas sobre una atmósfera limpia, es decir en la que no existe otros precursores para la formación de ozono.

---

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

- La modelación matemática del proceso de la dispersión turbulenta de una pluma reactiva puede realizarse estudiando el acoplamiento de un modelo reticular de cajas con un modelo de gases en redes, cuya evolución química esta determinada básicamente por el ciclo NO<sub>x</sub>-O<sub>x</sub> que incluye la fotodisociación del NO<sub>x</sub>.

---

---

## LISTA DE TABLAS

Tabla	Página
3.1 Muestra de Valores de Emisiones de Óxidos de Nitrógeno y Óxidos de Azufre en las Diversas Zonas de la República Mexicana.-----	41
5.1a Variables de la Caja en observación.-----	72
5.1b Variables de las Cajas vecinas con respecto a la de observación.-----	72
5.2 Constantes de Velocidad de Reacción.-----	79

---

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN®  
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

## LISTA DE FIGURAS.

Figuras	Página
4.1 Evolución de la Temperatura medida del Piso y a una Altura de 1100m por arriba de la Emisión.-----	46
4.2 Idealización por Separado a) del viento medio b) de Ondas y c) de la turbulencia.-----	48
4.3 Típico Perfil Diurno del Potencial Promedio de Temperatura.-----	53
5.1 Ilustración del Sistema del Modelo.-----	73
6.1a Relación de concentración de $\text{NO}_x/(\text{NO}_x)_{\text{max}}$ con $x=1\text{m}$ .-----	87
6.1b Relación de concentración de $\text{NO}_x/(\text{NO}_x)_{\text{max}}$ con $x=2\text{m}$ -----	88
6.1c Relación de concentración de $\text{NO}_x/(\text{NO}_x)_{\text{max}}$ con $x=3\text{m}$ -----	88
6.2a Relación de concentración de $\text{O}_3/(\text{O}_3)_{\text{amb}}$ con $x=1\text{m}$ -----	89
6.2b Relación de concentración de $\text{O}_3/(\text{O}_3)_{\text{amb}}$ con $x=2\text{m}$ -----	89
6.2c Relación de concentración de $\text{O}_3/(\text{O}_3)_{\text{amb}}$ con $x=3\text{m}$ -----	89

---

---

## LISTA DE FIGURAS (Continúa)

Figura		Página
6.3	Relación de concentración de NO respecto a la concentración total de NO <sub>x</sub> a lo largo de la línea de la pluma.-----	90
6.4	Concentración max de NO en el centro de la pluma.-----	90
6.5	Relación de concentración de O <sub>3</sub> respecto a la concentración de fondo de O <sub>3</sub> a lo largo de la línea central de la pluma.-----	90

---

---

## LISTA DE VARIABLES.

$r_n$	rapidez de producción (en masa).
$v_n$	Velocidad de rapidez de producción de masa "n".
$\mu_n$	Concentración en masa "n".
$u_n$	Velocidad de difusión de la especie "n".
$v$	Velocidad del centro de la masa.
$\delta_v$	Desviación estándar
$\Delta t$	Intervalo de tiempo.
$L$	Distancia de la separación entre las cajas adyacentes
$U$	Velocidad característica
$\phi_n$	Intercambio de masa de la especie "n".
$\sigma_n$	Producción de masa
$\odot$	Indica que la caja está ubicada en el centro del sistema.
$ij$	Coordenadas
$\hat{e}$	Vector unitario.
$u_n, v_n$	Componentes de velocidad en "x" y "y"
$V$	Vector velocidad.
$J_i$	Masa de la especie "n" que la caja en cuestión recibe de sus vecinas.
$J_o$	Masa de esa misma especie que sale de ella.

---

---

## LISTA DE VARIABLES (continua)

PM	Peso molecular de la especie "n".
$R_{ni}$	Matriz de los coeficientes estequiométricos de las reacciones consideradas.
$R_a$	Es la restricción de esta matriz.
$U(z)$	Variación de la velocidad del viento con respecto a la altura sobre la superficie terrestre.
$U_0$	Velocidad del viento.
$z_0$	Altura sobre la superficie terrestre.
r	Valor constante del tipo de terreno plano 1/7.
$\alpha$	Coefficiente de enfriamiento adiabático del aire seco.
$dT/dz$	Variación de temperatura con respecto a la variación de altura
$\alpha^*$	Criterio de estabilidad e inestabilidad de la atmósfera.
$T_0$	Temperatura de un elemento de masa de aire que asciende.
$T_0'$	Temperatura del aire seco.
$R_f$	Número de flujo de Richardson.
$R_i$	Número de Richardson gradiente.
L	Longitud de Monin-Obukhov.
SO <sub>2</sub>	Dióxido de azufre.
SO <sub>3</sub>	Trióxido de azufre.
SO <sub>x</sub>	Óxidos de azufre.
NO <sub>2</sub>	Dióxido de nitrógeno.

---

---

## LISTA DE VARIABLES (Continua)

NO	Óxido nítrico.
NO <sub>x</sub>	Óxidos de nitrógeno.
O <sub>2</sub>	Oxígeno.
O <sub>3</sub>	Ozono.
M	Elemento que extrae la energía en exceso en una reacción.
hν	Radiación solar.
k <sub>n</sub> , n=1,2,3,..	Constante de velocidad.

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN<sup>®</sup>  
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

## INTRODUCCIÓN.

Las consecuencias de la contaminación del aire ambiental representan severos problemas de las que nadie se encuentra exento en nuestro planeta; por lo que se hace imprescindible este estudio, para tomar las medidas pertinentes para su atenuación o remedio. Existen diversos estudios para este problema, enfocados a los procesos de transporte, dispersión y transformación química en plumas reactivas especialmente, por diversos autores, dentro de diferentes áreas de la ciencia. Los modelos expuestos hasta ahora son demasiado complejos y requieren de un gran número de parámetros de entrada, con una gran variedad de ecuaciones matemáticas con soluciones fenomenológicas y elaboradas en una super computadora, con una gran capacidad de memoria.

Hoy en día necesitamos modelos que permitan estudiar los diferentes problemas ambientales del aire de una manera rápida, sencilla y con fáciles alternativas de solución.

El objetivo principal de este trabajo consiste en el desarrollo de un tratamiento alternativo para la consideración de los efectos de la turbulencia atmosférica sobre los procesos de dispersión y transformación química de los contaminantes en la atmósfera, con el fin de establecer un método sencillo para estimar la contribución de

las emisiones de óxidos de nitrógeno y de óxidos de azufre a la formación de ozono en la atmósfera, dentro de la zona de influencia de dicha central. Se propone estudiar el acoplamiento de un modelo reticular de cajas con un modelo de gases en redes, desarrollado en el Departamento de Sistemas de Combustión en el Instituto de Investigaciones Eléctricas, para la determinación de campos de viento turbulento. El modelo será validado utilizando la información disponible en fuentes especializadas sobre experimentos de dispersión turbulenta de plumas reactivas, realizados en un túnel de viento. El presente trabajo consta de siete capítulos que se describen a continuación.

En el primer capítulo, se exponen los problemas de la contaminación ambiental de nuestro planeta, tanto en el agua, como en el aire, el suelo, y la flora. Todos ellos son muy relevantes; sin embargo, lo que se estudiará con mayor detalle es en el caso del aire; es decir, la contaminación del aire o atmosférica. Se presentan las causas de esta contaminación, recalcando que la contaminación del aire había sido predecida por diversos autores hace algunos siglos. Las grandes cantidades de emisiones contaminantes que se vierten a la atmósfera ha provocado un acelerado deterioro de nuestro planeta, provocando un desequilibrio de nuestro ecosistema y graves problemas a la salud humana. Continuamos con la importancia de la modelación para este tipo de problemas y terminamos exponiendo los diferentes tipos de modelación.

En el segundo capítulo, se expone la propuesta del trabajo de investigación haciendo una breve reseña de los diferentes modelos de la calidad del aire y las limitaciones de cada uno de ellos en la dispersión turbulenta de los contaminantes atmosféricos. En este trabajo se propone un tratamiento alternativo, para la consideración de los efectos

turbulentos sobre los procesos de dispersión y transformación química de los contaminantes en la atmósfera, la cual se simula mediante un modelo numérico matemático de plumas reactivas donde se estimen las concentraciones de óxidos de nitrógeno y óxidos de azufre provenientes de una planta termoeléctrica con respecto al ozono atmosférico de sus alrededores. Para la simulación del campo de viento se, utilizará el modelo de gases en redes.

En el tercer capítulo, se presenta el impacto ambiental provocado por las emisiones de óxidos de nitrógeno y óxidos de azufre, que son los principales contaminantes primarios en la formación de las lluvias ácidas y precursores de otros contaminantes. Estos dos compuestos son los más relevantes en nuestro tema de investigación, los cuales son la médula del modelo numérico de plumas reactivas.

En el cuarto capítulo, se habla de los aspectos más relevantes de la meteorología, la cual es muy importantes en la dispersión de los contaminantes. Se continua con una descripción de las principales capas atmosféricas; analizando con más detalle la capa donde los fenómenos de dispersión de contaminantes son relevantes; esto es, la capa límite planetaria (PBL); analizando además los diferentes fenómenos que son responsables de la dispersión de los contaminantes; en especial, la turbulencia, misma que es provocada por los gradientes de temperatura generados por la variación día-noche, y por último, se mencionan las formas de clasificar los estados turbulentos, exponiendo el tema de estabilidad atmosférica.

En el quinto capítulo se expone el modelo químico matemático, analizándolo con mayor detalle. Se inicia con los métodos del modelo, proponiendo un tratamiento

radicalmente diferente en los procesos de dispersión y transformación química de los contaminantes en la atmósfera. Se presenta la manera como se lleva a cabo el acoplamiento del modelo de cajas y la interrelación con el modelo de gases en redes, para la determinación de campo de viento turbulento; posteriormente, se presentan los principales procesos de intercambio y producción de masa en la retícula que simulamos. Finalmente se presenta la elección de las principales reacciones químicas que se estiman para la pluma reactiva.

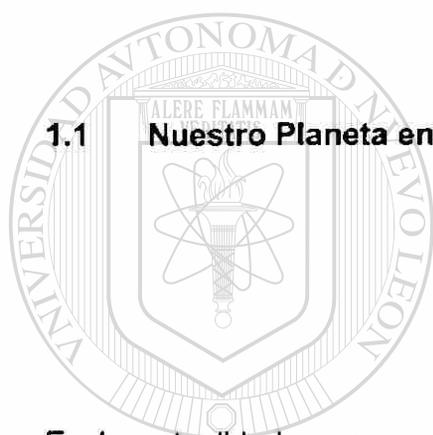
En el sexto capítulo presentamos los resultados obtenidos de nuestro modelo y la validación de éste, con datos experimentales proporcionados por Builtjes (1981-1983), con toda la información necesaria para configurar el escenario de la simulación de nuestro modelo en la computadora.

Por último, en el capítulo siete se concluye con un resumen de los principales resultados obtenidos de las posibilidades y limitaciones de nuestro tratamiento de plumas reactivas.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

# CAPÍTULO 1

## ANTECEDENTES



### 1.1 Nuestro Planeta en Peligro de Extinción.

En la actualidad es necesario hacer una pausa y reflexionar sobre el deterioro de nuestro medio ambiente tanto en el aire, el agua, la flora, la fauna y los materiales. El aire es indispensable para la vida de nuestro planeta, la adición de materia indeseable transportado por el aire, provenientes de fuentes, tanto móviles como estacionarias, cambian la composición de la atmósfera de la Tierra, perjudicando la vida y alterando nuestro ecosistema. Este fenómeno atmosférico llamado contaminación del aire es característico de la vida moderna de nuestros tiempos. Es la consecuencia de los residuos de los procesos industriales, principalmente.

La contaminación del aire no es un fenómeno reciente, esta surgió desde la época primitiva cuando el hombre descubrió el fuego, y es esencial hasta nuestros días. La

contaminación principal del aire es la combustión, la cual acarrea graves problemas para nuestro medio ambiente como: el smog de las grandes ciudades, las lluvias ácidas, el efecto invernadero, la destrucción de las tierras de cultivo por erosión o por agotamiento del suelo, el envenenamiento de diversas especies animales por el uso de pesticidas en la agricultura, el incremento de la radiación de fondo por los accidentes nucleares y los desechos radiactivos de las plantas nucleoelectricas. La enorme cantidad de desperdicios sólidos y líquidos de los procesos industriales, la destrucción de la capa de ozono y el ruido, son solamente algunos problemas catastróficos presentes en el planeta que padecemos en nuestros días por el crecimiento del desarrollo industrial, la explosión demográfica y el uso irracional de los recursos naturales.

Los problemas derivados de la contaminación ambiental son, en realidad, tan antiguos como el hombre y, aunque diferentes autores e investigadores lo han venido advirtiendo desde hace tiempo, sólo hasta ahora se ha reconocido la seriedad del problema. Esto se debe al deterioro del medio ambiente que ha alcanzado niveles verdaderamente alarmantes, rebasando en varios lugares, las capacidades de los mecanismos homeostáticos y de autodepuración de la naturaleza.

La mayoría de las actividades del hombre se han convertido en fuerzas internas muy intensas que están rompiendo la armonía de la naturaleza, llevándola hasta situaciones tan alejadas del equilibrio que ya no son estables en relación con las perturbaciones. En estas condiciones los sistemas no lineales fuera del equilibrio, pueden alcanzar el punto de bifurcación, dando lugar de manera irreversible a comportamientos de la naturaleza diferentes de los comportamientos originales y

donde probablemente los seres humanos y muchas otras especies animales y vegetales estén en peligro de extinción.

Ante tales perspectivas, he aquí que el hombre se encuentra en la actualidad, frente a uno de los desafíos más trascendentales de su historia conseguir la conciliación del progreso que impone la vida moderna con el equilibrio de la naturaleza y con un medio ambiente sano, libre de elementos nocivos para el desarrollo de la Sociedad y de sus integrantes (Cantú, 1992).



## 1.2 Contaminación Atmosférica.

# UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN  
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Dado el avance de la investigación científica y el desarrollo tecnológico el hombre en la búsqueda del beneficio y la comodidad de su especie, ha deteriorado de manera severa, su medio ambiente provocando un desequilibrio en el ecosistema, poniendo en peligro su vida misma y su entorno; el Planeta Tierra.

Todos los problemas que surgen en la alteración de un ecosistema son sutiles, complejos de amplias consecuencias, duraderos y en algunas ocasiones diferidos; pero si el ecosistema afecta a una de sus partes tan importantes como es la atmósfera, entonces los problemas derivados de ello resultan verdaderamente complicados y difíciles de resolver.

Debido al crecimiento demográfico y las diferentes actividades humanas, tales como el transporte con la creciente utilización de vehículos automotores, la proliferación de plantas termoeléctricas, carboeléctricas, nucleoeeléctricas para la generación de electricidad y el creciente desarrollo industrial. Múltiples sustancias perjudiciales para la salud se vierten a la atmósfera como resultado de estas actividades y la presencia de estas sustancias ha deteriorado seriamente la calidad del aire, que no sólo ha llegado a producir situaciones peligrosas para la salud, sino que incluso en varias ocasiones han resultado fatales para algunas especies vivientes.

La contaminación atmosférica, no es solamente un problema local; los contaminantes emitidos en un sitio determinado son transportados por los vientos y pueden llegar hasta lugares muy remotos, produciendo efecto de largo alcance que no pueden estimarse fácilmente, pero que ciertamente llegan a extenderse hasta las escalas: regional, nacional e incluso global. Un caso típico es el de las grandes emisiones de contaminantes primarios como el dióxido de azufre ( $\text{SO}_2$ ), los cuales sufren transformaciones químicas en otros compuestos secundarios, como los sulfatos ( $\text{SO}_4^{2-}$ ). Estas especies secundarias son responsables de nuevos efectos adversos como la lluvia ácida.

En escala global, los dos ejemplos de mayor interés sobre las consecuencias de largo alcance son: el primero, la destrucción de la capa estratosférica de ozono, la cual es un filtro natural que nos protege de las intensas radiaciones ultravioleta provenientes de la energía solar. El segundo, implica el efecto de invernadero, el cual consiste en el incremento de la temperatura media de la Tierra como una consecuencia del

incremento de concentraciones de bióxido de carbono en la atmósfera (Zannetti, 1990).

### 1.3 Contaminantes del Aire.

La composición del aire sobre la superficie de la tierra ha sufrido varios cambios a través de la historia. En particular hay evidencias que “probablemente el gas más primitivo del medio ambiente no contenía casi oxígeno libre” y que “ el oxígeno se ha acumulado en años más recientes como resultado de la fotosíntesis, proceso utilizado por las primeras especies que no dependían del oxígeno ” (Zannetti, 1990). Aquellas primeras especies de vida han desaparecido como consecuencia de estos cambios o adaptación.

## DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Una de las primeras fuentes de energía utilizadas por el hombre ha sido la madera que se vio reemplazada por el carbón mineral durante la Revolución Industrial. El uso excesivo de este material ha causado una clara perturbación en el equilibrio del medio ambiente del planeta.

Así se gestan nuevos adelantos en la tecnología y ahora se es capaz de acceder a una nueva fuente energética: el petróleo, de esto se obtiene una gran gama de productos. Esto implica una nueva Revolución Industrial, caracterizada en últimas décadas por un

creciente incremento de las concentraciones de ciertas sustancias en la atmósfera tanto de algunas que normalmente se encuentran en ella, como de otras sustancias extrañas que se le han venido agregando.

En términos generales, la contaminación del aire, puede considerarse como la adición de sustancias indeseables que son transportadas por el viento y que modifican la composición de la atmósfera de nuestro planeta, perjudicando la vida y alterando los materiales. Sin embargo, la tarea de definir cuáles son las sustancias que deben considerarse como contaminantes del aire, no resulta fácil, pues esto implica establecer un marco de referencia que denominaremos atmósfera limpia, cuya composición se considera una composición normal de la atmósfera. Esto no es tan obvio, ya que la composición de la atmósfera ha sufrido numerosos cambios a lo largo de la historia; pero aún así, muy a menudo se utiliza esta referencia basada en la composición química media del aire atmosférico: El aire "puro" es una mezcla de gases que contiene 78.09% de nitrógeno ( $N_2$ ); 20.94 de oxígeno ( $O_2$ ); 0.03 % de bióxido de carbono ( $CO_2$ ); 0.93 de gases inertes: Argón (Ar), Neón (Ne), Helio (He); 0.01 % de metano ( $CH_4$ ); hidrógeno ( $H_2$ ) con menos de 0.5 ppm etc. Lo que respiramos, sin embargo, no es estrictamente esta mezcla de gases solamente, sino un aerosol, ya que el aire contiene partículas de polvo lo suficientemente pequeñas para estar suspendidas.

Estas partículas son principalmente de humo, de sal, de arena fina y cenizas volcánicas. Esta es aproximadamente la composición estándar de un aire "normal"; los valores de las cantidades relativas de estos elementos componentes pueden alcanzar límites después de los cuales se vuelven tóxicos y, por lo tanto, contaminantes.

Muestra de esto ha sido la actividad del hombre sobre el uso indiscriminado del petróleo como combustible, el cual ha contaminado el aire ambiente agregándole dióxido de nitrógeno ( $\text{NO}_2$ ), dióxido de azufre ( $\text{SO}_2$ ), monóxido de carbono ( $\text{CO}$ ), aerosoles, y partículas suspendidas. Todos ellos adoptan una forma contaminante de acuerdo al grado de su concentración en la atmósfera y de acuerdo a las condiciones del medio en que se encuentran.

Cuando la luz solar influencia el medio circundante, estos gases junto con otros más, reaccionan para producir nuevas sustancias, las cuales se manifiestan de diferentes maneras, como por ejemplo: el smog fotoquímico, el efecto invernadero, las lluvias ácidas, etc.

Los contaminantes del aire se encuentran en forma de gases, como el dióxido de nitrógeno, y de partículas sólidas o líquidas, como el polvo, los aerosoles y los vapores. Estos contaminantes son emitidos a la atmósfera por fuentes naturales, como las erupciones volcánicas y los incendios forestales provocados por las descargas atmosféricas, y por fuentes antropogénicas, como la industria, el transporte, y la agricultura.

Además, algunos contaminantes primarios (i.e, aquellos que son emitidos directamente de la fuente) sufren reacciones químicas al entrar a la atmósfera y dan lugar a la formación de otras sustancias contaminantes, llamados contaminantes secundarios en forma de gases como el ozono ( $\text{O}_3$ ), y de partículas como los sulfatos ( $\text{SO}_4^{2-}$ ).

Los principales contaminantes primarios que resultan de la oxidación de combustibles fósiles a altas temperaturas de combustión son:

1. Los compuestos de azufre, ( e.g,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{SO}_3$  y el  $\text{H}_2\text{S}$  ),
2. Los compuestos de nitrógeno ( e.g,  $\text{NO}$ ,  $\text{NH}_3$ ),
3. Los compuestos de carbono (e.g, hidrocarburos HC y CO),
4. Los compuestos de halógeno (e.g, fluoruros, cloruros y bromuros).

Los contaminantes del aire en forma de partículas son muy diversos en cuanto al campo y origen de éstas, por el tamaño de las partículas se clasifican como sigue:

1. Partículas gruesas cuando su diámetro es mayor de  $2.5 \mu\text{m}$ .,
2. Partículas finas (o partículas de materia respirable, RPM) cuando su diámetro es menor de  $2.5 \mu\text{m}$ .,
3. Partículas inhalables ( o partículas de materia inhalable, IPM), cuando su diámetro es menor de  $0.10 \mu\text{m}$ .

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Para la salud humana, las partículas gruesas son menos peligrosas pues fácilmente las elimina nuestro sistema respiratorio. Sin embargo, las finas son nocivas, ya que sus efectos adversos deterioran la salud humana.

Los contaminantes primarios, en forma de partícula son los siguientes:

1. Iones con diámetro mucho menor que  $0.1\mu\text{m}$ , formadas, por ejemplo, por la radiación solar y rayos cósmicos, por materiales radiactivos y por procesos de combustión.
  2. Materiales carbónicos.
  3. Partículas formadas por metales ligeros como sodio, magnesio, aluminio, silicón, potasio y calcio.
  4. Partículas de metales pesados como titanio, vanadio, magnesio, fierro y arsénico.
  5. Partículas emitidas por los automóviles mal carburados.
  6. Partículas grandes como el polvo y algunos materiales industriales.
- Partículas viajeras como el polen, algunos microorganismos e insectos.

Las reacciones químicas atmosféricas (especialmente la fotoquímica) son responsables de la transformación de los contaminantes primarios en productos de reacciones intermedias (e.g. radicales libres) y finalmente, en productos estables, los contaminantes secundarios. Los principales gases contaminantes secundarios son:

1. El dióxido de nitrógeno ( $\text{NO}_2$ ) formado a partir del óxido nítrico ( $\text{NO}$ ),
2. El ozono ( $\text{O}_3$ ) formado por reacciones fotoquímicas de los óxidos de nitrógeno.

Las reacciones químicas atmosféricas (especialmente la fotoquímica) son responsables de la transformación de los gases primarios y secundarios en partículas secundarias.

Los procesos más conocidos son:

1. La transformación del  $\text{SO}_2$  en sulfatos ( $\text{SO}_4^{-2}$ ),
2. La transformación del  $\text{NO}_2$  en nitratos ( $\text{NO}_3^{-1}$ ); y
3. La transformación de compuestos orgánicos en partículas orgánicas.

#### 1.4 Importancia de la Modelación de la Calidad del Aire.

Una de las tendencias, en el nivel Internacional, en la definición de la Legislación para el control, el mejoramiento y la conservación de la calidad del aire, es la utilización de modelos de dispersión de contaminantes. Los modelos son herramientas analíticas utilizadas para el estudio del impacto ambiental de las fuentes de emisión y la definición de criterios para la aplicación de las leyes y normas establecidas. El proceso de modelación de la calidad del aire consiste, a grandes rasgos, en la determinación de la distribución de las concentraciones de sustancias contaminantes en los alrededores de las fuentes emisoras, a partir de la información relativa a las tasas de emisión, las características de las fuentes, la meteorología de la zona y las características del terreno.

Los estudios de modelación de la calidad del aire, son importantes porque pueden contribuir a la definición de leyes y normas para el control de emisiones, determinando

las tasas máximas de emisión permitidas que cumplen con las normas y técnicas propuestas para el control de emisiones. También pueden utilizarse para la selección de sitios adecuados para la instalación de futuras fuentes de contaminantes, de tal manera que su impacto ambiental sea el menor posible. Pueden ayudar a la definición de planes de contingencia y de estrategias de intervención inmediata para evitar episodios de contaminación atmosférica severa en alguna localidad específica y pueden proporcionar información para deslindar responsabilidades en cuanto a los niveles de contaminación ya existente; etc (Zannetti, 1990).

Sin embargo, el papel de la modelación de la calidad del aire no debe sobreestimarse. Los estudios de modelación de la calidad del aire, lo mismo que las campañas experimentales de monitoreo atmosférico, no representan la solución al problema de la contaminación del aire; ya que éste es un problema bastante complejo en el que, además, se encuentran involucrados intereses políticos, económicos, sociales y culturales. Los estudios de modelación y monitoreo sólo contribuyen a la solución de este problema proporcionando información para la instrumentación y la evaluación de las posibles estrategias de control y abatimiento, de las emisiones contaminantes (Salcido & Saldaña, 1993).

## 1.5 Métodos de la Modelación de la Calidad del Aire.

Desde el punto de vista técnico, los diferentes métodos de modelación matemática y de simulación computacional pueden aplicarse a todos los aspectos de los problemas de la contaminación atmosférica; ya sea para estimar y evaluar las tasas de emisión, para describir los diferentes procesos físicos y químicos involucrados en los fenómenos de transporte, dispersión y transformación química de los contaminantes en la atmósfera, o bien para cuantificar los efectos perjudiciales de los contaminantes en alguna región específica. Sin embargo, la consideración de estos problemas en su totalidad y en conjunto no puede ser tarea de un solo hombre o grupo de investigación; para ello se requiere de la participación de un gran número de expertos en diferentes disciplinas, que colaboren de manera estrecha y organizada. Y aún así, cada uno de los diferentes aspectos de la contaminación atmosférica constituye por sí solo un problema complejo y de grandes dimensiones.

En el caso de los fenómenos del transporte y la dispersión de contaminantes en la atmósfera, sin la consideración de la química atmosférica y las reacciones fotoquímicas que tienen lugar durante estos procesos, el problema es todavía bastante complicado, ya que involucra múltiples aspectos térmicos y mecánicos no lineales y fuera de equilibrio. La representación matemática correcta de estos fenómenos y sus múltiples interacciones (aire-agua-tierra) requiere de un gran número de ecuaciones diferenciales parciales, no lineales y acopladas, cuya solución analítica no es posible

con las matemáticas disponibles actualmente, y cuya solución numérica detallada tampoco es posible con los métodos numéricos ordinarios, aún con los poderosos equipos de supercómputo que existen hoy en día. El análisis de las escalas de longitud involucradas en el flujo atmosférico, muestra que la mayoría de las situaciones típicas de la capa límite planetaria están asociadas con escalas de longitud que van desde 300 m hasta 1 mm. Debido a ello, la malla requerida para el cálculo numérico, en el caso de un problema de dispersión de contaminantes que involucra una región que se extiende horizontalmente sobre un área de 10 km. X 10 km, debería contener del orden de  $10^{20}$  nodos para resolver todas las fluctuaciones. Además, la solución numérica de este problema involucra condiciones iniciales y de frontera un tanto complejas. Debido a esto, naturalmente, un enfoque honesto y limpio del problema resulta francamente imposible, al menos en términos de las herramientas matemáticas y numéricas actuales y de los equipos de cómputo disponibles en estos días.

Para superar estas dificultades, se han desarrollado una gran cantidad de técnicas prácticas basadas en las que hacen uso de datos experimentales que se obtienen mediante campañas meteorológicas, de monitoreo de la calidad del aire, y de emisiones e inmisiones en los sitios de interés y sus alrededores. Esta información experimental se utiliza, en parte, para la elaboración de modelos en los que las ecuaciones, o parte de las ecuaciones que gobiernan el comportamiento del fenómeno, son sustituidas por expresiones empíricas o semi-empíricas a fin de obtener un problema más simple y fácil de resolver. Todos los modelos de este tipo, deben someterse a un proceso de calibración antes de ser utilizados para los estudios de la contaminación atmosférica y su impacto sobre el medio ambiente. Estos modelos, además, requieren de la especificación de un número de parámetros

característicos de las fuentes de contaminación, de la micrometeorología del lugar donde se ubican, y de la complejidad del terreno en sus alrededores. Los modelos producen, como salida, estimaciones de las concentraciones de contaminantes en el ambiente, para ciertos tiempos de promediación y ciertos puntos específicos de los alrededores conocidos como receptores. Estos resultados pueden ser utilizados para analizar el impacto y los efectos de los contaminantes sobre los sitios receptores, los cuales pueden distribuirse geográficamente en áreas pequeñas (escala local), con alcances horizontalmente que van de 1 a 20 km.; en escala regional, de 20 a 1000 km.; en escala nacional, de 1000 km. a la totalidad de un país; y por último, en escala global, que va desde hemisférica en adelante.

Los parámetros de entrada para un modelo se determinan de manera experimental, y el número de ellos requerido por cada modelo depende de su grado de sofisticación. Los modelos sencillos requieren pocos datos experimentales, pero sólo son útiles para estudios preliminares, ya que no incluyen muchos de los efectos importantes del fenómeno en cuestión. Los modelos más complejos requieren de un número mayor de datos experimentales; pero, en cambio, sus resultados también son, en principio, más precisos en la representación de la realidad física.

Cabe resaltar, sin embargo, que la mayor complejidad de un modelo no garantiza, necesariamente, mejores predicciones. Los modelos más complejos requieren de un número mayor de parámetros de entrada y, consecuentemente, también son alimentados con un número mayor de fuentes de error. Además, aunque los modelos complejos pueden calibrarse más fácilmente ajustándose a los datos experimentales, esto no garantiza que sus predicciones sean mejores que las de los modelos más

simples, cuando son aplicados sobre la base de un conjunto de datos experimentales diferente del que fue utilizado para su calibración (Zannetti, 1990).

En la práctica, los estudios de modelación de la calidad del aire deben desarrollarse con base en una metodología mínima que incluye una caracterización del problema, un análisis para la selección del modelo adecuado, la calibración del modelo y la evaluación de los efectos de las incertidumbres sobre sus resultados, y la interpretación de estos resultados en términos de los fines deseados (Seigneur, 1992).

La caracterización del problema requiere de una identificación de las necesidades, la especificación de los tipos de contaminantes involucrados, la definición de las escalas temporal y espacial del problema, la determinación del tipo de dominio, la complejidad del terreno, los números de fuentes, sus tipos y sus características principales, la disponibilidad de información meteorológica y micrometeorológica, y la disponibilidad de recursos de cómputo. Una vez caracterizado el problema, el proceso de selección del modelo adecuado se realiza con la información obtenida y con base en un conocimiento amplio de las características de los diferentes modelos disponibles, de su dinámica, de la información que requieren y de los resultados que proporcionan (Salcido & Saldaña, 1993).

El modelo seleccionado, por otra parte, debe ser calibrado y evaluado con datos locales de monitoreo de la calidad del aire, a fin de determinar sus límites de aplicabilidad y minimizar los errores en los resultados de las predicciones. Solamente los modelos que han sido calibrados y evaluados con la información histórica adecuada pueden ser usados con fines de predicción.

Esto es un punto sobre el cual debe tenerse mucho cuidado, pues la calibración y evaluación de un modelo puede resultar un tanto difícil cuando no se tienen datos suficientes sobre la meteorología y la calidad del aire y, en tal caso, se corre el peligro de llegar a utilizar un modelo rebasando sus límites de aplicabilidad, tanto teóricos como prácticos.

### 1.6 Tipos de Modelos de la Calidad del Aire.

Existen varios tipos de modelos que permiten realizar estudios de calidad del aire. Estos modelos son herramientas esenciales para estudios de contaminación del aire, y se clasifican en dos tipos: Físicos y Matemáticos.

**Los Modelos Físicos.** Son pensados para simular procesos atmosféricos, influyendo los contaminantes del aire por medio de una representación, en escalas pequeñas, del problema actual de contaminantes del aire. Un modelo físico algunas veces se emplean para estudiar la dispersión de los contaminantes, y consiste en una réplica, en pequeña escala, del área urbana o una porción de ella, en un túnel de viento. Los problemas asociados con escalas pequeñas que duplican los movimientos atmosféricos, hacen que los modelos físicos de esta variedad sean de limitada utilidad.

Pese a lo útil que son para ciertos elementos de comportamiento atmosférico e inapreciables para ciertos detalles críticos, los modelos físicos no son aptos en los modelos de calidad de aire sujetos a las emisiones relacionadas bajo una variedad de condiciones meteorológicas y emisiones de la fuente de la calidad de aire ambiente sobre un área urbana. Los modelos matemáticos sí cumplen con estos requisitos.

**Los Modelos Matemáticos** han sido clasificados en dos tipos:

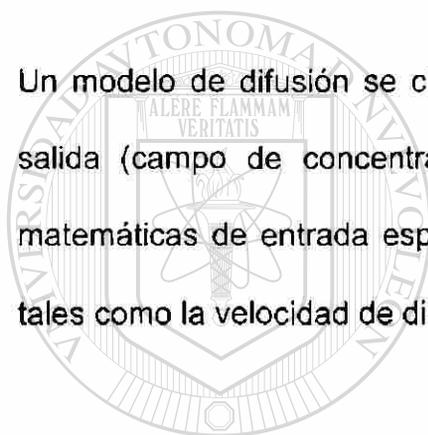
1. Modelos basados sobre el análisis estadístico de datos de monitoreo.
2. Modelos basados sobre la descripción fundamental de transporte atmosférico y procesos químicos llamados determinísticos.

La primera clase de modelos matemáticos de calidad de aire ambiental consiste en relaciones estadísticas semiempíricas entre los datos disponibles y la medición. Así se puede hacer un pronóstico, en una cierta región, de los niveles de concentración en las próximas horas, como una función estadística de mediciones disponibles de corriente actual y una correlación anterior entre estas mediciones y la tendencia de las concentraciones.

Los modelos determinísticos, están basados sobre una descripción matemática fundamental de procesos atmosféricos en los que los efectos de contaminantes del aire son generados por causa de emisiones provenientes de chimeneas de industrias que utilizan combustibles fósiles en los procesos de combustión.

Los modelos determinísticos son los más importantes, por su aplicación práctica, debido a que son calibrados. Ellos proporcionan una relación entre la fuente y el receptor determinístico. Tal relación es la meta de cualquier principio de estudio para mejorar la calidad del aire ambiental y preservar los niveles de concentración existentes para el futuro desarrollo urbano e industrial. En otras palabras, sólo un modelo determinístico puede proporcionar un análisis no ambiguo de las fracciones de responsabilidad de cada fuente contaminante a cada receptor de área. Así permite la definición e implantación de estrategias apropiadas de control de emisiones.

Un modelo de difusión se clasifica como un modelo determinístico, debido a que la salida (campo de concentración) se calculará a partir de ciertas manipulaciones matemáticas de entrada específica (velocidad de emisión y parámetros matemáticos tales como la velocidad de dispersión) (Zannetti, 1990).



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

## CAPÍTULO 2

### PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.

Como hemos mencionado en el capítulo primero, la modelación de la calidad del aire es el proceso mediante el cual se determinan las distribuciones espaciales de las concentraciones de las sustancias contaminantes en los alrededores de las fuentes emisoras, a partir de la información relativa a las tasas de emisión, las características geométricas y físicas (mecánicas y termodinámicas) de las fuentes, la meteorología de la zona de influencia de las fuentes y la complejidad del terreno en dicha zona. Para llevar a cabo este proceso es necesario contar con modelos (o colección de modelos) que representen adecuadamente, desde el punto de vista físico, los diferentes fenómenos atmosféricos involucrados en el transporte, la dispersión, la transformación química y la remoción de los contaminantes vertidos en la atmósfera por las fuentes emisoras.

Este es un problema bastante complejo, que ha sido sujeto de interés por varios años. Desafortunadamente, la mayoría de los estudios publicados de modelación han evitado los problemas teóricos asociados con la descripción propia de difusión

atmosférica y han concentrado en lugar de otras técnicas para utilizar técnicas de plumas gaussianas y modelos de ecuaciones de difusión. Ante las capacidades de varios modelos, sus principales predicciones pueden ser estimadas por tres aspectos fundamentales de modelos de contaminación del aire: a) La definición precisa de las componentes de velocidad media y fluctuante del campo de viento que se establecen en el modelo. b) Del número de reacciones químicas involucradas en el modelo y sus respectivas constantes de velocidad. c) De la naturaleza del promedio implícito en los cálculos de las concentraciones, por ejemplo: sobre que volumen de espacio y periodo de tiempo son los promedios de concentración (Lamb G. Robert y Seinfeld H. J. 1973).

Nosotros consideramos cada uno de estos aspectos, dado que, el objetivo de este trabajo es realizar un modelo numérico de plumas reactivas, donde se estimen las concentraciones de óxidos de nitrógeno y óxidos de azufre de una fuente emisora sobre la concentración de ozono atmosférico.

La simulación de nuestro modelo es esencialmente el problema de describir el comportamiento de un número de especies reactivas químicamente en la capa límite atmosférica turbulenta. Considerando  $N$  constituyentes de reactivos químicamente en un fluido. La concentración de cada constituyente satisface la ecuación de continuidad.

$$\frac{\partial \mu_n}{\partial t} + \nabla(\mu_n, v) = r_n \quad (2.1)$$

donde  $\mu_n$  y  $r_n$  son respectivamente, la concentración (en masa) y la rapidez de producción de masa de la especie  $n$  ( $n=0,1,2 \dots, N$ ),  $v$  es el campo instantáneo de velocidad del viento, el cual se representa como la superposición de una componente media  $u$  y una componente turbulenta, se ha ignorado el término correspondiente a la difusión molecular de las especies, ya que en la atmósfera predomina la dispersión turbulenta.

Seinfeld(1988) realizó una revisión de las técnicas de modelación disponible para la predicción de las transformaciones químicas que ocurren en una pluma reactiva dispersada por el viento desde su emisión por una fuente localizada, entre las que se encuentran el desarrollo de modelos de calidad de aire fotoquímicos en 1969, en Corp de desarrollo de sistemas, Corp de investigación General, Sistemas , Ciencia y Software, y el Instituto de Technology/ Aplicacion de sistemas, Inc en California.

Dos años más tarde, se inició, un esfuerzo paralelo en el Laboratorio Nacional de Livermore Lawrence. A mediados de los 70s, la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA) propuso la Aproximación de modelos cinéticos empíricos (EKMA), que consistió en un método intensivo químico para la estimación de los efectos orgánicos y los cambios de emisión de  $\text{NO}_x$  sobre el ozono pico. Los compuestos orgánicos que participan en la química del smog fotoquímico son: VOC (compuestos orgánicos volátiles); ROG (gases orgánicos reactivos); NMHC(hidrocarburos no-metanos); NMOC (compuestos orgánicos no-metanos). Durante los 70s, los primeros trabajos desarrollados en varios modelos, pero con la excepción de EKMA, la aplicación de resultados de ellos por agencias reguladoras fueron limitados, para los 80s, los modelos de calidad de aire, incluyendo EKMA y

otros, alcanzaron un punto de aceptación general. A pesar del extenso uso de modelos de calidad de aire fotoquímicos en el desarrollo de estrategias de control alcanzando los estándares de calidad de aire ambiente nacional (NAAQS) para el ozono; sin embargo, solamente un número modesto de programas de campo han sido montados a datos coleccionados para apoyar sus evaluaciones, por ejemplo: el proyecto de contaminación reactiva de los Angeles (LARPS) en 1973, el estudio de contaminación del aire en el nivel regional (RAPS) en St Louis en 1974-1977, los programas de Monitoreo Aerométrico cooperativo de la Costa Central del Sur (SCCCAMP), en la región del canal de Santa Barbara, en California en 1985, y el estudio de calidad de aire en el sureste de California (SCAQS) en 1987.

No obstante, los modelos de calidad de aire fotoquímicos alcanzaron una extensión global en estimar los efectos de los hidrocarburos y los cambios de emisión de NO en la calidad de aire en ozono en regiones urbanas y abarcando también una escala regional. Es crucial que esos desarrollos y usos de modelos de calidad de aire y políticas establecidos tienen un común acuerdo de sus usos y el rol en la decisión de procesos realizados.

Otro tipo de modelos llamados de caja, son los modelos más simples de los modelos numéricos. La región modelada es caracterizada como una única célula, o caja, limitada por el piso en el fondo de ésta, la base de inversión o algunos otros límites superiores de mezclado en la cima de ésta. Los límites superior e inferior están regidos por los ejes cartesianos de los lados de la caja este-oeste, norte-sur. La caja puede cerrarse abarcando un cierta área en varios cientos de kilómetros cuadrados. Los contaminantes primarios son emitidos en la caja por varias fuentes localizadas

dentro de la región modelada, experimentando un mezclado instantáneo uniforme. Los modelos de caja son limitados abarcando únicamente al estudio de la variación temporal de la concentración promedio en el nivel regional, por cada especie de contaminante.

Consecuentemente, estos modelos son útiles para fuentes múltiples, y en el nivel regional. Los modelos de caja no son útiles para usarse en situaciones donde la meteorología o los patrones de emisión, debido a la carencia en la resolución espacial de la región modelada. También no pueden usarse para fijar la efectividad de estrategias de control que consisten especialmente en emisiones no homogéneas. No pueden usarse a producir la magnitud y localización de concentraciones máximas de productos fotoquímicos en una región dada; sin embargo, los modelos de caja pueden ayudar a calcular un balance de materia sobre una región, para determinar las contribuciones relativas de fuentes, condiciones iniciales y la afluencia de la calidad del aire de una región.

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

Los modelos de trayectoria están basados en las ecuaciones de difusión atmosférica; pues describen el transporte de los contaminantes. Se simula una columna hipotética de aire, limitada en el fondo por el piso y en la cima por la base de inversión, lo cual varía con el tiempo, inyectando las especies contaminantes en la columna. Las reacciones químicas pueden ser simulados en la columna. Las emisiones en tales modelos experimentan un mezclado vertical ascendente más bajas que la célula. Otros modelos de trayectoria permiten solamente una sola capa; en estos modelos, se asume que el mezclado vertical es uniforme e instantáneo. La formulación empleada por estos modelos describen la representación dinámica atmosférica, lo cual abarca la

conservación de masa, o ecuaciones de difusión atmosférica en un sistema de coordenadas en movimiento. Los modelos de trayectoria no pueden ser aplicados en áreas de terrenos ásperos o complejos, donde el viento usualmente tiene una componente vertical significativa y variaciones considerables en la componente horizontal con la altura. Finalmente, los modelos de trayectoria dan resultados solamente en la trayectoria recorrida por los paquetes de aire. Estos modelos no permiten una estimación constructiva de la variación espacial y temporal de concentración sobre la región modelada. No obstante, este modelo evalúa rápidamente los efectos de los cambios en los parámetros de entrada sobre los niveles de contaminantes.

Los modelos de rejilla emplean un sistema de referencia cartesiana fijada en el interior de ésta, lo cual describe la dinámica atmosférica. La región modelada es similar al modelo de caja: es limitado en el fondo por el piso, en la cima usualmente por la base de inversión (o por la altura de mezclado), y en los lados es limitado por los ejes cartesianos este-oeste, norte-sur. Este espacio es subdividido en un orden de dos o tres dimensiones de la célula de la rejilla. Las dimensiones horizontales de cada célula usualmente medida en varios kilómetros, mientras la dimensión vertical y la altura de la base de inversión varían espacial y temporalmente. Algunos modelos asumen solamente una sola rejilla, extendiéndose la célula con respecto al piso a la base de inversión y presenta una mezcla uniforme; otros subdividen la región modelada en un número de capas verticales.

Hay límites prácticos y teóricos al tamaño de la célula, incrementado a su vez el número de células e incrementando los cálculos y datos de adquisición y los costos.

En adición a los cambios de una célula de una rejilla implica que los datos de entrada, tales como el viento, la turbulencia, y las emisiones, son resueltos en esa escala. La base para los modelos de rejilla es la ecuación de difusión atmosférica, lo cual se expresa en la conservación de la masa de cada contaminante en un fluido turbulento en el que ocurren las reacciones químicas. Varios tipos de modelos de rejillas han sido desarrollados, cada uno difiere en el número de procesos físicos y químicos que cuenta de acuerdo con los niveles de sofisticación en el tratamiento de estos procesos y los procedimientos numéricos usados para resolver las ecuaciones de difusión atmosférica. La principal aplicación de los modelos de rejilla ha sido la del ozono fotoquímico. Recientes trabajos se han extendido a modelos de rejilla fotoquímicos.

Los modelos de rejilla han abarcado, en escala regional, el transporte, la dispersión y la depositación ácida de especies contaminantes. Estos modelos, como actualmente están diseñados, no son capaces de resolver la concentración en contaminantes en el nivel de microescala, que es la escala más pequeña que el tamaño de la célula de la rejilla. Así, los efectos locales tales como la reducción de ozono por la reacción con NO cerca de la fuente y la altura de la concentración de contaminantes en la vecindad inmediata de las fuentes puntuales; tienden a volverse obscurecidas por el promedio de concentración de contaminantes sobre el volumen de la célula de rejilla.

Por otra parte, Georgopoulos y Seinfeld(1986a) realizaron una serie de clasificaciones de modelos de plumas en base a la forma en que consideran el proceso de dispersión.

Los modelos de clase I: explican únicamente volúmenes de dispersión inicial reducida ocupados por el punto de la fuente de emisión (menor que la escala de resolución del ADE o de la rejilla computacional de un modelo, en escala urbana. El mezclado es uniformemente en este volumen reducido (perfiles medios planos, sin fluctuaciones a escala fina), los precursores de estos modelos fueron Liu et. al.(1975), McRae et. al.(1982), Forney y Giz(1981), Cocks y Fletcher(1979), Varey et. al.(1978) y Isaksen et. al.(1978). Algunos de estos modelos asumen una pluma con una fuente puntual expandiéndose gradualmente hasta alcanzar el tamaño de una célula computacional. La sección cruzada en expansión se ha asumido en forma circular (Forney y Giz, 1981), rectangular (Liu et. al. 1975) o elíptica (McRae et. al. 1982), McRae et. al (1982) notando que en la determinación de los parámetros de dispersión, la medida de la sección cruzada elíptica debe describir el perfil de la pluma instantánea de la dispersión relativa y no el promedio de tiempo de cobertura de la pluma.

Los Modelos de la clase II explican la parcialidad del volumen expandiendo perfectamente el mezclado (Carmichael y Peters 1981): En este modelo se considera que en cada sección cruzada de la expansión de la pluma (circular) solo una fracción del efluente de la pluma está perfectamente mezclado (perfil plano, sin fluctuaciones) con el ambiente. El resto permanece puro en la fuente del efluente, formando un núcleo rodeado por el material perfectamente mezclado. Este núcleo disminuye conforme se aleja de la fuente. Este proceso de mezclado es visto como un paso pseudo-cinético gobernado por leyes empíricas que involucran una constante de velocidad de mezclado y la concentración de reactantes sin mezclar.

Los modelos de la clase III. En esta clase de modelos, se explica el volumen de dispersión inicial reducido y el campo de concentración no homogéneos (pero no consideran fluctuaciones en escala finas) se dividen en clase IIIA y clase IIIB. La clase IIIA asume un campo homogéneo seccionalmente y la clase IIIB asume campos de concentración gaussianos dentro de los límites de la pluma.

En los modelos de clase IIIA, la expansión del volumen de la pluma es dividido en muchas cajas de sección cruzada de expansión rectangular (sterwar y Liu, 1981; Seigneur et. al. 1983; Hov y Isaksen, 1981), o en anillos concéntricos elípticos (Lusis, 1976; Melo et al. 1978) fue desarrollado por el sistema de óxidos de nitrógeno NO-NO<sub>2</sub>-O<sub>3</sub> basado en un modelo similar por Freiber (1976,1978) quien estudió la oxidación de SO<sub>2</sub> en plumas. El modelo para NO-NO<sub>2</sub>-O<sub>3</sub> permite que el material no presente cambios turbulentos entre anillos adyacentes, conforme las especies químicas contaminantes reaccionen y se alejen de la fuente de emisión se asume que no son influenciados por las fluctuaciones turbulentas a escalas finas, ya que las reacciones químicas de NOx son muy rápidas y reaccionan en unos cuantos segundos.

Peter y Richard(1977) desarrollaron un modelo que pertenece a la clase IIIB. Ellos asumen un perfil gaussiano de concentración de especies y velocidad química infinita, y las concentraciones fluctuantes son completamente ignoradas. Para obtener el perfil de concentración de las especies reactivas (reactante y productos), consideran un conservado escalar lineal (por ejemplo de una variante estequiométrica del sistema reactivo). Las ecuaciones de transporte del conservado escalar es lineal y los resultados se observan en un perfil gaussiano. Por lo que la relación de equilibrio se

usado para obtener la concentración de especies reactivas (lo cual se asume dominantes los valores de concentración media el tamaño de las fluctuaciones son ignoradas). Aunque ciertas limitaciones de la ecuación de difusión atmosférica fueron ignorados (Lamb, 1973; Corrsin, 1974), aún este modelo fue un paso muy importante para los modelos de mezclado perfecto. White(1979) usó el mismo principio al analizar mediciones experimentales. Otro modelo de la clase III es aplicado por Hegg et. al.(1977) en análisis de mediciones experimentales en dos plumas reactivas de reacciones de ozono y óxidos de nitrógeno con diferente tipos de combustible. Ellos asumen que la reacción localizada en los gradientes de concentración más alto de la zona y el desarrollo de aproximación del esquema se obtienen al estimar la evolución del tiempo de la reacción.

En los modelos de clase IV se consideran las fluctuaciones turbulentas pero no se consideran los gradientes de concentración media. Estos modelos fueron estudiados por: Donaldson y Hilst(1972), Bilger(1978), Kewley(1980), y Shu et. al. (1978).

Los estudios de Donaldson y Hilst(1972) fueron los primeros en mostrar cuantitativamente la importancia de las fluctuaciones en escala fina, sobre la química atmosférica no lineal. Bilger(1978) y Kewley(1980) usaron una versión de la probabilidad de densidad de una aproximación conservado escalar, donde estudian la naturaleza del estado fotoestacionario de  $\text{NO-O}_3\text{-NO}_2$ , el sistema de reacciones atmosféricas presentaron un mezclado incompleto. Lamb(1976), Shu(1976 y Shu et. al.(1978) consideraron una fuente de óxido nítrico (NO) en una atmósfera que contenía  $\text{O}_3$ , ignorando los gradientes de concentración media y promediaron sus ecuaciones principales sobre la sección cruzada del volumen de control.

Modelos de la clase V. En este tipo de modelos explican los gradientes de campo medios y las fluctuaciones finas: Borghi(1974), Donaldson y Varma (1976). Algunos de estos modelos están basados en modelos aerodinámicos empleados en combustión. Estos modelos consideran gradientes de campo medios y tratan los términos de fluctuaciones por esquemas cerrados directos (de alto orden). Sin embargo, estas aproximaciones son muy informativas, los modelos son complejos y frecuentemente involucran esquemas de cerradura formulados para condiciones específicas. Así, ellos no pueden ser considerados apropiados para el uso en aplicaciones atmosféricas.

Más tarde, en 1978 Kewley presento una adaptación simplificada de las aproximaciones utilizados en modelos de combustión al problema de plumas reactivas basado principalmente sobre el trabajo de Bilger(1978). Sin embargo, la propuesta involucra ciertos pasos de estas formulaciones, aunque válidas para la mecánica de fluidos debido a la combustión, son definitivamente inapropiadas para condiciones atmosféricas (Georgopoulos y Seinfeld, 1986).

Los modelos de la clase VI. : O'Brien (1980) realiza un estudio en las formulaciones de evolución de densidad de la probabilidad. Esta clase final incluye modelos que por lo menos en principio tratan una caracterización completa de los sistemas reaccionantes a través de la estimación de las densidades de la probabilidad de las concentraciones de las especies que participan en las reacciones químicas. Las ecuaciones de evolución se construyen por las densidades de la probabilidad; sin embargo, esta clase de modelos aún no están desarrollados en una forma que se pudieran utilizar en aplicaciones atmosféricas.

Esta clasificación de modelos muestra que existen muy pocos casos dentro de la categoría de más alta complejidad, la cual se distingue por la inclusión de los efectos de las fluctuaciones turbulentas sobre las reacciones químicas involucradas. Georgopoulos y Seinfeld han mostrado que al ignorar las fluctuaciones de concentración turbulenta para las reacciones de NO-O<sub>3</sub> conducen a la incorrecta simulación de la química de la pluma cerrada a la fuente, pero si la pluma instantánea es suficientemente amplia en una distancia grande viento abajo (downwind), ésta puede ser correctamente simulada.

Sin embargo, Georgopoulos y Seinfeld formularon un modelo de plumas reactivas que toma en cuenta los gradientes de concentración media y las fluctuaciones de escala fina, mientras permanecía el nivel de complejidad del modelo de cerradura de primer orden para la dispersión turbulenta. El modelo toma en cuenta los movimientos de la pluma (elevación flotante y serpeo aleatorio) y los procesos de dispersión instantáneo o local que interactúan con la química. El modelo está basado en una pared dimensional de células advectivas con el campo de viento local, en la cual la dispersión de la pluma es representada por la teoría K para una pluma instantánea. El tratamiento de la química turbulenta descansa sobre una aproximación basada físicamente en el producto de concentraciones media y fluctuante.

La mayoría de los modelos, representan la dispersión, usando alguna forma de difusión o la hipótesis de dispersión gaussiana, dando como resultado una distribución espacio-temporal de las concentraciones que varía suavemente, y cuyos valores se usan para determinar una rapidez de transformación química. Consecuentemente, en este tipo de modelos se ignoran la naturaleza fundamental de la dispersión turbulenta,

es decir, su carácter fluctuante y aleatoria, y por ello resulta importante la búsqueda de un tratamiento más general de los efectos de la turbulencia que pueda ser aplicable a la amplia variedad de modelos de dispersión turbulenta.

En este proyecto se desarrolló un tratamiento alternativo, para la consideración de los efectos turbulentos sobre los procesos de dispersión y transformación química de los contaminantes en la atmósfera, el cual se expone en un modelo numérico de plumas reactivas donde se estimen las concentraciones de Óxidos de Nitrógeno y Óxidos de Azufre provenientes del proceso de combustibles fósiles (combustóleo, gas residual o carbón), el cual constituyen una fuente importante de los óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x = \text{NO} + \text{NO}_2$ ) y óxidos de azufre ( $\text{SO}_2$ ,  $\text{SO}_3$ ).

Los óxidos de nitrógeno se producen durante el proceso de combustión a altas temperaturas, mientras que los óxidos de azufre del contenido de azufre que contiene el combustible, los cuales son emitidos a través de una chimenea junto con otros gases como el dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) y pequeñas concentraciones de hidrocarburos. Aproximadamente el 95% de los óxidos de Nitrógeno corresponden a óxido nítrico ( $\text{NO}$ ), el cual ya en la atmósfera, reacciona rápidamente con el ozono atmosférico produciendo el dióxido de nitrógeno ( $\text{NO}_2$ ) que es uno de los principales precursores del smog fotoquímico. Por otra parte, el 95% de los óxidos de azufre liberados en la atmósfera corresponde a dióxido de azufre ( $\text{SO}_2$ ).

Los óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x$ ) y los óxidos de azufre ( $\text{SO}_x$ ) juegan un papel muy importante en la química atmosférica en escala local, regional y global; consecuentemente, hay un considerable interés en estimar sus emisiones

antrópogenicas en todas las escalas. La importancia de estos contaminantes en la atmósfera ambiental es la elevación de sus contribuciones ácidas de depósitos húmedos y secos (Pruppacher et al. 1983). En la capa más baja de la atmósfera, el NO toma parte en la producción de ozono, lo cual contribuye al efecto invernadero (Fishman et al., 1979; Hameed et al. 1980).

La determinación del impacto sobre la calidad del aire de las emisiones de una planta termoeléctrica, o de cualquier otra fuente de contaminante constituye una tarea muy compleja debido principalmente a la naturaleza turbulenta del movimiento de las masas de aire atmosférico y al conocimiento incompleto de la química de las reacciones químicas que sufren los contaminantes en la atmósfera, así como de los efectos de la turbulencia atmosférica sobre el desarrollo de estas reacciones. Para llevar a cabo esta tarea, es necesario contar con un modelo que establezca una conexión lógica entre las emisiones de la fuente y las concentraciones atmosféricas de las diferentes especies contaminantes, tanto primarias como secundarias. Este modelo debe considerar al menos tres procesos más importantes que determinan el comportamiento de los contaminantes en la atmósfera: El transporte a grandes distancias a través del viento medio, su dispersión en la atmósfera por virtud de la turbulencia de las masas de aire y su transformación química resultante y otras reacciones con las especies que componen la atmósfera en condiciones normales, ya que existen grandes diferencias entre las escalas espaciales y temporales que caracterizan a estos procesos (Janssen et. al. 1990).

Este tratamiento se basa en el acoplamiento de un modelo de gases con interacciones hasta segundos vecinos, el cual permite determinar un campo de viento turbulento

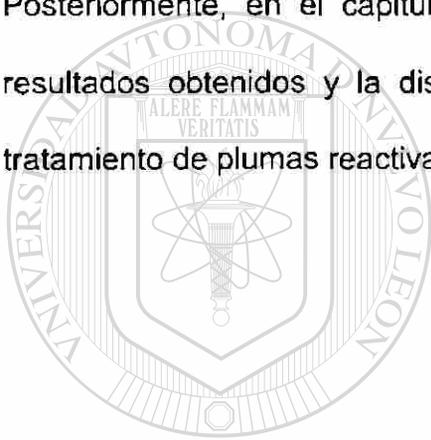
(Salcido 1993-1996); y un modelo reticular de cajas basado directamente en la ecuación 2.1 expuesto en el capítulo 5. Este modelo es conceptualmente muy sencillo, lo mismo que su implementación en la computadora, lo cual se simula una pluma reactiva de NO y SO<sub>2</sub> que se dispersan en una atmósfera de O<sub>3</sub>. Para la validación de modelos de plumas reactivas se han expuestos varios conjuntos de datos experimentales relativos a la química de los óxidos de nitrógeno y el ozono para pluma de fuentes puntuales (Burton et. Al., 1974) y de los cuales, los que probablemente han sido citados con mayor frecuencia son los de Davis et al. (1974) y Hegg et al.(1977). No obstante, la comparación entre los cálculos teóricos y los datos experimentales, por el momento sólo puede considerarse en el nivel cualitativo debido a que en ellos no está completamente la información relativa al estado de la turbulencia del campo de flujo, ni las variaciones de temperatura e intensidad de la luz y ni la presencia de hidrocarburos en la atmósfera, entre otros aspectos. Claramente, para la Validación inicial de un modelo de plumas reactivas, se requiere contar con datos de experimentos de laboratorio bien controlados, donde las incertidumbres derivadas de posibles efectos colaterales hayan sido reducidos al mínimo posible.

## DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Algunos de estos estudios de laboratorio que existen sobre la evolución de plumas reactivas son el de Shea (1977) donde considera un chorro turbulento de ozono en una atmósfera de óxido nítrico, el de Builtjes (1981,1983) que considera una pluma de óxido nítrico en una atmósfera de ozono, sin efectos de flotación, en un túnel de viento que simula una capa límite atmosférica, y el de Komori y Ueda (1984) que considera un chorro de óxido nítrico en un flujo no turbulento de ozono.

Para la comparación de los resultados que proporciona nuestro modelo, se considera conveniente el uso de los datos experimentales de Builtjes que proporcionan toda la información necesaria para configurar el escenario de simulación de nuestro modelo en la computadora, que existen resultados teóricos obtenidos por Georgópoulos y Seinfeld (1986b) usando un modelo diferente y porque predice correctamente la distribución espacio temporal de las concentraciones de las especies expuestas en el Capítulo 6.

Posteriormente, en el capítulo 7, se concluye con un resumen de los principales resultados obtenidos y la discusión de las posibilidades y limitaciones de nuestro tratamiento de plumas reactivas.



# UANL

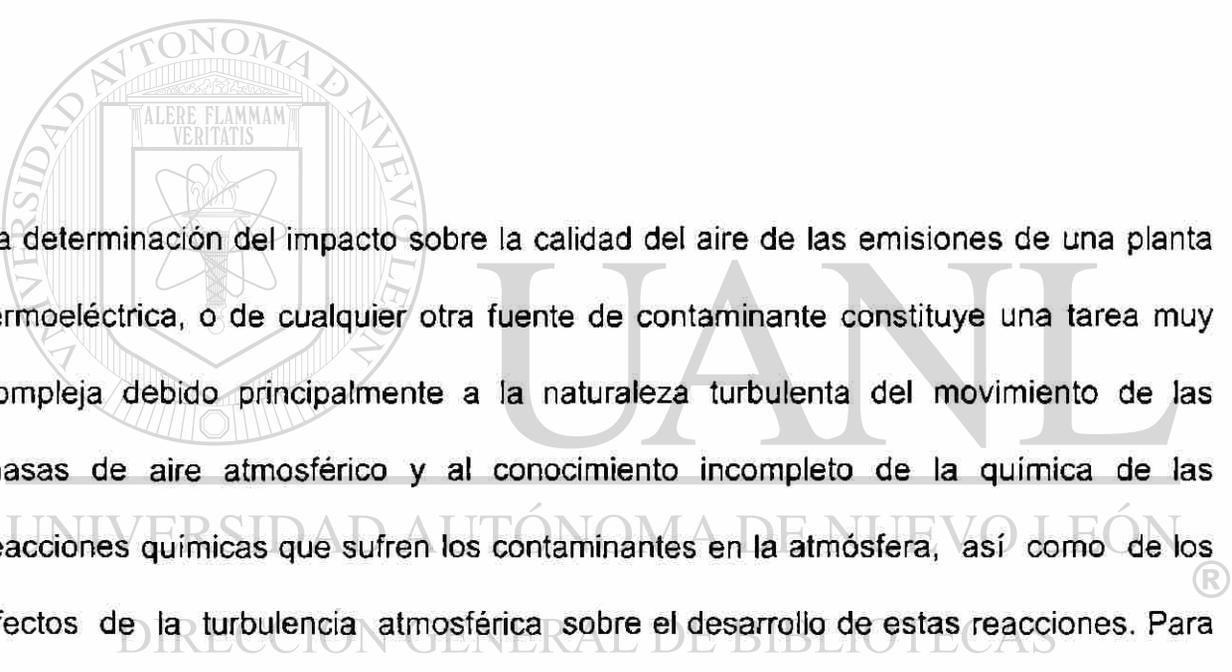
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

## CAPÍTULO 3

### IMPACTO SOBRE LA CALIDAD DEL AIRE, DE LAS EMISIONES DE ÓXIDOS DE NITRÓGENO Y ÓXIDOS DE AZUFRE.



La determinación del impacto sobre la calidad del aire de las emisiones de una planta termoeléctrica, o de cualquier otra fuente de contaminante constituye una tarea muy compleja debido principalmente a la naturaleza turbulenta del movimiento de las masas de aire atmosférico y al conocimiento incompleto de la química de las reacciones químicas que sufren los contaminantes en la atmósfera, así como de los efectos de la turbulencia atmosférica sobre el desarrollo de estas reacciones. Para llevar a cabo esta tarea, es necesario contar con un modelo que establezca una conexión lógica entre las emisiones de la fuente y las concentraciones atmosféricas de las diferentes especies contaminantes, tanto primarias como secundarias.

En este estudio se estudiarán principalmente las emisiones de óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x = \text{NO} + \text{NO}_2$ ) y óxidos de azufre ( $\text{SO}_2, \text{SO}_3$ ) que encadenan una serie de reacciones químicas en la atmósfera, ocasionando un gran impacto sobre la calidad del aire atmosférico.

Es importante realizar un minucioso estudio de impacto ambiental sobre la calidad del aire, que incluya todos los contaminantes que provienen del proceso de combustión, como el bióxido de carbono, los hidrocarburos, las partículas suspendidas, los óxidos de nitrógeno y el dióxido de azufre. Los efectos de una posible contaminación del aire a partir de la quema de combustibles fósiles a altas temperaturas, han provocado el mayor interés como causantes del impacto ambiental.

Los contaminantes emitidos incluyen principalmente dióxido de azufre ( $\text{SO}_2$ ), material particulado, óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x$ ), aldehídos, monóxido de carbono ( $\text{CO}$ ) e hidrocarburos ( $\text{HC}$ ). Además, las emisiones pueden incluir otros elementos contenidos en los combustibles utilizados. En la atmósfera, las reacciones fotoquímicas dan lugar a nuevos contaminantes, como el ozono y el peroxiacetil nitrato ( $\text{PAN}$ ), causantes del smog fotoquímico. El dióxido de azufre y la humedad del aire pueden formar ácido sulfúrico, lo que constituye el origen de las lluvias ácidas. Por otro lado, la quema de combustibles fósiles libera apreciables cantidades de bióxido de carbono y gas que aunque no es tóxico, puede tener un papel muy importante en la formación del efecto de invernadero.

La quema de combustibles fósiles de una planta termoeléctrica puede ser la principal fuente de contaminación aérea. La composición química de los combustibles varía con el tiempo, debido a su origen, en el caso del petróleo y del gas.

Dado que los principales contaminantes atmosféricos surgen en la quema de combustibles fósiles, se sugiere realizar el análisis de impacto por contaminante y no por fuente.

### **Dióxido de Azufre.**

Los mayores problemas ambientales causados por las plantas termoeléctricas son las emisiones de azufre, por el uso de combustibles de petróleo y carbón. El carbón emite una gran cantidad de partículas como hollín. El azufre presente naturalmente en el combustible, se transporta durante la combustión en óxidos de azufre ( $\text{SO}_x$ ). El más común de estos óxidos, es el dióxido de azufre, gas incoloro que puede ser detectado en concentraciones del orden de 1000 a 3000  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ . Por encima de 10000  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , el gas es irritante para el ser humano. Prácticamente, el 95 % del azufre es liberado en forma de  $\text{SO}_2$ .

La emisión de  $\text{SO}_2$  representa un impacto directo de las termoeléctricas sobre la calidad del aire, de manera especial si se considera su naturaleza tóxica. Es además un impacto continuo y con una duración igual a la vida útil de la planta, aunque, su depositación sobre el suelo y la vegetación o su absorción por los animales y el hombre, puede generar efectos a largo plazo o (incluso irreversibles) en el caso de la salud. Sin embargo, la presencia de  $\text{SO}_2$  en el aire puede producir efectos secundarios, el más importante de los cuales es la formación de lluvia ácida. No obstante, los modernos equipos de control, pueden controlar estos problemas e incluso desaparecerlos. Entre esos equipos se encuentran los lavadores de gases. Hoy en día, evitar el impacto ambiental del dióxido de azufre es una cuestión política y económica.

### **Óxidos de Nitrógeno (NO<sub>x</sub>).**

Al contrario de las emisiones de SO<sub>2</sub>, que dependen solo del contenido de azufre del combustible, las emisiones de óxidos de nitrógeno dependen del contenido nitrógeno del combustible, de la temperatura de la flama, del oxígeno en exceso, de la proporción aire/combustible, del nitrógeno presente en el aire de combustión etc. Hay varios óxidos de nitrógeno que se producen en este proceso, pero los más importantes por sus efectos ecológicos son el óxido nítrico (NO) y el dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>).

Las mayores fuentes de NO<sub>x</sub> son los automóviles impulsados por gasolina y las plantas termoeléctricas, que aportan en conjunto el 90% de las emisiones totales. De los óxidos de nitrógeno emitidos, cerca del 95% es óxido nítrico (NO), seguido por el NO<sub>2</sub> y otros óxidos. En atmósferas contaminadas, el NO se transforma en NO<sub>2</sub>, dando inicio a una cadena de reacciones que llevan a producir oxidantes fotoquímicos. Hasta ahora solo los NO<sub>x</sub> emitidos por una chimenea pueden considerarse como un impacto directo susceptible de controlar en los procesos de la planta. La generación de oxidantes fotoquímicos y sus correspondientes efectos constituyen un impacto indirecto o secundario.

De los óxidos de nitrógeno, solo el NO<sub>2</sub> representa peligro para el medio ambiente; sin embargo, sus efectos son difíciles de apreciar, que casi siempre aparecen en combinación con los de los oxidantes fotoquímicos.

### ***Oxidantes fotoquímicos.***

Los oxidantes atmosféricos, principalmente el ozono (O<sub>3</sub>), el peroxiacetil nitrato (PAN) y el dióxido de nitrógeno, son producidos fotoquímicamente a partir de hidrocarburos y de NO, en presencia de la luz solar. Estos oxidantes fotoquímicos son capaces de oxidar reactivos que no son fácilmente oxidados por el O<sub>3</sub>. Sus concentraciones dependen de la concentración de los reactivos y de factores meteorológicos como la intensidad de luz, la temperatura, la humedad y la velocidad del viento. La reacción inicial es la oxidación del NO emitido por los vehículos y por las plantas termoeléctricas, así:



El NO<sub>2</sub> formado, es fotoquímicamente muy activo, pues absorbe luz en casi todo el espectro. Al absorber luz ultravioleta el NO<sub>2</sub> se disocia, formando, entre otros, ozono y PAN, mediante reacciones complejas.

Por ser contaminantes secundarios, los oxidantes fotoquímicos no pueden cuantificarse a partir de emisiones de chimenea. Ellos deben monitorearse y, de ser necesario, sus precursores deben controlarse, lo que es difícil en el caso del NO. Un importante hecho observado recientemente, es la disminución de la concentración de ozono en las plumas de termoeléctricas operadas con alta eficiencia. Esto se debe al

hecho de que el ozono del aire reacciona con el NO de la pluma, dando lugar a NO<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>.

La contaminación atmosférica ha sido objeto de muchos estudios, desde fuentes de emisión de contaminantes, la dispersión de los mismos en la atmósfera y sus efectos en la naturaleza, como estudios de los mecanismos por los cuales se lleva a cabo la formación de tales contaminantes. Muchos de los compuestos contaminantes que son emitidos por la combustión de combustibles fósiles, como por ejemplo: óxidos de azufre (SO<sub>x</sub>), óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>), monóxido de carbono (CO), y partículas suspendidas. Todos ellos adoptan una forma contaminante de acuerdo al grado de su concentración en la atmósfera y de acuerdo a las condiciones del medio en que se encuentran. Es por ello que la Secretaria de Desarrollo Social (SEDESOL) a través de la norma oficial mexicana publicada el 1º de agosto de 1994 en el Diario Oficial de la Federación (NOM-085-ECOL-1994) establece los límites máximos permisibles de emisión a la atmósfera de estos contaminantes.

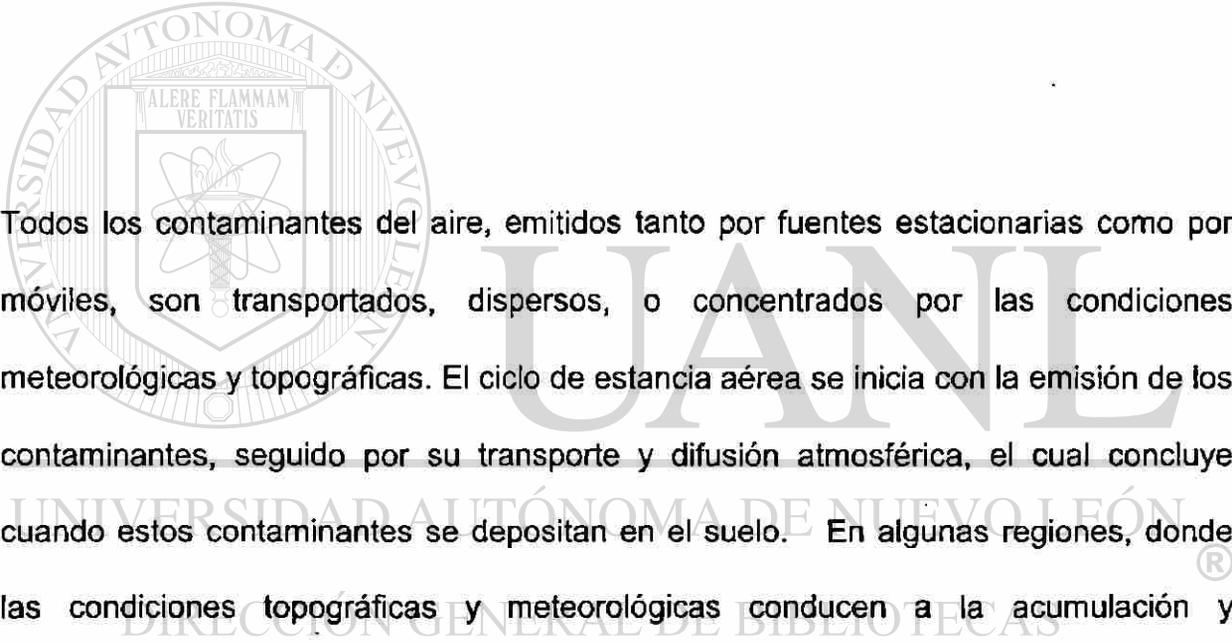
Esta norma, está dirigida principalmente a las zonas de mayor industrialización, la cual se hacen aún más "estrechas", es decir, de acuerdo con el nivel poblacional de industrialización de una zona de la República Mexicana (centro, norte, sur y la zona metropolitana), los límites de emisión de contaminantes son menores en una zona poco industrializada (por ejemplo, el sur de la República Mexicana), que en una zona de mayor industrialización como por ejemplo la zona Metropolitana del D.F. En la tabla 3.1 se muestran los valores de las emisiones de NO<sub>x</sub> y SO<sub>x</sub> en las diversas zonas de la República Mexicana.

	CAP. TERM. EQUIPO DE COMBUSTION (MW)	COMBUSTIBLE	SO <sub>1</sub> (ppmv) (1,2)			NO <sub>2</sub> (1)		
			ZMCM	ZC	RP	ZMCM	ZC (4)	RP
DE  1994	DE: 11.91	LIQUIDO (COMBUSTOLEO)	1100 (7)	2100 (5, 7)	2600 (7)	180 (2, 8)	300 (2, 8)	400 (2, 8)
	A. 30.47	GAS. (GAS NATURAL)						
A  1997	MAYOR DE 30.47	SOLIDO (CARBÓN)	1100 (7)	2100 (5, 7)	2600 (7)			
		LIQUIDO (COMBUSTOLEO)				160 (2, 8)	280 (2, 10)	400 (2, 10)
		GAS (GAS NATURAL)						

Tabla 3.1 muestra los valores de las emisiones de NOx y SOx.

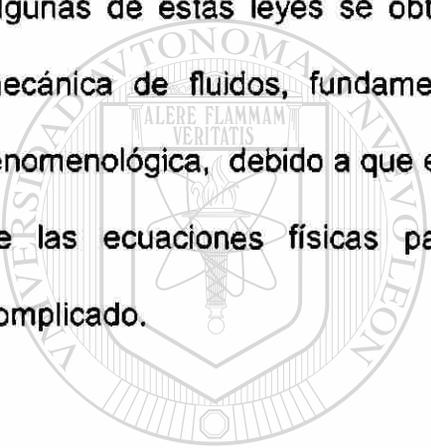
## CAPÍTULO 4

# METEOROLOGÍA EN LA DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES DEL AIRE.



Todos los contaminantes del aire, emitidos tanto por fuentes estacionarias como por móviles, son transportados, dispersos, o concentrados por las condiciones meteorológicas y topográficas. El ciclo de estancia aérea se inicia con la emisión de los contaminantes, seguido por su transporte y difusión atmosférica, el cual concluye cuando estos contaminantes se depositan en el suelo. En algunas regiones, donde las condiciones topográficas y meteorológicas conducen a la acumulación y concentración de contaminantes, como en el caso del Valle de México, los contaminantes pueden acelerar al deterioro de los edificios y afectar la salud pública, así como la vegetación. Durante el periodo en que el viento arrastra los contaminantes, éstos pueden experimentar cambios físicos y transformaciones químicas. Estos procesos se ven influenciados significativamente por diversas variables meteorológicas, que son factores muy importantes para el transporte y la dispersión de contaminantes en la atmósfera.

Las escalas de tiempo y espacio de estos fenómenos varían sobre varias órdenes de magnitud, con respecto a las distancias globales desde turbulencias, tanto de escalas pequeñas como de grandes. Las escalas de tiempo y espacio ayudan al análisis de los contaminantes del aire para comprender el transporte y la difusión de los contaminantes en plumas reactivas. Estos procesos de transporte y dispersión son, en general, bastante difíciles de describir, pues el aire atmosférico sufre movimientos muy complejos que incluso, la mayoría de las veces parecen caóticos. La meteorología es la ciencia que proporciona leyes de la dinámica de la atmósfera. Algunas de estas leyes se obtienen de la física, a partir de la termodinámica y la mecánica de fluidos, fundamentalmente; pero otras se obtienen de una manera fenomenológica, debido a que el problema matemático del planteamiento y la solución de las ecuaciones físicas para el comportamiento atmosférico es sumamente complicado.



U A N L

---

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

#### 4.1 Estructura de la Capa Térmica Atmosférica.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

La estructura de la capa térmica de la atmósfera es el resultado de la radiación solar, los movimientos, la composición del aire, y la radiactividad; que se dan en el interior de la superficie de la tierra. Los procesos de radiactividad mantienen el balance energético del sistema atmósfera-tierra. La atmósfera se puede clasificar en cinco capas térmicas, las cuales se clasifican por su composición química y sus

propiedades físicas; tales como la temperatura y, la densidad. Desde el punto de vista de la dispersión de los contaminantes del aire, la clasificación más importante, se hace sobre la base de la temperatura; las capas pueden ser identificadas como: tropósfera, estratósfera, mesósfera, termósfera y exósfera.

**La tropósfera.** Es la capa más baja, que se extiende en el nivel de piso, a una altitud de 15 km sobre el ecuador y de 10 km sobre los polos. La temperatura desciende con la altura a una velocidad de alrededor de  $6.5^{\circ}\text{C km}^{-1}$ . La convención vertical mantiene el aire relativamente bien mezclado.

**La Estratósfera.** Se extiende de la tropopausa al rededor de 50 km en altitud. La temperatura es constante en la capa más baja de la estratosfera y después se incrementa con la altitud debido a la absorción de radiación de onda-corta por el ozono. Esta capa la temperatura alcanza los 270 °K y presenta poco mezclado vertical.

**Mesósfera.** Se extiende encima de los 50 a 85 km; la temperatura disminuye con la altitud hasta alcanzar 175 °K, el punto más frío en la atmósfera.

**Termósfera.** Es la capa más elevada de la atmósfera. Con densidades moleculares del orden de  $10^{13}$ , comparadas con la densidad del nivel del mar  $2.5 \times 10^{19}$  molécula/cm<sup>3</sup>.

La capa más baja en la atmósfera, la tropósfera, es la más importante para determinar el curso de los contaminantes transportados por el aire. En esta capa hay muchas

subcapas que varían en profundidad, estabilidad y localización en el espacio y en el tiempo. La estabilidad atmosférica de estas subcapas es un elemento importante en los procesos de difusión de los contaminantes.

#### 4.2 La capa límite planetaria (PBL).

Múltiples interacciones y procesos, no todos bien definidos ni bien comprendidos, determinan la complejidad de los fenómenos atmosféricos. La superficie de la Tierra, por ejemplo, tanto en la parte continental como en la marítima, constituye una frontera para la atmósfera que influye fuertemente sobre su comportamiento. Los procesos de transporte de masa, momento y energía modifican las condiciones atmosféricas desde los 100 m hasta los 3000 m de altura, aproximadamente, creando lo que se conoce como la *capa límite planetaria* (en inglés: *Planetary Boundary Layer*, PBL). El resto del aire en la tropósfera se conoce como la *atmósfera libre*.

En realidad, la tropósfera se extiende por arriba de la superficie terrestre hasta una altura aproximada de 11 km; pero ocurre que los efectos de las interacciones de la atmósfera con la superficie terrestre sólo se extiende sobre los primeros dos o tres kilómetros. Debido a ello, la capa límite planetaria (o PBL) se define como *la parte de la tropósfera que se ve directamente influenciada por la superficie terrestre y que reacciona ante las acciones forzantes de superficie, en una escala de tiempo de una*

hora o menos. Tales acciones forzantes se refieren a las fuerzas de rozamiento, la evaporación, la transferencia de calor, las emisiones contaminantes, y los efectos sobre el viento, debidos a la orografía del terreno.

Una prueba de la extensión limitada de los efectos de las acciones superficiales sobre el comportamiento de la atmósfera se encuentra en los perfiles de la distribución de temperatura en la parte más baja de la tropósfera, de los cuales se presenta un ejemplo en la figura 4.1.

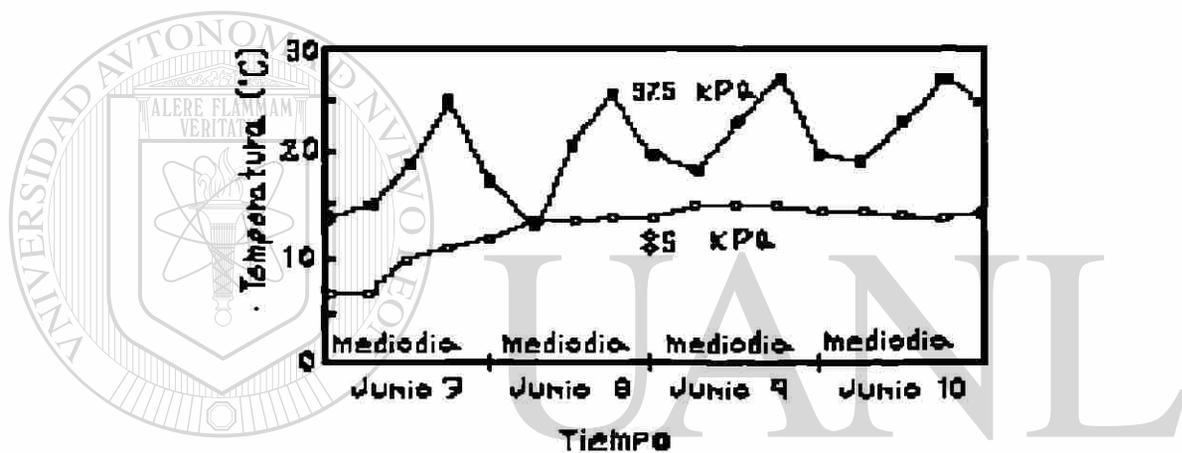
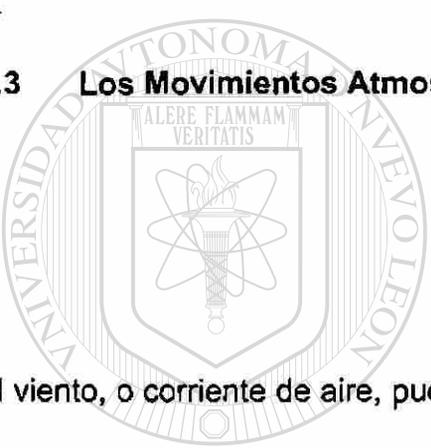


Figura 4.1 Evolución de la temperatura medida del piso y a una altura de 1100m por arriba del mismo.

En esta figura se observa una variación diurna de temperatura cerca del piso, misma que no es evidente a grandes alturas. Dicha variación es una de las características importantes de la capa límite sobre la parte continental de la superficie terrestre. La atmósfera libre muestra pequeñas variaciones diurnas. Esta variación diurna de la temperatura no es causada directamente por la radiación solar que incide sobre la capa límite. De hecho, solamente una pequeña parte de esta radiación es absorbida por ella, el resto es transmitida al piso; el cual, al contar con un coeficiente de

absorción del 90%, absorbe la mayor parte de la energía solar incidente. El piso es lo que se calienta o enfría, como resultado de la radiación solar, y éste a su vez produce los cambios en la capa límite a través de los procesos de transporte. Como se describirá, uno de los procesos de transporte más importante en la capa límite planetaria, es la *turbulencia*, el cual, de hecho, ocasionalmente se utiliza como un criterio para la definición de la PBL.

### 4.3 Los Movimientos Atmosféricos.



El viento, o corriente de aire, puede considerarse como una superposición de tres tipos de movimientos atmosféricos: viento medio, turbulencia, y ondas (ver figura 4.2). Así, para la descripción de los fenómenos de transporte en la atmósfera, cada una de las variables de campo involucradas, tales como la velocidad y la temperatura, se considera como la superposición de dos términos: un campo medio y un campo perturbativo. El campo medio representa el efecto medio resultante de la promediación del campo físico sobre el ensamble de sus posibilidades, mientras que el campo perturbativo representa las desviaciones del campo físico real respecto al campo medio. En este sentido, el viento medio es un ejemplo de un campo medio, en tanto que la turbulencia y las ondas atmosféricas son ejemplos de campos perturbativos que, en este caso, se superponen al viento medio.

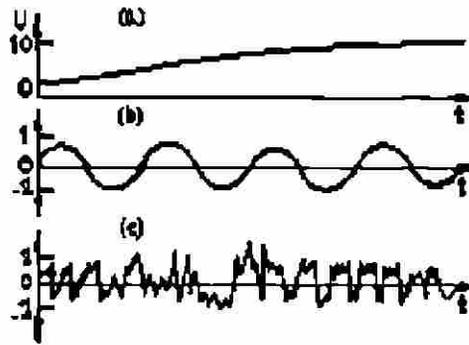


Fig. 4.2 Idealización por separada (a) del viento medio (b) de ondas c) de la turbulencia.

En realidad, tanto las ondas como la turbulencia están superpuestas en el viento medio. Cada uno de estos movimientos atmosféricos pueden existir en la PBL, ya sea por separado o en presencia de los otros. El transporte de humedad, calor, momento y contaminantes ocurre horizontalmente, debido al viento medio, y verticalmente, debido a la turbulencia (Stull, 1989).

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN  
 DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

La *advección*, o transporte horizontal muy rápido, se debe al viento medio, el cual puede tener velocidades que van desde 2 hasta 10 m/s en la PBL, siendo más lento cerca del piso, debido a la fricción. El viento medio vertical ocurre con velocidades del viento muy pequeñas, que van de mm/s a cm/s, normalmente. La variación de la velocidad del viento medio con la altura sobre la superficie terrestre se describe frecuentemente por la relación

$$U(z) = U_0 \left( \frac{z}{z_0} \right)^r$$

donde  $z_0$  es un nivel arbitrario y  $U_0$  es la velocidad del viento que se mide experimentalmente en  $z_0$ . Un típico valor de  $r$  para un terreno plano es  $1/7$ , mientras que para un terreno irregular  $r$  puede tener un valor de más del doble (Zanetti, 1990).

El movimiento atmosférico en forma de ondas se observa con frecuencia durante la noche en la PBL. Estas ondas transportan pequeñas cantidades de calor, humedad y contaminantes, pero son muy efectivas para el transporte de energía y momento. Este tipo de movimiento se genera localmente por los esfuerzos cortantes del viento medio y por el flujo de éste sobre obstáculos. Las ondas atmosféricas también pueden generarse debido a otras fuentes como tormentas y explosiones.

La gran frecuencia con la que ocurre la turbulencia cerca del piso es una de las características que distinguen a la PBL del resto de la atmósfera. Fuera de la capa límite, la turbulencia se encuentra principalmente en las nubes convectivas y cerca de la corriente de chorro (*jet stream*). En ocasiones, las ondas atmosféricas pueden amplificar los esfuerzos cortantes del viento en regiones muy localizadas, y dan lugar a la formación de turbulencia.

La turbulencia puede considerarse como un conjunto de rizos de movimientos irregulares llamados *eddies* o vórtices. En la turbulencia existen vórtices de diferentes tamaños y superpuestos unos sobre los otros. Las intensidades relativas de estos vórtices de escalas diferentes definen el *espectro de la turbulencia*.

La mayor parte de la turbulencia, en la capa límite planetaria, se genera debido a las acciones forzantes del piso. Por ejemplo, el calentamiento solar del piso durante los

días soleados produce corrientes ascendentes de aire caliente, las cuales son, en realidad, partes de vórtices muy grandes. La fricción del aire que fluye sobre el piso provoca vientos cortantes, los cuales frecuentemente se vuelven turbulentos. Los obstáculos como los árboles y los edificios desvían las corrientes de aire produciendo estelas turbulentas detrás del obstáculo, es decir, a sotavento y adyacentes al mismo tiempo.

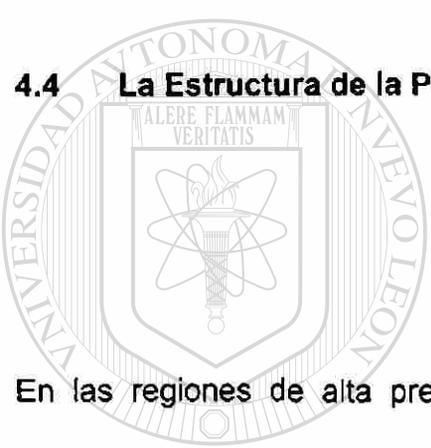
Los vórtices más grandes en la PBL tienen tamaños del orden de la profundidad de ésta, es decir de 100 a 3000 m de diámetro. Estos son los vórtices más intensos porque ellos son producidos directamente por las forzantes antes mencionadas. También existen vórtices de tamaños menores, los cuales se alimentan energéticamente de los más grandes. Los vórtices más pequeños tienen tamaños de unos cuantos milímetros de diámetro y son muy débiles porque se disipan fácilmente por los efectos de la viscosidad molecular.

En cuanto a la capacidad de transporte, la turbulencia es, en varias órdenes de magnitud, más efectiva que la difusión molecular. De hecho, es la turbulencia la que permite que la PBL responda a los cambios producidos por las acciones forzantes de la superficie terrestre; mientras que la falta de turbulencia por arriba de la capa límite hace que la atmósfera libre no sienta los efectos de tales acciones.

Sobre los océanos, la profundidad de la PBL varía en forma relativamente lenta, en el espacio y el tiempo. La temperatura sobre la superficie del mar cambia muy poco en un ciclo diurno, debido al intenso mezclado que ocurre en el interior del océano, cerca de la superficie, debido a que el agua tiene una gran capacidad calorífica, por lo que

puede absorber grandes cantidad de energía del Sol, obteniendo cambios de temperatura relativamente pequeños. De esta manera, una temperatura sobre la superficie del mar que varía muy lentamente también da lugar a acciones forzantes que varían lentamente en la parte más baja de la capa límite planetaria. La mayoría de los cambios de la profundidad de la PBL sobre los océanos se debe a los movimientos de las masas de aire sobre la superficie del mar (Stull, 1989).

#### 4.4 La Estructura de la PBL.



En las regiones de alta presión sobre la superficie continental, la PBL tiene una estructura bien definida que evoluciona con el ciclo diurno y cuyas componentes principales, aunque no las únicas, son la capa de mezcla, la capa residual, y la capa límite estable, como se muestran en la figura 4.3.

La *capa superficial* es la región de la parte más baja de la atmósfera donde los esfuerzos y los flujos turbulentos presentan variaciones de hasta el 10% de su magnitud. Esta capa llega a ser parte de la capa de mezcla o de la capa límite estable.

También existe una capa muy delgada, de unos cuantos centímetros, en la parte más baja de la atmósfera, la cual se caracteriza por el dominio del transporte molecular

sobre el turbulento. Esta pequeña región se conoce como la *capa interfacial* o *microcapa*. Enfocándonos ahora, sobre las tres capas principales. En la capa de mezcla, también llamada capa límite convectiva, se encuentra contenida prácticamente toda la turbulencia atmosférica, la cual se genera por convección. Las fuentes que la originan son el calor transferido desde la superficie terrestre caliente y la radiación refrigerante de la parte alta de las nubes. La primera situación provoca una corriente de aire caliente ascendente y la segunda una de aire frío descendente. Este es el mecanismo dominante para la generación de la turbulencia, pero los esfuerzos cortantes del viento que cruza la parte alta de esta capa también la generan. El efecto de la turbulencia en esta parte de la PBL es el mezclado de calor, la humedad y el momento de manera uniforme en la dirección vertical. Otra característica de la capa de mezcla es que los perfiles de temperatura son casi adiabáticos en su parte media.

En la parte alta de la capa de mezcla existe una pequeña capa estable que actúa como una tapa para las corrientes ascendentes de aire caliente y que restringe el dominio de la turbulencia. Esta región se conoce como la zona de arrastre (*entrainment*). A veces este sombrero que tiene la capa estable es caracterizado por una inversión de la temperatura; esto es, la temperatura aumenta con la altura, y por ello se le llama también capa de inversión. La profundidad de la capa de mezcla se denota por  $z_i$ , y representa la altura promedio de la capa de inversión.

Las fuentes emisoras de contaminantes se encuentran generalmente cerca de la superficie de la tierra, y éstos se acumulan dentro de la capa de mezcla, debido a que la capa estable no les permite dispersarse fuera de la capa de mezcla.

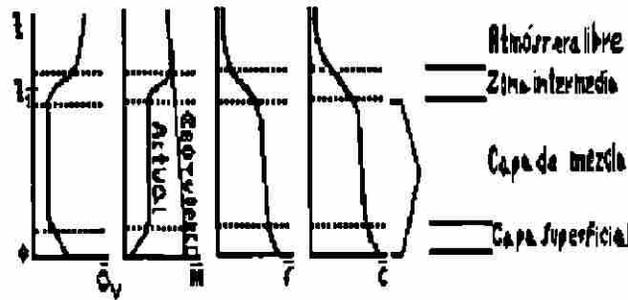


Figura 4.3 Típico perfil diurno del potencial promedio de temperatura  $\bar{\theta}$ ,  
 velocidad del viento  $\bar{M}$ , y concentración de contaminantes  $\bar{z}$ .

Media hora después de la puesta del sol, el flujo ascendente de aire caliente se detiene, permitiendo de esta forma que decaiga la turbulencia, la cual resulta ser cercanamente igual en intensidad hacia todas las direcciones. La región donde esto sucede se llama capa residual. Un resultado interesante es que el humo de las plumas que se dispersan en el interior de esta capa, lo hace en una tasa igual tanto en el nivel vertical como en el lateral, creando una pluma de forma cónica. Esta capa permanece hasta la mañana siguiente, momento en el cual se genera la nueva capa de mezcla.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Variables como la temperatura decrecen lentamente con la altura durante la noche. La tasa de enfriamiento es casi uniforme en la capa residual, haciendo que el perfil de temperatura se mantenga cercano al adiabático.

Conforme la noche progresa, la parte inferior de la capa residual se transforma, debido a su contacto con el piso en la *capa límite estable*. Esta se caracteriza por que el aire conserva una estabilidad poco variable teniendo una turbulencia esporádica. Los

contaminantes emitidos en el interior de esta capa se dispersan poco, verticalmente. Ellos se dispersan, al parecer, mucho más rápido en el nivel horizontal (Stull, 1989).

#### 4.5 Condiciones de Estabilidad de la Atmósfera.

Una de las características más importantes de la atmósfera es su estabilidad; esto es, su tendencia a resistir el movimiento vertical o suprimir la turbulencia existente. Esta tendencia influye sobre la capacidad de la atmósfera de dispersar los contaminantes que se emiten en ella, procedentes de fuentes naturales o antropogénicas. Como vimos anteriormente la distribución vertical de temperatura en las partes bajas de la atmósfera se debe a los efectos de las corrientes de convección producidas por el contacto del aire con el suelo y a la disminución de la presión con la altura.

#### DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Cuando una masa de aire seco se desplaza verticalmente en el seno de la atmósfera, alcanzando capas sometidas a menor presión, se dilata hasta alcanzar la presión de equilibrio, y experimentará una expansión a una temperatura menor; en general, la expansión es tan rápida como para suponer que no existe transferencia de calor entre dicha masa de aire y la atmósfera que la rodea.

Por lo tanto, para una atmósfera en equilibrio convectivo existirá una disminución vertical de la temperatura, a partir de la superficie de la tierra que puede medirse por el

índice  $\alpha = dT/dz$ , llamado coeficiente de enfriamiento adiabático del aire seco, y que representa la disminución  $dT$  de la temperatura correspondiente a una variación de altura  $dz$ .

Finalmente, las condiciones de estabilidad vertical se consideran estables e inestables de la atmósfera. Cuando las condiciones atmosféricas no favorecen el desarrollo de corrientes verticales (o de convección) en el aire, se dice que la atmósfera es "estable"; por el contrario, si tales corrientes tienen lugar libremente en la atmósfera, las condiciones son de inestabilidad. El criterio de estabilidad e inestabilidad depende de la disminución real de temperaturas en el aire con la altura,  $\alpha^* = dT/dz$ , sea mayor o menor que el gradiente adiabático del aire.

Suponiendo que inicialmente hay equilibrio térmico, es decir, que la temperatura  $T_0$  de un elemento de masa de aire que comienza a ascender sea igual a la del aire exterior  $T_0'$ . En un punto 1, situado a una altura  $dz$ , la temperatura de la masa ascendente será  $T_1 = T_0 - \alpha^* dz$ . Por tanto, existirá ahora una diferencia de temperatura dada por la expresión:

$$T_1' - T_1 = (\alpha - \alpha^*) dz$$

Si  $\alpha > \alpha^*$  y  $dz > 0$  (ascenso) resulta  $T_1' > T_1$ , es decir la masa de aire se encuentra a una temperatura inferior a la del ambiente y su densidad es mayor, tendiendo a regresar a su posición inicial. Si  $\alpha < \alpha^*$  y  $dz < 0$  (descenso) resulta  $T_1' < T_1$ , es decir, se encuentra rodeada de aire a menor temperatura, o sea más denso, y por ello tiende a

subir y recuperar la posición original. En cualquier sentido que se separe, el aire vuelve siempre al nivel de partida: hay estabilidad vertical en la atmósfera.

Por el contrario, si  $\alpha < \alpha^*$  y  $dz < 0$  (ascenso) resulta  $T_1' < T_1$ , es decir, la masa del aire se encuentra rodeada siempre de un aire más frío y más denso, y por consiguiente sigue ascendiendo con velocidad creciente, desarrollándose violentas corrientes verticales, en condiciones inestables. Si  $dz > 0$  (descenso) resulta  $T_1' > T_1$ ; en este caso la masa se encuentra rodeada de aire más caliente y ligero y tiende a seguir descendiendo. Por lo tanto, si  $\alpha > \alpha^*$ , el aire separado de su nivel en cualquier sentido tiende a separarse cada vez más: hay inestabilidad vertical en la atmósfera. Las corrientes verticales de aire en una atmósfera inestable transportan el calor de las capas en contacto con el suelo a las capas superiores, y esto da lugar a corrientes de aire frío descendente que se comprimen adiabáticamente aumentando de temperatura. Si este proceso de mezcla convectiva persiste durante algún tiempo, se alcanzan condiciones en que  $\alpha = \alpha^*$ , y por lo tanto  $T_1' = T_1$ ; en tal atmósfera, una masa de aire que se desplaza verticalmente, sobre ella no actúan fuerzas que tienden a volverla a su posición de equilibrio ni tampoco a separarla de esta nueva posición. Se dice entonces que el aire está en equilibrio neutro.

#### 4.6 Principales Aspectos Importantes de la Meteorología en la Dispersión de Contaminantes.

Los mecanismos que rigen los efectos de la meteorología no son nada triviales, pues se halla involucrado como principal protagonista el complejo de la turbulencia. Por otra parte, la dinámica de las sustancias contaminantes inyectadas a la atmósfera es regida casi totalmente por este mecanismo, lo cuál hace que el estudio de la propagación de los contaminantes sea un problema aún más complejo.

Sin embargo, no es el único factor meteorológico que afecta la dispersión de contaminantes; existen varios más, entre los que se encuentran:

- El viento horizontal (rapidez y dirección), el cual es generado por la componente del viento geostrófico, esto es, por el gradiente de presión en la parte superior de la PBL, alterado por contribuciones de las fuerzas de fricción del suelo y por los efectos meteorológicos de los vientos locales.
- La estabilidad atmosférica, esto es, una forma simple de clasificar los estados turbulentos de la atmósfera, los cuales afectan la tasa de difusión de los contaminantes.
- La elevación sobre el nivel del piso.
- La intensidad de la temperatura de inversión la cual limita zi.
- El movimiento vertical de la atmósfera debido a sistemas de alta o baja presión, o a complejos efectos del terreno.

La dispersión vertical y, en menor grado, la horizontal depende de las propiedades de la PBL que son caracterizadas por:

- Las condiciones de estabilidad en la PBL.
- La altura  $z_i$  de la PBL.
- La profundidad  $h$  de la capa de mezcla, esto es el espesor de la región turbulenta más próxima al piso.
- Las irregularidades del terreno.

La estabilidad atmosférica puede ser caracterizada por varios métodos o parámetros, tales como:

- El número de flujo de Richardson ( $R_f$ ), esto es, la relación entre la tasa de disipación de turbulencia (por flotabilidad) y la tasa de creación de turbulencia (por corte), tenemos  $R_f < 0$  para condiciones inestables,  $R_f = 0$  para condiciones neutras y  $R_f > 0$  para condiciones estables.
- El número de Richardson gradientes ( $R_i$ ), que es una variante del número de flujo de Richardson ( $R_f$ ), el cual se determina, ya que depende solamente de variables meteorológicas medias. También aquí tenemos que si  $R_i < 0$  la condición es inestable, si  $R_i = 0$  la condición es neutra y si  $R_i > 0$  tenemos una condición estable.
- El valor crítico de  $R_i$ , que es igual a 0.25. Cuando  $R_i > 0.25$ , la estratificación estable suprime la turbulencia conduciendo a un flujo prácticamente laminar, incluso

en presencia de esfuerzos cortantes del viento. En condiciones inestable, en cambio, cuando el módulo de  $R_i$  es mayor que la unidad se tiene convección libre.

- La longitud de Monin-Obukhov ( $L$ ), que es físicamente puede interpretarse como la altura bajo la cual los efectos de flotabilidad dominan a los efectos de cortes del viento  $M$ , y concentración de contaminantes  $c$ . del viento en la producción de turbulencia. Tenemos que  $1/L < 0$  para condiciones inestable,  $\approx 0$  para condiciones neutral y,  $> 0$  es estable. Por otra parte, tenemos que, en situaciones convectivas, estos términos de producción, boyante y cortante, son aproximadamente iguales en  $z = -0.5 L$ .

En este capítulo hemos mencionado sólo algunos aspectos importantes de la compleja ciencia de la Meteorología, la cual servirá para comprender la dispersión de los contaminantes que estamos estudiando.

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN  
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

## CAPÍTULO 5

# MODELO QUÍMICO MATEMÁTICO PARA LA ESTIMACIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE ÓXIDOS DE NITRÓGENO Y ÓXIDOS DE AZUFRE.

Hoy en día, la contaminación del aire ambiental es un problema que preocupa a todos en el nivel mundial, debido a los severos episodios que han ocasionado en nuestros días, las emisiones de diversas fuentes emisoras tanto fijas, como móviles. México no es la excepción: las grandes urbes metropolitanas y los parques industriales son las fuentes más peligrosas de emisiones contaminantes a la atmósfera.

Numerosos investigadores de diferentes partes del mundo han venido realizando diversos estudios de modelos de plumas reactivas, estimando las concentraciones de las diversas especies de las reacciones químicas y sus transformaciones, tanto primarias como secundarias, de las emisiones contaminantes de fuentes emisoras, y la interacción de estas concentraciones con el mezclado, la dispersión y el transporte de los diferentes contaminantes.

En la mayoría de estos modelos, la dispersión de la pluma se representa usando alguna forma de difusión o la hipótesis de dispersión gaussiana, dando como resultado el espacio temporal suave de las concentraciones. Una característica de estos

modelos es que en ellos se ignora la naturaleza fundamental de la dispersión turbulenta, es decir, su carácter fluctuante y aleatorio.

Debido a lo anterior, exponemos un tratamiento más general de los efectos de la turbulencia sobre los procesos de dispersión de plumas reactivas, el cual puede ser aplicable una amplia variedad de las condiciones atmosféricas. De particular interés, para el caso de las grandes urbes metropolitanas como la Ciudad de México, donde este modelo de dispersión turbulenta de plumas reactivas es aplicable para estimar las contribuciones de las emisiones de óxidos de nitrógeno y óxidos de azufre provenientes de fuentes fijas (como son las centrales termoeléctricas) y la concentración atmosférica de ozono en sus alrededores.



# UANL

## 5.1 Definición e Implantación del Modelo.

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN<sup>®</sup>  
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Como método para la elaboración de nuestro modelo, proponemos un tratamiento radicalmente diferente sobre los procesos de dispersión y transformación química de los contaminantes en la atmósfera.

Este tratamiento se basa en el acoplamiento de un modelo reticular de cajas con un modelo de gases en redes para la determinación de campos de viento turbulento. En nuestro sistema de reacciones químicas consideramos una pluma reactiva de óxidos

de nitrógeno ( $\text{NO}_x = \text{NO} + \text{NO}_2$ ) y óxidos de azufre ( $\text{SO}_2, \text{SO}_3$ ) en la formación de ozono, en la atmósfera.

En este modelo, cada caja de la retícula representa un volumen de control, cada una de las cajas vecinas, y en cada una de las cuales tienen lugar, simultáneamente con los procesos de intercambio de masa, una serie de reacciones químicas entre las diferentes especies de contaminantes.

El principio de nuestro modelo está basado en la ecuación (2.1), la cual representa la difusión turbulenta de las reacciones químicas. De tal manera que si no se consideran los efectos termodinámicos, ni el proceso de elevación de la pluma desde su emisión de la chimenea hasta el momento en que ésta alcanza lo que se conoce como su altura efectiva, el estudio de los procesos de dispersión y transformación química de una pluma reactiva se basa teóricamente en las ecuaciones que resultan de la consideración de los balances de masa de las especies químicas gaseosas que constituye la pluma y la atmósfera en la cual ésta se dispersa. Estas ecuaciones son las siguientes (Bowen, 1976).

$$\frac{\partial \mu_n}{\partial t} + \nabla(\mu_n, v_n) = r_n \quad (5.1)$$

donde  $\mu_n, r_n$  y  $v_n$  son las concentraciones (en masa), la rapidez de producción de masa y la velocidad de rapidez de producción de masa y la velocidad de la especie  $n$  ( $= 0, 1, 2, \dots, N$ ) respectivamente, esta ecuación puede expresarse como

$$\frac{\partial \mu_n}{\partial t} + \nabla(\mu_n, v_n) + \nabla(\mu_n, u_n) = r_n \quad (5.2)$$

El término del lado izquierdo representa el proceso de difusión molecular de la especie “ n “ en el seno de la mezcla de gases, donde  $u_n$  es la velocidad de difusión de la especie. Cuando este proceso es importante, este término se modela generalmente a través de la llamada Ley de Fick ; sin embargo, en el caso de flujos turbulentos como es el caso de los movimientos de las masas de aire de la atmósfera, la difusión o dispersión turbulenta resulta ser el proceso más importante para determinar la distribución espacio-temporal de las concentraciones de las especies químicas involucradas, de tal manera que la ecuación 5.2 puede aproximarse como

$$\frac{\partial \mu_n}{\partial t} + \nabla(\mu_n, v_n) = r_n \quad (5.4)$$

Esta última ecuación constituye directamente la base de nuestro modelo de dispersión de una pluma reactiva. Si aceptamos, como generalmente se hace en todos los modelos de dispersión, que la presencia de las especies gaseosas de la pluma representan una perturbación pequeña, según la dinámica del aire atmosférico, el campo de velocidad baricéntrica o velocidad del centro de la masa del sistema  $v$  expresada en la ecuación 5.5, de la mezcla gaseosa que constituye al sistema pluma-atmósfera puede identificarse simplemente con el campo turbulento de velocidad del viento.

$$v = \frac{1}{\mu_{n=0}} \sum_{n=0}^N \mu_n v_n \quad (5.5)$$

La masa total del sistema lo podemos representar como:

$$\mu = \sum_{n=0}^N \mu_n \quad (5.6)$$

y la velocidad de difusión  $u_n$  de la especie  $n$ , definida por

$$u = v_n - v \quad (5.7)$$

En la mayoría de los modelos de dispersión turbulenta de plumas reactivas como es el caso del modelo de Georgópoulos y Seinfeld (1986a, 1986b), la velocidad  $v$  y la concentración (en masa)  $\mu_n$  de la ecuación (5.4) son expresadas cada una de ellas

como la superposición de una componente media y una fluctuante turbulenta, procediéndose luego a realizar el proceso de promediación de Reynolds de la ecuación resultante. De esta manera se obtiene la ecuación resultante; de la cual posteriormente, se obtienen ecuaciones diferenciales que involucran a los flujos turbulentos, es decir, a las correlaciones entre las fluctuantes turbulentos de las concentraciones y las componentes de velocidad del viento. Para estos nuevos términos se llevan a cabo relaciones fenomenológicas apropiadas para cerrar el sistema de ecuaciones resultante. Finalmente, estas ecuaciones se resuelven usando algún método numérico, tal como el de las diferencias finitas.

El modelo que presentamos es un enfoque radicalmente diferente, trabajando directamente con la ecuación (5.4) y con el apoyo del modelo de gases en redes, lo cual nos proporciona el campo de velocidad de viento completo, es decir, el campo de velocidad que contiene toda la información sobre el viento medio, y la turbulencia atmosférica en la región del espacio donde se dispersa la pluma. Esta región la modelamos como una colección de cajas distribuidas espacialmente de una manera regular sobre una retícula cuadrada. En este modelo, cada una de las cajas representa un volumen de control donde, para cada una de las especies químicas, simultáneamente tienen lugar procesos de intercambio de masa con las cajas vecinas, debido al transporte asociado con el campo de viento y los procesos de producción de masa por las reacciones químicas entre las especies ahí presentes. De esta manera, para cada caja en estudio de nuestro modelo, la concentración " n " al tiempo  $t+\Delta t$  puede expresarse como la suma de la concentración al tiempo  $t$ , y los incrementos  $\phi_n$  y  $\sigma_n$  que sufre esta concentración por virtud de los procesos de intercambio y producción de masa respectivamente, en este periodo de tiempo. Considerando únicamente interacciones con los primeros vecinos, los valores de incremento de masa por intercambio y producción del intervalo de tiempo considerando  $\Delta t$ , de la distancia de separación entre las cajas adyacente  $L$ , la velocidad del viento  $v$  y de la concentración  $\mu_n$  de las especies contenidas en la caja en observación y en las cajas vecinas, de tal suerte que

$$\mu_n(t + \Delta t) = \mu_n(t) + (J_n^e - J_n^s) \Delta t/L + r_n \Delta t \quad (5.8)$$

De la ecuación (5.4), los procesos de intercambio y producción de masa están representados por los términos  $\nabla(\mu_n v)$  y  $r_n$ , respectivamente; y de hecho, para intervalos de tiempo suficientemente pequeños, se tiene que

$$\phi_n = - \nabla(\mu_n v) \Delta t \quad (5.9)$$

$$\sigma_n = r_n \Delta t \quad (5.10)$$

De tal manera que la concentración de los contaminantes a través del tiempo se determina realizando un minucioso análisis de intercambio de masa de las diversas especies químicas y los procesos simultáneos de las diferentes reacciones químicas presentes en la pluma; donde el viento juega un papel muy importante en esta región de la pluma, ya que provoca diferentes procesos como el de mezclado, dispersión y transporte de los contaminantes contenidos en la pluma, y así como también ayuda a que se lleven a cabo más rápidamente las reacciones químicas.

Por todo esto, el problema más importante con este enfoque lo constituye la determinación de un campo de velocidad del viento que contenga no sólo la información relativa al viento medio, sino también aquella que se refiere a la naturaleza fluctuante y aleatoria de la turbulencia atmosférica. Para superar este inconveniente, hemos utilizado un modelo de campo de viento (ARIANNA) desarrollado en el Instituto de Investigaciones Eléctricas, (IIE), en Cuernavaca, Mor. México, mediante técnicas de gases en redes y autómatas celulares (Salcido, Merino y Saldaña, 1993; Salcido 1995), el cual tiene la virtud de proporcionar un campo de velocidad con tales

características (Salcido, 1996; y Saldaña, 1996). Este modelo será descrito brevemente en este trabajo, ya que no es un objetivo de este estudio.

## 5.2 Modelo de Campo de Viento ARIANNA.

Este modelo fue desarrollado en el Instituto de Investigaciones Eléctricas, en el departamento de sistemas de combustión para el estudio de fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes, el cual realiza un diagnóstico del campo de viento (Salcido, 1995).

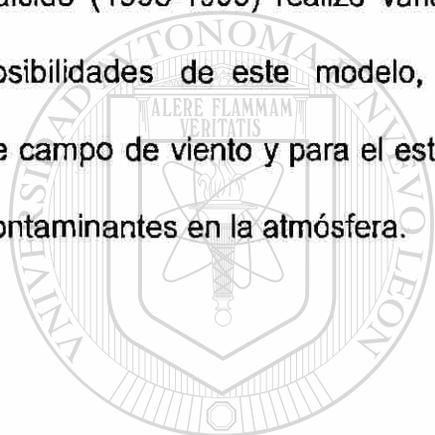
El corazón de ARIANNA lo constituye un modelo discreto de un gas construido usando las técnicas de gases en redes y autómatas celulares; estas dos herramientas básicas para este modelo lo mencionaremos a continuación: Los sistemas de gases en redes, consisten de una retícula regular cuyos sitios pueden tener un número entero y finito de estados ya que presenta la dirección de movimiento de las partículas de gas, y evolucionan en pasos temporales discretos de acuerdo con un conjunto de reglas locales y homogéneas que definen la dinámica del sistema. Estas reglas son definidas desde el inicio para satisfacer los principios físicos fundamentales de la conservación de la masa, el momento y la energía durante la propagación y las colisiones de las partículas en el modelo. Con respecto a los autómatas celulares, éstos son sistemas dinámicos totalmente discretos, los cuales evolucionan en un

espacio-tiempo discreto y sus estados posibles constituyen también un conjunto discreto.

ARIANNA, como mencionamos anteriormente, hace uso de los métodos de autómatas celulares para modelar un gas con dos componentes químicos no reactivos, que evolucionan sobre un terreno complejo y en presencia de un campo de fuerzas externas. El modelo es una extensión de gas de nueve velocidades (Salcido, y Rechtman (1991)). Está definido sobre una retícula cuadrada bidimensional que tiene asignada una variable de estado booleano en cada uno de sus sitios. El valor de esta variable indica la presencia o ausencia de partículas indistinguibles y de masa unitaria en el sitio considerado, las cuales pueden encontrarse en reposo o moviéndose a lo largo de los ejes de coordenadas o en las direcciones diagonales (a 45 grados respecto a los ejes). Si se consideran solamente interacciones hasta segundos vecinos, y si los pasos temporal y espacial del sistema se consideran iguales a la unidad, las partículas del gas del modelo podrán moverse solamente con velocidades de magnitud 0, 1, o  $\sqrt{2}$ . La dinámica de este sistema está definida por tres generadores locales T, C y B que, para cada sitio de la retícula, determinan el estado al tiempo  $t+1$ , a partir de los estados al tiempo  $t$  que existen en los sitios de una velocidad dada del sitio considerado; la cual incluye al sitio mismo y a sus primeros y segundos vecinos. Los operadores T y C gobiernan respectivamente, la propagación libre y las colisiones de las partículas bajo las construcciones impuestas por los principios de conservación de la masa, el momento y la energía. El operador B, por su parte, gobierna las colisiones de las partículas del gas modelo contra fronteras sólidas fijas, garantizando solamente la conservación de la masa y la energía.

Por otra parte, cabe observar que en este modelo de gas las partículas obedecen aún principio de exclusión en el sentido de que en un sitio dado no es posible encontrar dos partículas moviéndose en la misma dirección. Debido a esto, desde el punto de vista de la mecánica estadística, el modelo de gases en redes ARIANNA lo constituye un sistema de fermiones con tres niveles de energía, dos de los cuales están cuádruplamente degenerados.

Salcido (1993-1996) realizó varias simulaciones en computadora que muestran las posibilidades de este modelo, el cual es una herramienta para la reconstrucción de campo de viento y para el estudio de los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera.



UANL

### 5.3 Modelo Reticular de Cajas.

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN®  
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Como mencionamos anteriormente, el sistema que hemos considerado en nuestro modelo está constituido por la región del espacio de la pluma donde tiene lugar los procesos de emisión, transporte, dispersión y transformación química de la pluma en cuestión. Esta región es modelada como una colección de cajas (o volúmenes de control) de tamaño finito; cada una de las cajas intercambian masa de las diferentes especies químicas con las cajas vecinas, y en cada una de las cuales tienen lugar,

simultáneamente con los procesos de intercambio de masa, un número finito de reacciones químicas entre las diferentes especies involucradas. El intercambio de masa entre las diferentes cajas es gobernado por el campo de viento, el cual se supone previamente conocido, mientras que la producción de masa de cada especie en cada caja es determinada por las reacciones químicas en las que participan, las concentraciones de las especies en cuestión y de las especies involucradas en tales reacciones. De esta manera, el proceso de actualización de las concentraciones en cada caja en cada paso temporal del sistema viene dado por la ecuación (5.8).

$$\mu_n(t + \Delta t) = \mu_n(t) + (J_n^e - J_n^s) \Delta t/L + r_n \Delta t$$

donde  $\phi_n$  y  $\sigma_n$  en el límite de pequeños intervalos de tiempo y pequeño volumen de control están dados por

$$\phi_n = - \nabla(\mu_n \nu) \Delta t$$

$$\sigma_n = r_n \Delta t$$

#### 5.4 Modelo de Intercambio de Masa.

Es una tarea compleja realizar el análisis de intercambio de masa de las diferentes especies químicas de nuestro sistema de reacciones entre la caja de observación y sus vecinas, debido a que se realiza un balance de masa donde interviene la parte física y química; nosotros lo analizaremos de una manera diferente, primero nos ubicaremos en la caja de observación y sus primeros vecinos, la cual es parte de la retícula de cajas de nuestro sistema, la caja de observación la indicamos como (c) cuyas coordenadas corresponden (ij), los primeros vecinos a la caja de observación serán identificadas por la caja (1) con coordenadas (i+1,,j); caja (2 ), (i, j+1); caja (3), (i-1,,j), y caja (4), (i,,j-1).

En la caja ( c ) los cuatro puntos cartesianos que apuntan a las cajas vecinas estarán indicados por un vector unitario (  $\hat{e}$  ) donde  $\hat{e}_1$  indica la dirección Este;  $\hat{e}_2$ , la Sur;  $\hat{e}_3$ ; la Oeste,  $\hat{e}_4$ , la Norte, cada una de las cajas de la retícula representa un volumen de control; donde, para cada una de las especies químicas, simultáneamente tienen lugar procesos de intercambio de masa con las cajas vecinas, debido al transporte asociado con el campo de viento y procesos de producción de masa por las reacciones químicas entre las especies ahí contenidas, cada una de las cajas tienen sus respectivas componentes  $u$ ,  $v$  la cual representa la dirección del vector velocidad  $V$  en la dirección " x " y " y " respectivamente. Los contaminantes primarios son emitidos en

la retícula de cajas por una sola fuente dentro de la región modelada, las especies contaminantes se dispersaran a lo largo de la pluma, la concentración de cada una de las especies se analizaran en función de la densidad, llamada concentración (en masa) simbolizada por  $\mu$ .

En las tablas 5.1a y 5.1b se muestran las variables para la caja en observación y los primeros vecinos. La figura 5.1 ilustra nuestro sistema de estudio.

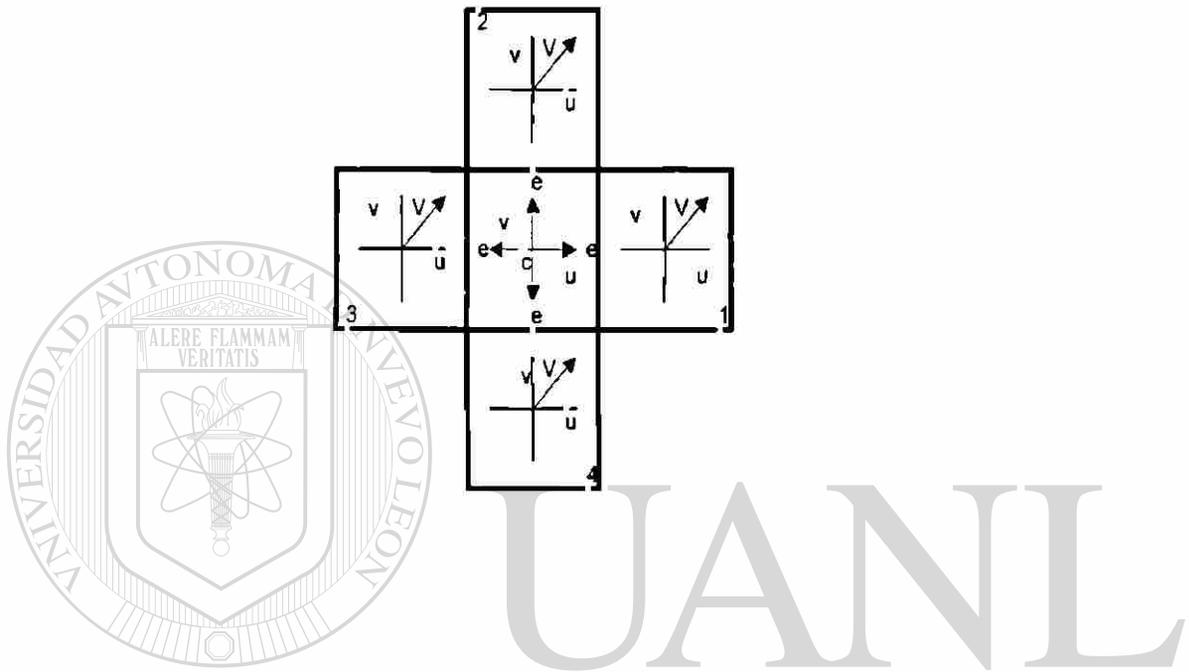
vector $\hat{e}$	Concentración (en masa) $\mu$	Componentes de velocidad
$\hat{e}_1 = (1,0)$	$\mu_c = \mu_{ij} \mu_{\mu c}$	$u_c = u_{ij}$
$\hat{e}_2 = (0,1)$		$v_c = v_{ij}$
$\hat{e}_3 = (-1,0)$		
$\hat{e}_4 = (0,-1)$		

Tabla 5.1a Variables de la caja en observación

Vector velocidad $V$	Concentración(en masa) $\mu$
$V_1 = V_{(i+1,j)}$	$\mu_1 = \mu_{(i+1,j)} \mu_{\mu}$
$V_2 = V_{(i,j+1)}$	$\mu_2 = \mu_{(i,j+1)}$
$V_3 = V_{(i-1,j)}$	$\mu_3 = \mu_{(i-1,j)}$
$V_4 = V_{(i,j-1)}$	$\mu_4 = \mu_{(i,j-1)}$

Tabla 5.1b variables de las cajas vecinas con respecto a la caja de observación.

Figura 5.1 ilustración del sistema de estudio.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

Donde: DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

$\hat{e}$  = vector unitario

$\mu_n$  = concentración (en masa)

$u_n, v_n$  = componentes de velocidad

$V$  = vector velocidad

$c$  = indica que la caja está ubicada en el centro del sistema.

El siguiente paso a seguir, es realizar el análisis del producto escalar  $V_n \cdot \hat{e}_n$  el cual nos indica la dirección de la componente de velocidad de las cajas vecinas con respecto a la caja de observación

$$V_1 \cdot \hat{e}_1 = (u_1, v_1) \cdot (1, 0) = u_1$$

$$V_2 \cdot \hat{e}_2 = (u_2, v_2) \cdot (0, 1) = v_2$$

$$V_3 \cdot \hat{e}_3 = (u_3, v_3) \cdot (-1, 0) = -u_3$$

$$V_4 \cdot \hat{e}_4 = (u_4, v_4) \cdot (0, -1) = -v_4$$

Si  $V_n \cdot \hat{e}_n > 0$  Nos indica que las cajas vecinas a la de observación, no contribuyen en el intercambio de masa.

Si  $V_n \cdot \hat{e}_n < 0$  Nos indica que las cajas vecinas a la de observación, si contribuyen en el intercambio de masa.

El segundo paso es determinar la masa total que aportan las cajas vecinas a la de observación y se realiza mediante el producto escalar y la concentración (en masa).

$$J_n^e = - \sum_{n=1}^{4(-)} \mu_n V_n \cdot \hat{e}_n \quad (5.11)$$

El tercer paso, es determinar la masa que sale de la caja en observación a los vecinos más próximos, se realiza en base a la concentración (en masa) y las componentes de velocidad en la caja en cuestión.

$$J_n^s = \mu_c ( |u_c| + |v_c| ) \quad (5.12)$$

Donde  $J_n^e$  y  $J_n^s$  son , respectivamente, la masa de la especie " n " que la caja en cuestión recibe de sus vecinas y la masa de esa misma especie que sale de ella.

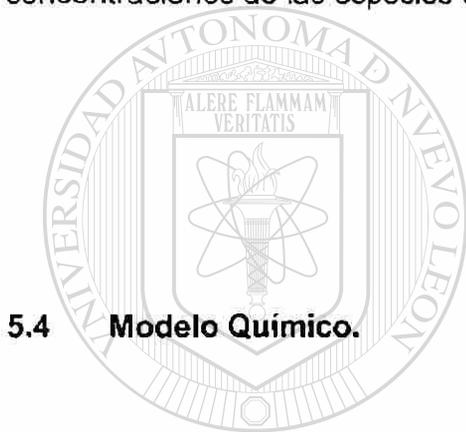
El modelo de intercambio de masa de las diferentes especies químicas entre una caja y sus vecinas está determinado por los valores de las velocidades, las concentraciones de las especies en dicha caja y sus vecinas. Si estas velocidades son pequeñas, en comparación con la velocidad característica definida por  $U=L/\Delta t$ . Aquí " L " es la distancia de separación entre las cajas adyacentes y  $\Delta t$  que es el paso temporal, donde el intercambio de masa tendrá lugar, solamente a primeros vecinos.

$$\phi_n ( \mu_n^* , v , \Delta t, L ) = ( J_n^e - J_n^s ) \frac{1}{U} \quad (5.13)$$

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN  
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

donde  $J_n^e$  y  $J_n^s$  son respectivamente, la masa de la especie (n) que la caja en cuestión recibe de sus vecinas y la masa de esa misma especie que sale de ella, por unidad de tiempo. Estos términos pueden calcularse directamente, en una primera aproximación, usando los promedios espaciales de las velocidades y las concentraciones de las especies contenidas en tales cajas. Cabe observar, sin embargo, al igual que en el caso del modelo de producción de masa por reacciones químicas, que las correlaciones espaciales derivadas de la no-uniformidad de las distribuciones espaciales reales de las propiedades en cada caja del sistema determinarán en qué medida esta aproximación es válida. Finalmente, cabe

mencionar también, que los promedios espaciales a los aquí hemos hecho referencia no son lo mismo que las componentes medias de las variables turbulentas en la descomposición de Reynolds; de hecho, en nuestro caso, cada caja tiene asignada, por ejemplo, una velocidad turbulenta " $v$ ", la cual puede describirse en términos de una velocidad media " $u$ " y una desviación estándar " $\sigma_v$ ", que representa al carácter turbulento de la velocidad, y es esta velocidad la que se considera para realizar los procesos de intercambio de masa entre las cajas del sistema. De manera análoga se consideran las variables de campo que describen las distribuciones espaciales de las concentraciones de las especies químicas involucradas en el problema.



#### 5.4 Modelo Químico.

# UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

La química de los contaminantes atmosféricos constituye un problema muy complejo (Seinfeld, 1986), de tal suerte que los modelos existentes para la simulación de plumas reactivas llegan a incluir del orden de cien especies químicas (Seigneur et al, 1986). Uno de los principales contribuyentes de especies contaminantes atmosféricas son las plantas termoeléctricas, por el uso de combustibles fósiles, como es el combustóleo, el gas natural y el carbón. En ellas se producen y emiten a la atmósfera, a través de la chimenea, diferentes cantidades de compuestos de azufre (dióxidos, trióxidos de azufre), óxidos de nitrógeno y pequeñas concentraciones de hidrocarburos (McRae et

al. 1975). Llevándose a cabo las diferentes reacciones químicas, en el transcurso del transporte y dispersión en pequeña y en gran escala.

Debido a que la combustión se realiza con grandes cantidades de aire, el cual tiene alto contenido de Nitrógeno, a altas temperaturas en el proceso de combustión, se originan gases de óxido nítrico (NO). Ellos son muy reactivos con el ozono atmosférico, produciendo dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>), el cual es un contaminante muy tóxico y precursor del smog fotoquímico.

De igual manera que las transformaciones químicas dominantes de la pluma, a poca distancia de la fuente, se lleva acabo el ciclo fotolítico NO-NO<sub>2</sub>-O<sub>3</sub> definido por las reacciones.



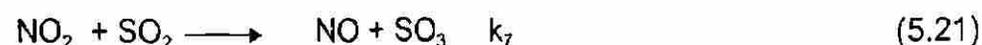
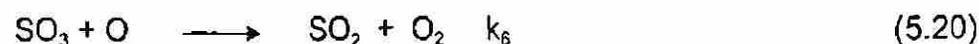
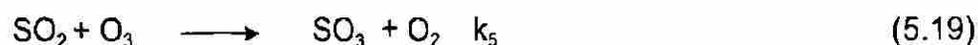
Por otra parte, las reacciones de óxidos de azufre (SO<sub>2</sub>, SO<sub>3</sub>), predominan a distancias muy grandes, respecto a la fuente e incluso llegan a traspasar las fronteras nacionales, debido a que sus velocidades de reacción son muy lentas; sin embargo, cuando se encuentran en presencia de los óxidos de nitrógeno y luz solar su velocidad de

oxidación se incrementa aproximadamente diez veces más (Urone et al., 1968; Wilson and Levy, 1970) en un aire limpio, por lo cual no sólo el  $O_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  compiten fuertemente por los átomos de oxígeno, sino que también los compuestos de Azufre ( $SO_x$ ), tienen tendencia a reaccionar rápidamente con éste. Las reacciones que se lleva a cabo son:  $SO_2-O$  y  $SO_3-O$  (Mulcahr, M.F, Stevens, 1967). Así también los  $SO_x$  tienen tendencia a reaccionar con el ozono proveniente de la reacción de la molécula y los átomos de oxígeno.

Las constantes de velocidad para estas reacciones son más pequeñas, que para la reacción de átomos de oxígeno con  $NO$  y  $NO_2$ ; este tipo de reacciones necesitan un espacio temporal muy grande para que se lleven a cabo, comparado con los compuestos de Nitrógeno.

En la oxidación el  $SO_2$  reacciona también en presencia de catalizadores como el  $NO_2$  (dióxido de Nitrógeno), el cual está presente en el proceso de combustión a altas temperaturas (Boreskov and Illarionov 1940).

## DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



hidrocarburos y los radicales que ya se encuentren presentes en la atmósfera. Sin embargo, como nuestro interés es determinar cuál es la responsabilidad en cuanto al deterioro de la calidad del aire y la producción de ozono por las emisiones de una fuente puntual que contiene óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x = \text{NO} + \text{NO}_2$ ) y óxidos de azufre ( $\text{SO}_2, \text{SO}_3$ ), para nuestro análisis suponemos una atmósfera limpia y en ausencia de otras fuentes contaminantes, pues la consideración de una atmósfera contaminada desde el inicio, implica también la consideración de responsabilidades compartidas en relación al deterioro de la calidad del aire.

Asumiendo que sólo estas ocho reacciones químicas contribuyen al deterioro de la calidad del aire, el mecanismo de reacción definido en el balance de masa, se presentan ocho especies en el comportamiento de la pluma: ( $\text{NO}, \text{NO}_2, \text{O}_2, \text{O}, \text{O}_3, \text{M}, \text{SO}_2$  y  $\text{SO}_3$ ). En cada reacción, el término de producción de masa de cada una de las especies involucradas se suponen concentraciones proporcionales de los reactivos.

Para determinar la rapidez de producción de masa, realizamos el siguiente análisis.

### DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

1. Determinar la velocidad de cambio de las especies químicas presentes, por unidad de tiempo.
2. Convertir las unidades de concentración de ppm que nos proporciona el paso en (1) a las unidades correspondientes de producción de masa de la especie, por unidad de volumen y por unidad de tiempo =  $r_n$

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = -2k_6[\text{NO}][\text{O}_3] + k_1[\text{NO}_2] - k_1[\text{NO}][\text{O}_3] + k_7[\text{NO}_2][\text{SO}_2] \quad (5.22)$$

Producción de masa es:

$$r_{NO} = \left( [\dot{NO}] \right) \left( \frac{PM_{NO}}{V} \right) \quad (5.23)$$

Donde:

$$[\dot{NO}] = \frac{d[NO]}{dt}$$

3. - Derivando la ecuación (5.23) y ordenando términos.

$$r_{no} = PM \frac{d}{dt} \left( \frac{[NO]}{V} \right) = PM \left\{ \frac{[\dot{NO}]}{V} - \frac{[NO]\dot{V}}{V^2} \right\} = [\dot{NO}] \frac{PM}{V} - [NO] \dot{V} \left( \frac{PM}{V^2} \right) \quad (5.24)$$

Reordenando términos.

$$r_{no} = PM \left\{ \frac{[\dot{NO}]}{V} - \frac{[NO]\dot{V}}{V^2} \right\} = [\dot{NO}] \frac{PM}{V} - [NO] \dot{V} \left( \frac{PM}{V^2} \right) \quad (5.25)$$

Ahora, sustituimos la ecuación 5.25 en 5.22 y tenemos la producción de masa o rapidez de producción de masa ( $r_n$ ) de la especie por unidad de Volumen ( $V$ ) y por

unidad de tiempo. Realizando el mismo análisis para todas las especies involucradas en nuestro sistemas de reacciones químicas.

$$r_{w_0} = \left( -2k_1[NO][O_2]^2 + k_1[NO_2] - k_2[NO][O] + k_3[NO_2][SO_2] \right) \left( \frac{PM_{w_0}}{V} \right) - [NO] \dot{V} \left( \frac{PM_{w_0}}{V^2} \right) \quad (5.26)$$

$$r_{w_2} = \left( 2k_1[NO][O_2]^2 - k_1[NO_2] + k_2[NO][O] - k_3[NO_2][SO_2] \right) \left( \frac{PM_{w_2}}{V} \right) - [NO_2] \dot{V} \left( \frac{PM_{w_2}}{V^2} \right) \quad (5.27)$$

$$r_{o_1} = \left( -2k_1[NO][O_2]^2 - k_2[O][O][M] + k_2[NO][O] + k_3[SO_2][O] \right) \left( \frac{PM_{o_1}}{V} \right) - [O] \dot{V} \left( \frac{PM_{o_1}}{V^2} \right) \quad (5.28)$$

$$r_{o_2} = \left( k_1[NO_2] - k_2[O][O][M] - k_3[SO_2][O][M] - k_4[SO_2][O] \right) \left( \frac{PM_{o_2}}{V} \right) - [O] \dot{V} \left( \frac{PM_{o_2}}{V^2} \right) \quad (5.29)$$

$$r_{o_3} = \left( k_2[O][O][M] - k_1[NO][O_2] - k_3[SO_2][O] \right) \left( \frac{PM_{o_3}}{V} \right) - [O] \dot{V} \left( \frac{PM_{o_3}}{V^2} \right) \quad (5.30)$$

$$r_{m_1} = \left( k_2[O][O][M] - k_2[O][O][M] + k_3[SO_2][O][M] - k_4[SO_2][O][M] \right) \left( \frac{PM_{m_1}}{V} \right) - [M] \dot{V} \left( \frac{PM_{m_1}}{V^2} \right) \quad (5.31)$$

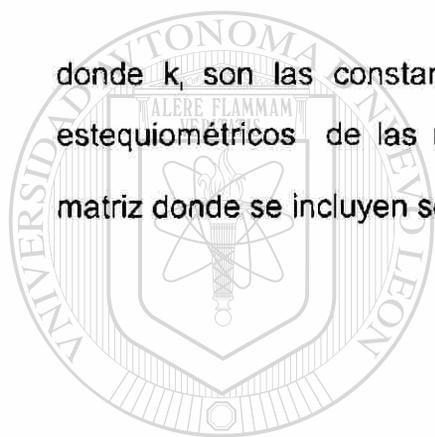
$$r_{s_1} = \left( -k_3[SO_2][O][M] - k_4[SO_2][O] + k_4[SO_2][O] - k_5[NO_2][SO_2] \right) \left( \frac{PM_{s_1}}{V} \right) - [SO_2] \dot{V} \left( \frac{PM_{s_1}}{V^2} \right) \quad (5.32)$$

$$r_{s_2} = \left( k_3[SO_2][O][M] + k_4[SO_2][O] - k_4[SO_2][O] + k_5[NO_2][SO_2] \right) \left( \frac{PM_{s_2}}{V} \right) - [SO_2] \dot{V} \left( \frac{PM_{s_2}}{V^2} \right) \quad (5.33)$$

Representando las ecuaciones de la producción de masa de cada una de las especies para la  $\alpha$ -ésima especie se puede escribir

$$r_n = - \sum_{i=1}^{N_r} R_{ni} k_i \prod_{B=0}^N (\mu_B)^{R'_{Bi}}$$

donde  $k_i$  son las constantes de velocidad,  $R_{ni}$  es la matriz de los coeficientes estequiométricos de las reacciones consideradas y  $R'_{Bi}$  es la restricción de esta matriz donde se incluyen solamente los coeficientes de los reactivos.



# UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

## CAPITULO 6

### ANÁLISIS DE RESULTADOS Y VALIDACION DEL MODELO QUIMICO MATEMATICO.

#### 6.1 Resultados y Validación del modelo en base a la información disponible en la bibliografía consultada.

Existen varios conjuntos de datos experimentales relativos a la química de los óxidos de nitrógeno y el ozono para plumas de fuentes puntuales (Burton et al, 1983), de los cuales, los que probablemente han sido citados con mayor frecuencia son los de Davis et al. (1974) y los de Hegg et al. (1977). No obstante, la comparación entre los cálculos teóricos y los datos experimentales, por el momento sólo puede considerarse en el nivel cualitativo, debido a que en ellos no está completa la información relativa al estado de la turbulencia del campo de flujo, a las variaciones de temperatura e intensidad de la luz y a la presencia de hidrocarburos en la atmósfera, entre otros aspectos. Claramente, para la validación inicial de un modelo de pluma reactiva se requiere contar con datos de experimentos de laboratorio bien controlados, donde las incertidumbres derivadas de posibles efectos colaterales hayan sido reducidas al mínimo posible.

Algunos de los estudios de laboratorio que existen sobre la evolución de plumas reactivas son el de Shea (1977) donde considera un chorro turbulento de  $O_3$  en una atmósfera de NO, el de Bultjes (1981,1983) que considera una pluma de NO en una atmósfera en condiciones neutrales, el de Komori y Ueda(1984) para un chorro de NO en un flujo no turbulento de  $O_3$ .

Para la comparación de los resultados que proporciona nuestro modelo se considera conveniente el uso de los datos experimentales de Bultjes por que proporciona toda la información necesaria para configurar el escenario de simulación de nuestro modelo en la computadora.

La base de datos experimentales proporcionados por el trabajo de Bultjes(1981,1983) consiste en promedios sobre conjuntos de mediciones puntuales de corto plazo de concentraciones de NO, NO<sub>x</sub> y  $O_3$  para una pluma emitida por una fuente puntual elevada que se dispersa sin flotación en un túnel de viento. En el túnel de viento (con una sección transversal de  $2.65 \times 1.2 \text{ m}^2$ ) se simuló una capa límite atmosférica en condiciones neutrales sobre un pastizal, a una escala espacial de 1:500. La correspondiente razón entre las escalas de tiempo de los procesos en el túnel de viento y en la atmósfera se estimó como 1:35, aproximadamente según estudios de Georgópulos y Seinfeld en 1986b.

En sus experimentos, Bultjes consideró una fuente de 0.14m de altura y 0.003m de diámetro con una emisión de NO puro de  $0.0110 \text{ m}^3/\text{s}$  a la velocidad de 0.4 m/s, descargada en una atmósfera de  $O_3$  con una concentración media de fondo de 0.350

ppm, simulando una capa límite de 0.8 m de espesor con una velocidad de viento media de 0.4 m/s y una intensidad turbulenta promedio de 0.1, a la altura de la chimenea. La temperatura en el sistema tomó valores entre 16 y 20 °C. Los experimentos se realizaron en la oscuridad y no se registraron concentraciones de hidrocarburos en el tunel de viento. Las mediciones realizadas correspondieron a los perfiles de concentración transversales (horizontales) de NO, NO<sub>x</sub> y O<sub>3</sub> a la altura de la fuente para diferentes distancias (viento abajo) respecto al punto de emisión.

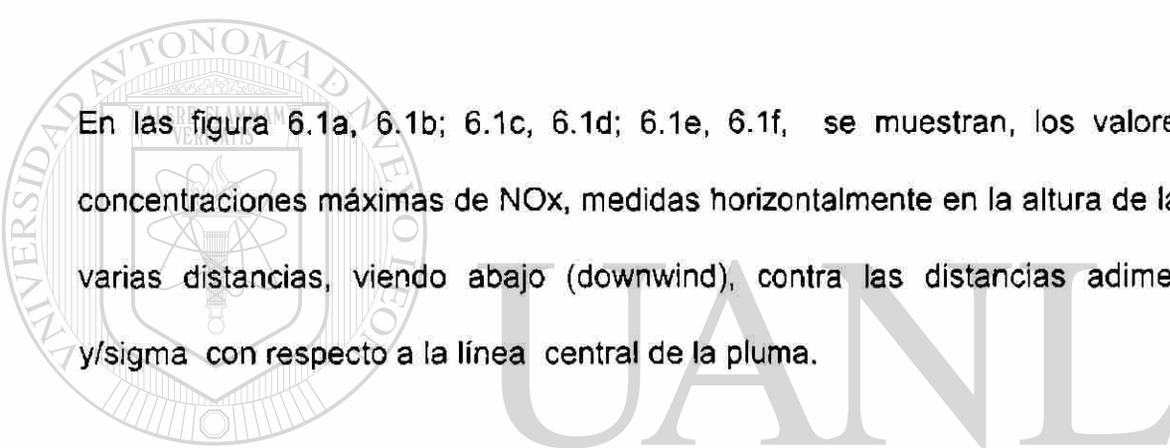
Para la simulación en computadora de este caso experimental, usando nuestro modelo de pluma reactiva, consideramos el siguiente escenario. A cada celda de una retícula cuadrada regular con paso espacial de 0.25m se asignó una concentración de ozono de 0.350 ppm, una velocidad de viento con una componente uniforme de 0.4 m/s en la dirección positiva del eje X, y componentes en el eje Y y desviación estándar de 0.29 m/s. La presión y la temperatura ambientales fueron de 1 atm y 18 °C, respectivamente, uniformes en toda la región de simulación. En la celda de la retícula situada en el origen de coordenadas (centrada en una de las tapas de la retícula) se fijó una concentración de NO de 0.450 ppm con una velocidad fija de 0.4 m/s en la dirección positiva del eje X modelando una fuente puntual con una tasa de emisión estacionaria de 0.01125 m<sup>3</sup>/s de NO puro. Se realizaron 10 corridas del modelo para un tiempo de simulación de 25 s con paso de 0.01s, cada una de ellas, registrándose los datos relativos a las distribuciones espaciales de las concentraciones de NO, NO<sub>2</sub> y O<sub>3</sub>, en intervalos de 1s de simulación. Posteriormente, para cada tiempo y celda a celda en la retícula, se promediaron los resultados de las concentraciones de estas especies sobre el número de simulaciones. En estas simulaciones, el mecanismo de reacción química estuvo restringido a la reacción (5.17) entre el NO de la pluma y el O<sub>3</sub>

ppm, simulando una capa límite de 0.8 m de espesor con una velocidad de viento media de 0.4 m/s y una intensidad turbulenta promedio de 0.1, a la altura de la chimenea. La temperatura en el sistema tomó valores entre 16 y 20 °C. Los experimentos se realizaron en la obscuridad y no se registraron concentraciones de hidrocarburos en el tunel de viento. Las mediciones realizadas correspondieron a los perfiles de concentración transversales (horizontales) de NO, NO<sub>x</sub> y O<sub>3</sub> a la altura de la fuente para diferentes distancias (viento abajo) respecto al punto de emisión.

Para la simulación en computadora de este caso experimental, usando nuestro modelo de pluma reactiva, consideramos el siguiente escenario. A cada celda de una retícula cuadrada regular con paso espacial de 0.25m se asignó una concentración de ozono de 0.350 ppm, una velocidad de viento con una componente uniforme de 0.4 m/s en la dirección positiva del eje X, y componentes en el eje Y y desviación estándar de 0.29 m/s. La presión y la temperatura ambientales fueron de 1 atm y 18 °C, respectivamente, uniformes en toda la región de simulación. En la celda de la retícula situada en el origen de coordenadas (centrada en una de las tapas de la retícula) se fijó una concentración de NO de 0.450 ppm con una velocidad fija de 0.4 m/s en la dirección positiva del eje X modelando una fuente puntual con una tasa de emisión estacionaria de 0.01125 m<sup>3</sup>/s de NO puro. Se realizaron 10 corridas del modelo para un tiempo de simulación de 25 s con paso de 0.01s, cada una de ellas, registrándose los datos relativos a las distribuciones espaciales de las concentraciones de NO, NO<sub>2</sub> y O<sub>3</sub>, en intervalos de 1s de simulación. Posteriormente, para cada tiempo y celda a celda en la retícula, se promediaron los resultados de las concentraciones de estas especies sobre el número de simulaciones. En estas simulaciones, el mecanismo de reacción química estuvo restringido a la reacción (5.17) entre el NO de la pluma y el O<sub>3</sub>

ambiental, como único mecanismo productor de  $\text{NO}_2$ , ya que tal como se mencionó anteriormente, los experimentos del túnel de viento de Bultjes se llevaron a cabo en la obscuridad.

A continuación se presentan los resultados de nuestras simulaciones y su comparación con los datos experimentales de Bultjes (1981, 1983). En las gráficas de las figuras siguientes 6.1a, 6.1b; 6.1c, 6.1d; 6.1e, 6.1f; 6.2a, 6.2b; 6.2c, 6.2e; 6.2f, 6.2g; 6.3a, 6.3b; 6.4a, 6.4b; y 6.5a, 6.5ab



En las figura 6.1a, 6.1b; 6.1c, 6.1d; 6.1e, 6.1f, se muestran, los valores de las concentraciones máximas de  $\text{NO}_x$ , medidas horizontalmente en la altura de la fuente a varias distancias, viendo abajo (downwind), contra las distancias adimensionales  $y/\sigma$  con respecto a la línea central de la pluma.

En las figuras 6.2a, 6.2b; 6.2c, 6.2e; 6.2f y 6.2g muestran las gráficas de los valores de la fracción de la concentración de  $\text{O}_3$  en la pluma respecto al valor de fondo de la concentración ambiental de  $\text{O}_3$ ,  $[\text{O}_3]/[\text{O}_3]_{\text{amb}}$ , en función de la distancia medida a lo largo de la línea central de la pluma a partir de la fuente. En estas figuras puede observarse una depresión de la concentración de ozono en el interior de la pluma cerca de la fuente, esta desaparece gradualmente al considerar puntos cada vez más alejados de ella. Esto se debe, a la reacción entre el  $\text{NO}$  de la pluma, debido a que la concentración es muy alta cerca del punto de emisión, y el  $\text{O}_3$  ambiental, mediante la cual se desarrolla la producción  $\text{NO}_2$  en la pluma.

En las figuras 6.2a, 6.2b; 6.2c, 6.2e; 6.2f y 6.2g, se presentan la comparación de los perfiles transversales de la fracción  $[\dot{O}_3]/[\dot{O}_3]_{amb}$  para las distancias de 1, 2 y 3 m, viento abajo, respecto a la fuente. En ellas se graficaron los valores de la fracción  $[O_3]/[O_3]_{amb}$  en función de la distancia adimensional (transversal, horizontal)  $y/\sigma_y$ , medida ésta respecto a la línea central de la pluma, siendo  $(\sigma_y)$  la desviación estándar de la distribución.

En la figura 6.3a, 6.3b se presentan los resultados que se refieren a cálculos y mediciones, a lo largo de la línea central de la pluma. Estos resultados se presentan en forma adimensional, como razones de concentraciones, en la que se puede apreciar directamente la dependencia de las transformaciones químicas en función de la distancia recorrida por la pluma en la dirección del viento.

La figura 6.4a, 6.4b, se presenta los valores medidos de las concentraciones de NOx a lo largo de la línea central de la pluma y por último presentamos la figura 6.5a y 6.5b, en la cual se muestran las mediciones de la relación de concentración de O<sub>3</sub> en la pluma respecto al valor de fondo de la concentración ambiental de O<sub>3</sub>,  $[O_3]/[O_3]_{amb}$ , en función de la distancia medida a lo largo de la línea central de la pluma a partir de la fuente. En esta gráfica se observa una depresión de la concentración de ozono en el interior de la pluma cerca de la fuente, ésta desaparece gradualmente al considerar puntos más alejados de ella. Esto se debe, a la reacción entre NO de la pluma, cuya concentración es muy alta cerca del punto de emisión, y el O<sub>3</sub> ambiental, mediante la cual se desarrolla la producción de NO<sub>2</sub> en la pluma.

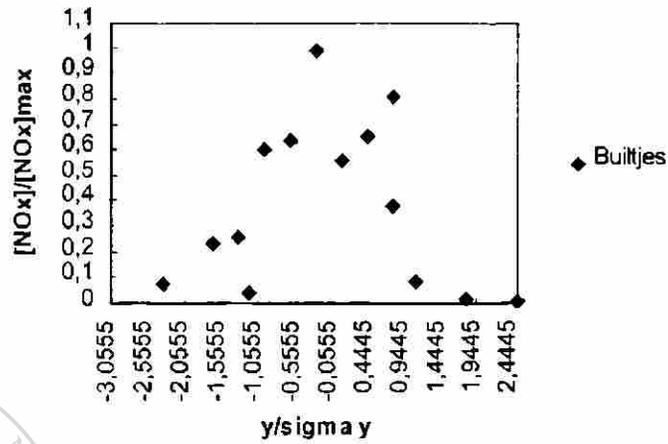
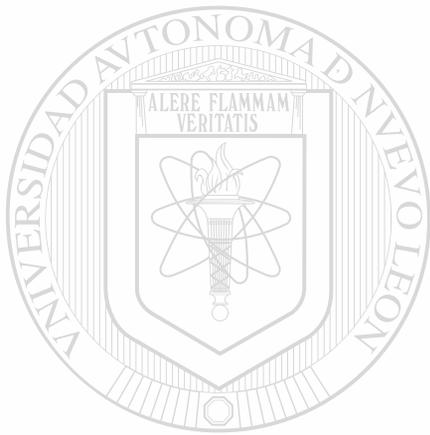


Figura 6.1a



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

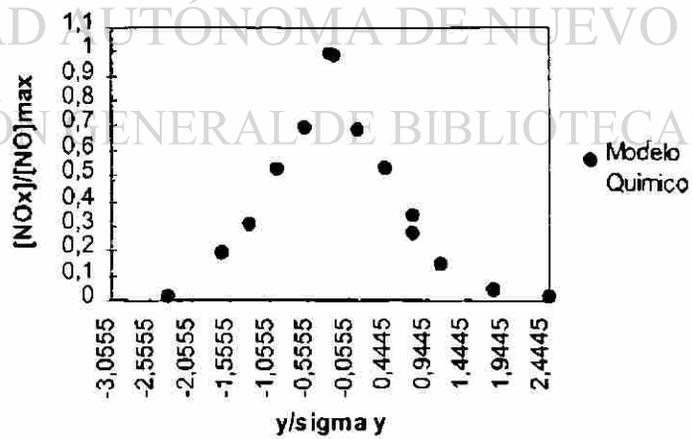


Figura 6.1b

Figura 6.1a y 6.1b Relación de concentración de  $[NO_x]/[NO_x]_{max}$  con  $x=1$  m

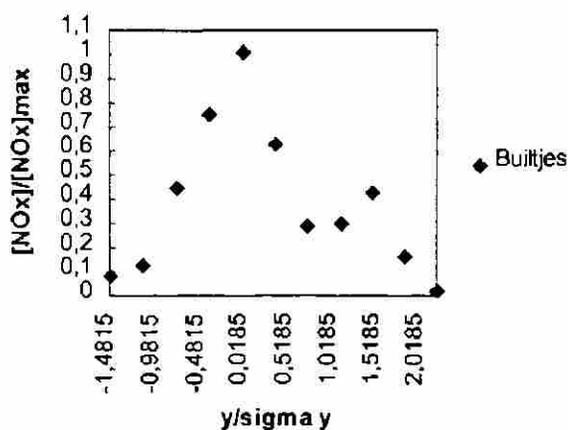


Figura 6.1c

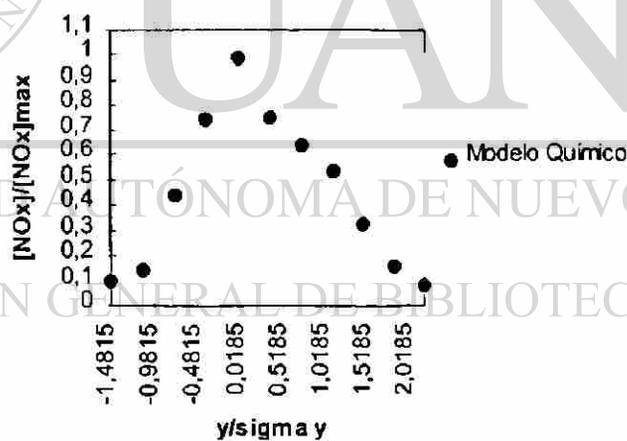
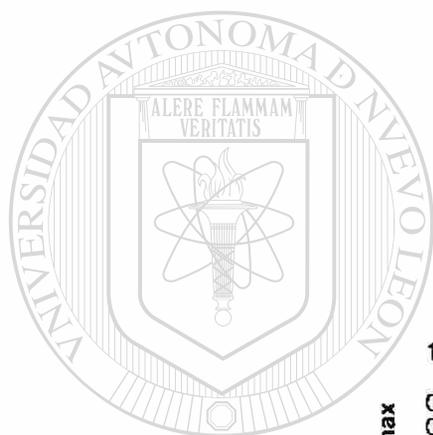


Figura 6.1d

Figura 6.1c y 6.1d Relación de concentración de  $[NO_x]/[NO_x]_{max}$  con  $x=2$  m.

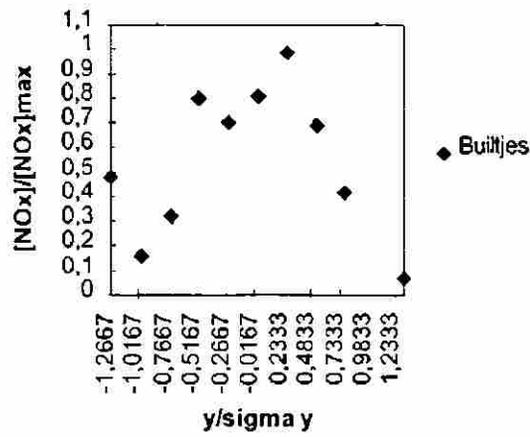


Figura 6.1e

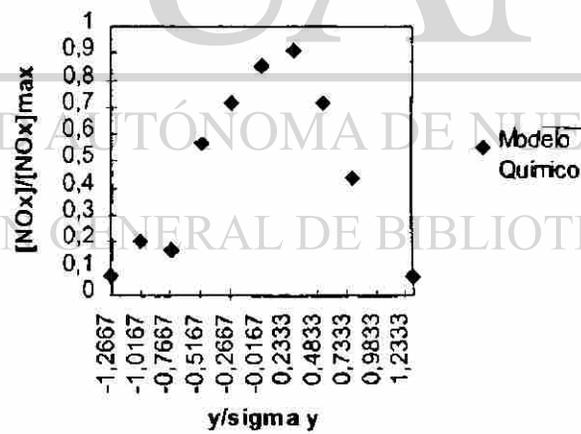


Figura 6.1f

Figura 6.1e y 6.1f Relación de concentración de  $[NO_x]/[NO_x]_{max}$  con  $x=3m$

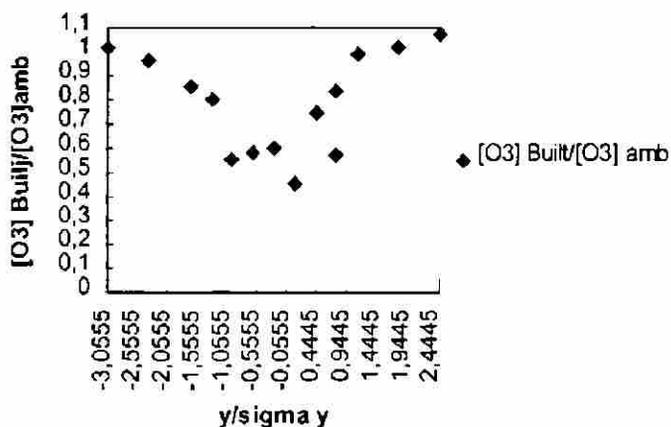


Figura 6.2a

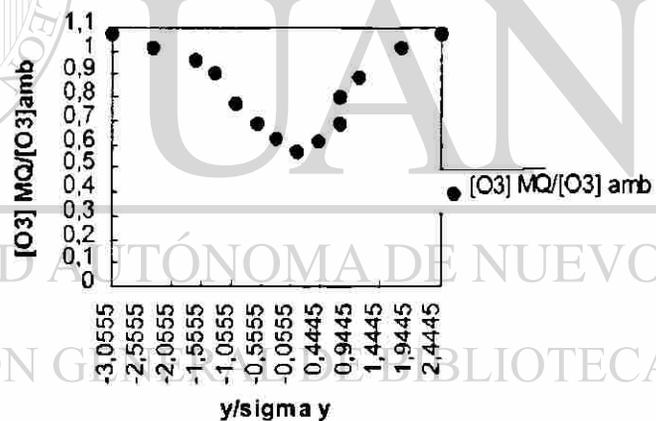


Figura 6.2b

Figura 6.2a y 6.2b Relación de concentración de  $[O_3]/[O_3]_{amb}$  con  $x=1$

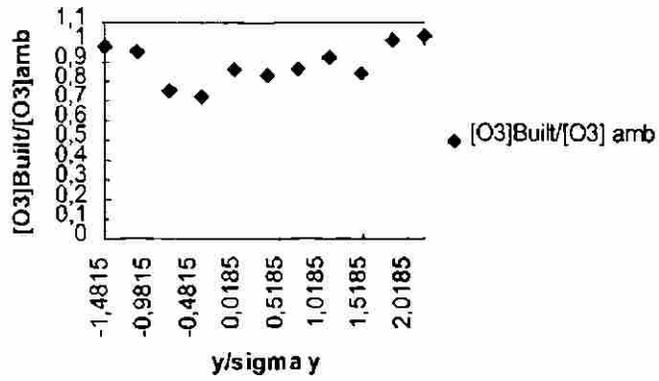
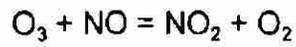
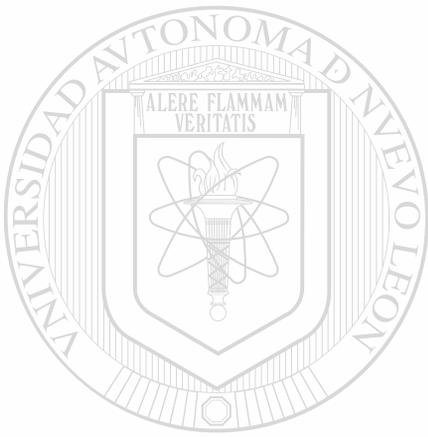


Figura 6.2c



UANL

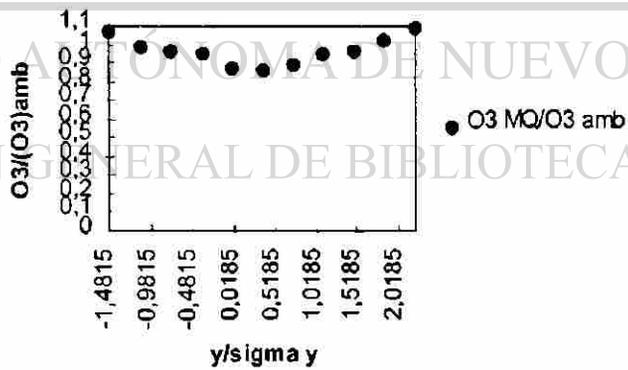


Figura 6.2d

Figura 6.2c y 6.2d Relación de concentración de  $[O_3]/[O_3]_{amb}$  con  $x=2m$

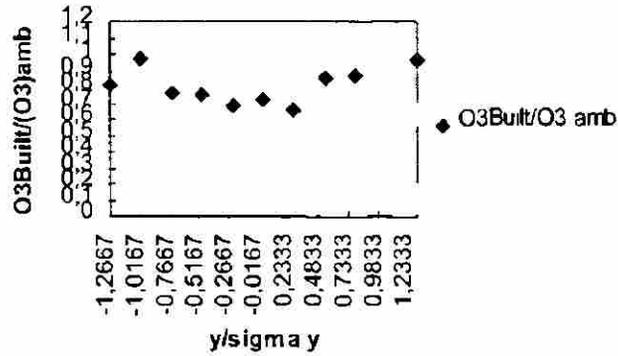
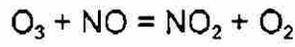


Figura 6.2e

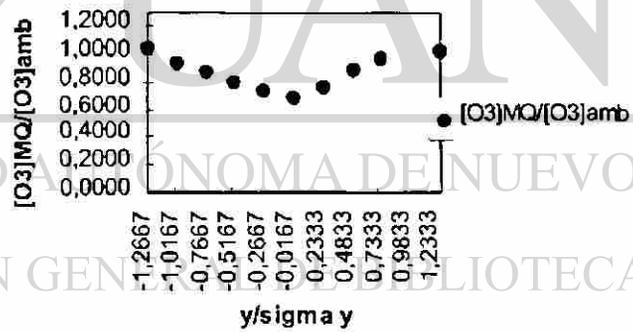


Figura 6.2f

Figura 6.2e y 6.2f Relación de concentración de  $[O_3]/[O_3]_{amb}$  con  $x=3m$

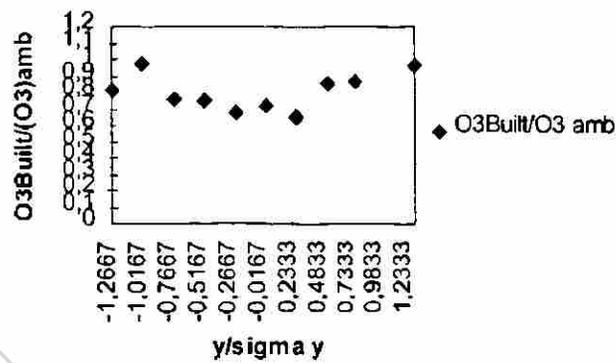
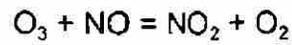


Figura 6.2e

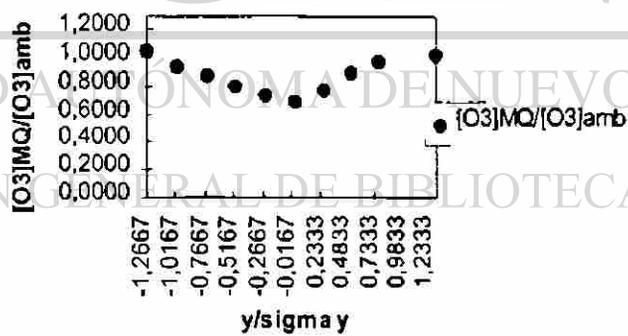
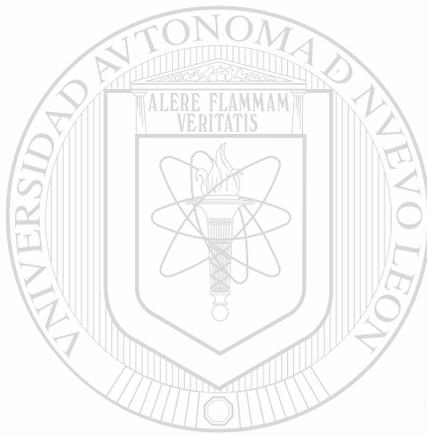


Figura 6.2f

Figura 6.2e y 6.2f Relación de concentración de  $[O_3]/[O_3]_{amb}$  con  $x=3m$



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN  
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

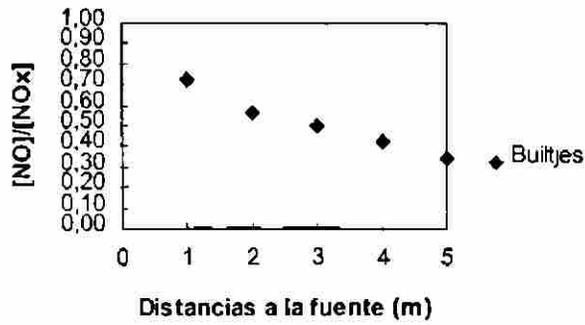
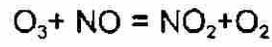
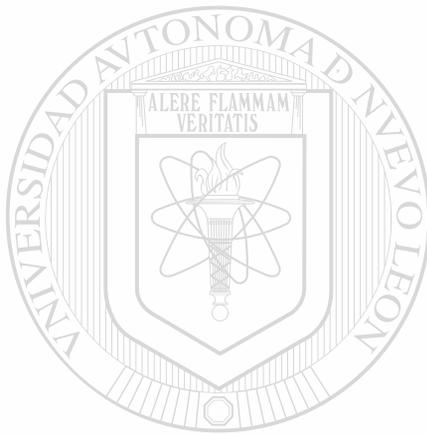


Figura 6.3a



UANL

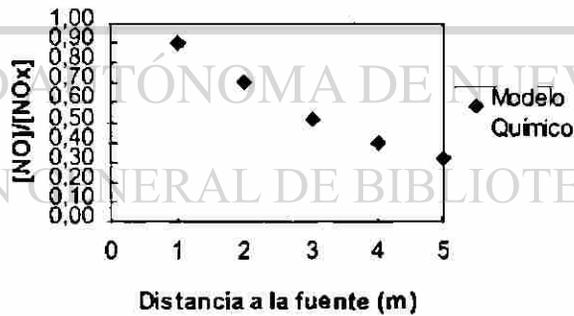


Figura 6.3b

Figura 6.3a y 6.3b Relación de la concentración de NO respecto a la concentración total de NOx a lo largo de la línea de la pluma.

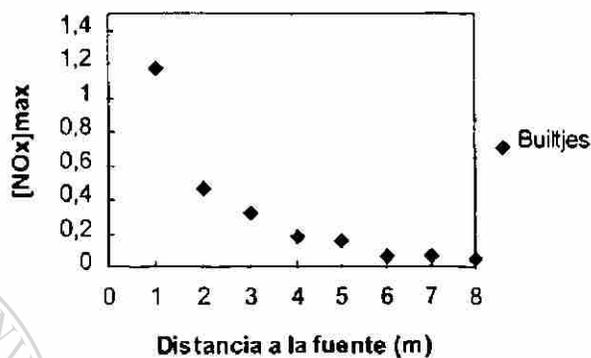
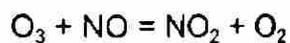
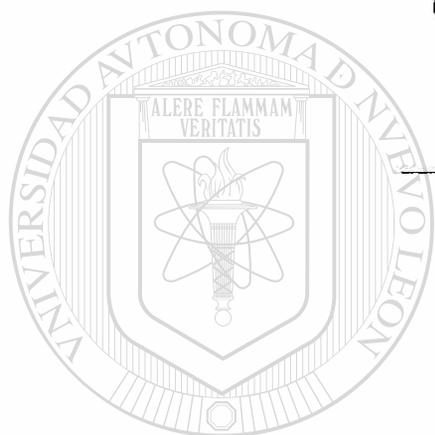


Figura 6.4a



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

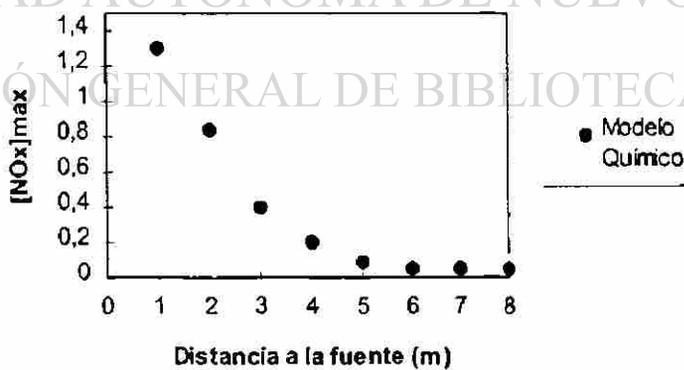


Figura 6.4b

Figura 6.4a y 6.4b Concentración máxima de NOx en el centro de la pluma.

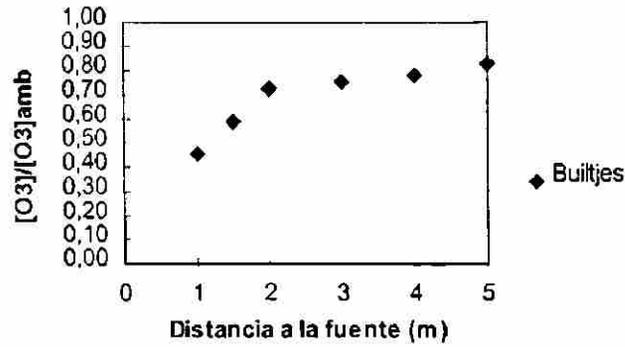
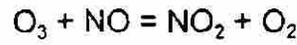


Figura 6.5a

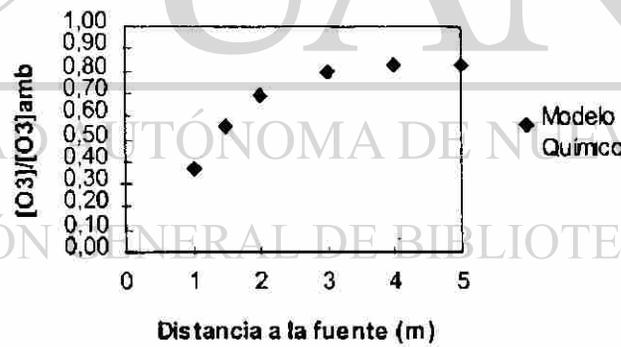


Figura 6.5b

Figura 6.5a y 6.5b Relación de la concentración  $O_3$  respecto a la concentración de fondo de  $O_3$  a lo largo de la línea central de la pluma.

## CAPÍTULO 7

### CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

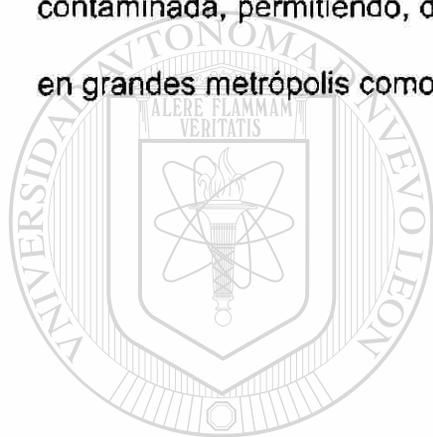
#### 7.1 Conclusiones y Recomendaciones

En este trabajo se presenta un modelo para representar los procesos de dispersión y reacción de una pluma en una atmósfera turbulenta. Este modelo fue construido usando técnicas similares a las de los modelos de gases en redes y autómatas celulares para la consideración de los procesos de transporte y dispersión. En las pruebas de validación del modelo que fueron realizadas, comparando sus predicciones

contra resultados experimentales de una pluma reactiva de NO en una atmósfera de O<sub>3</sub> obtenidos por Builtjes (1981, 1983), se encontró que nuestro modelo representa de manera satisfactoria los procesos de dispersión y reacción de la pluma. No obstante, se considera que aún queda por explorar el comportamiento de nuestro modelo en condiciones en las que los efectos de las correlaciones espaciales derivados del tamaño finito de las celdas pueden volverse importantes.

Con respecto a los compuestos de dióxidos de azufre se concluye que no es productor de ozono; sin embargo es un compuesto muy importante en la lluvia ácida.

El desarrollo de este modelo representa el primero y más importante de los pasos hacia la obtención de un modelo sencillo que permita determinar cuál es la contribución de las emisiones de óxidos de nitrógeno y dióxidos de azufre de una central termoeléctrica expuesto a las concentraciones de ozono, dióxido de nitrógeno y dióxido de azufre en la atmósfera. Aunque de momento el objetivo de este estudio está orientado al conocimiento del impacto de las emisiones de una fuente puntual específica sobre la calidad del aire, consideramos que a nuestro modelo puede incorporársele un mecanismo de los hidrocarburos presentes en una atmósfera contaminada, permitiendo, de esta manera, el estudio de la contaminación atmosférica en grandes metrópolis como la conurbación del Valle de México.



# UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

## BIBLIOGRAFIA.

Atkinson R., Baulch D. L., Cox R. A. Hampson R. F., Kerr J. A. and Troe J. (1992): Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: supplement IV, Atmospheric Environment, Vol. 26A, No. 7, pp 1187-1230.

Bahe, F. C. Schurath, U., Becker, K.H. (1980): The Frequency of NO<sub>2</sub> Photolysis at Ground Level, as Recorded by a Continuous Actinometer. Atmospheric Environment 14, pp 711-718.

Bilger R. W. (1978): The effect of admixing fresh emissions on the photostationary state relationship in photochemical smog. Atmospheric Environment 12, 1109-1118.

Borghi R. (1974): Chemical reactions calculations in turbulent flows: application to a CO-containing turbo jet plume. Adv. Geophys. 18B, 349-365.

Boreskov G. K. and Illarionov V. V. (1940): J. Phys. Chem. Moscow 14, 1428; quoted in Kondratiev V. N. (1970). Rate constants of Gas-Phase Reactions. Science Publishing House, Moscu, pp 233.

Bowen, R. M. (1976): Theory of Mixtures. En: Continuum Physics. Vol III, Mixtures and EM Field Theories. (De. A.C. Eringen ) Academic Press, New York, pp. 2-127.

Builtjes P.J.H., (1981): Chemically reacting plume experiment in the wind tunnel., Netherlads Organization for Applied Scientific Research, Division of Thechenology for Society. Ref No. 82-0135363 File No. 8710-20330.

Builtjes P.J.H., (1983): A comparison between Chemically Reacting Plume Models and Windtunnel Experiments. En: Air Pollution Modelin and its Applications II (De. C. Wispelaere) Plenum Press New York, pp. 59-84.

Cantú Martínez, P.C. (1992): Contaminación Ambiental, Diana, México.

Carmichael G. R. and Peters L. K. (1981): Application of the mixing-reaction in series model to NO<sub>x</sub>-O<sub>3</sub> plume chemistry. Atmospheric Environment 15, 1069-1074

Cocks A. T. and Fletcher Y. S. (1979): A model of the gas-phase chemical reactions of power station plume constituents, CERL-Rep./RD/L/R 1999, Leatherhead, Surrey.

Corrsin S. (1974): Limitations of gradient transport models in random walks and in turbulence. Adv. Geophys. 18A, 25-60.

Davis, D.D. Smith, G., Klauber, G. (1974): Trace Gas Analysis of Power Plant Plumes via Aircraft Measurements; O<sub>3</sub>, NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub> Chemistry. Science 186, 733-736.

Detlev Möller (1980): Kinetic Model of Atmospheric SO<sub>2</sub> Oxidation Based on Published Data, Atmospheric, Vol. 14 , pp 1067-1076.

Donaldson C. du P. and Hilst G. R. (1972): Effects of inhomogeneous mixing on atmospheric photochemical reactions. *Envir. Sci. Technol.* 6, 812-816.

Donaldson C. du P. and Varma (1976): Remarks on the construction of a second order closure description of turbulent reacting flows. *Comb. Sci. Technol.* 13, 55-78.

Fisher A.E.B. (1975): The Long Range Transport of Sulphur Dioxide, *Atmospheric Environment*, Vol 9, pp 1063-1070.

Fishman J., Ramanathan V., Cruteen P. J. and Liu S. C. (1979): Tropospheric ozone and climate, *Nature*, Lond, 282, 818.

Foster M. P. (1969): The oxidation of Sulphur dioxide in Power Station Plumes, *Atmospheric Environment*, Vol 3, pp 157-175.

Forney L. J. and Giz Z. G. (1981): Fast reversible reactions in power plant plumes: application to the nitrogen dioxide photolytic cycle. *Atmospheric Environment* 15, 345-352.

Frederick L. Jones, Richard W. Miksad, A. Rachel Laird (1981): A Simple Method for Estimating the Influence of Cloud Cover on the NO<sub>2</sub> Photolysis Rate Constant, *Journal of Air Pollution Control Association.*, Vol. 31 (1), pp. 42-45.

Freiberg J. (1976): The iron-catalyzed oxidation of SO<sub>2</sub> to acid sulphate in dispersing Plumes. *Atmospheric Environment* 10, 121-130.

Freiberg J. (1978): Conversion limit and Characteristic time of SO<sub>2</sub> oxidation in plumes. *Atmospheric Environment* 12, 339-347.

Georgopoulos, P.G., Seinfeld, J.H. (1986a): Mathematical Modeling of Turbulent Reacting Plumes-1. General Theory and Model Formulation. *Atmospheric Environment* 20, 1791-1807.

Georgopoulos, P.G., Seinfeld, J.H. (1986b): Mathematical Modeling of Turbulent Reacting Plumes-II. Application to the NO-NO<sub>2</sub>-O<sub>3</sub> System. *Atmospheric Environment* 20, 1809-1818.

Graedel E.T. L.A. Farrow and T.A. Weber (1976): Kinetic Studies of the photochemistry of the Urban Troposphere, *Atmospheric Environment*, Vol 10, pp 1095-1116.

Hameed S., Cess R. D. and Hogan J. S. (1980): Response of the global climate to changes in atmospheric chemical composition due to fossil fuel burning. *J. Geophys. Res.* 85, 77537-77545.

Hegg, D., Hobbs, P.V., Radke, L.F., Harrison, H. (1977): Reaction of Ozone and Nitrogen Oxides in Power Plant Plumes. *Atmospheric Environment* 11, 521-526.

Isaksen Y. S. A., Hesstredt E. and Hov O. (1987): A chemical model for urban plannign: test for ozone and particulate sulfur formation in St. Louis urban plume. *Atmospheric Environment* 12, 599-604.

Janssen, L.H.J.M., Nieuwstandt, F.T.M., Donze, M. (1990): Time Scales of Physical and Chemical Processes in Chemically Reacting Plumes. *Atmospheric Environment* 24A, pp. 2861-2874.

Janssen, L.H.J.M. (1986): Mixing of Ambient Air in a plume and its Effects on the Oxidation of NO. *Atmospheric Environment* 20(12), 2347-2357.

Jerone o. Nriagu (1976): Sulfur in the Environment, Part Uno: The Atmospheric Cycle, Edit. A. Wiley Interscience, Publication, John Wiley & Sons.

Joseph A. Leone, John H. Seinfeld (1984): Analysis of the Characteristics of Complex Chemical Reaction Mechanisms: Aplication to Photochemical smog Chemistry, *Environmental Science Technology*, Vol. 18, pp. 280-287.

Keneth W., Warner C. (1990): Contaminación del aire, Origen y Control; México, Limusa.

Kewley F. J. (1978): Atmospheric dispersion of a chemically reacting plume. *Atmospheric Environment* 12, 1895-1900.

Kewley F. J. (1980): The effect upon the photostationary state relationship when clean air and photochemical smog mix. *Atmospheric Environment* 14, 1445-1448.

Lamb R. G. (1973): Note on the application of K-theory to diffusion problems involving nonlinear chemical reaction. *Atmospheric Environment* 7, 257-263.

Lamb G. Robert and Seinfeld H. J. (1973): Mathematical Modeling of Urban Air Pollution, *Environmental Science & Technology*, Vol. 7, Num. 3, 253-261.

Lamb G. R. (1976): Continued research in mesoscale air pollution simulation modeling: volumen III: modeling of microscale phenomena. EPA-600/4-76-016C.

Liu M. K., Yocke M. A. and Mundkur P.V. (1975): Numerical simulation of reactive plume. 68 th Meeting of the American Institute of Chemical Engineers,. Los Angeles, California, 17 November; also Air Series, American Institute of Chemical Engineers.

Lusis M. A. (1976): Mathematical modelling of chemical reactions in a plume. Proceedings of the 7th International NATO/CCMS Technical Meeting on Air Pollution Modelling and Its Application, Airlie, Virginia, 7-10 September, pp. 831-855.

McRae G. J., Goodin W. R. and Seinfeld J. H. (1982): Mathematical Modeling of photochemical air pollution, Final Report to the Sate of California Air Resources Board under Contract Nos. A5-046-7 and A7-17-30, EQL Report No. 18, California Institute of Technology.

Mulcahy, M.F., Stevens, J.R., Ward, J.C. (1967), J. Phys. Chem., 71, 2124

O'Brien E. E. (1980): The probability density function (pdf) approach to reacting turbulent flows. In turbulent Reacting Flows, Topics in Applied Physics, Vol. 44 (edited by Libby P. A. and Williams F. A.), pp 185-218.

Oystein Hov (1983): One-Dimensional Vertical Model for Ozone and Others gases in the Atmospheric Boundary Layer., Atmospheric Environmental ., Vol. 17(3), pp.535-549.

Oystein Hov, Ivar S. A. Isaksen, Eigil Hesstvedt(1978): Diurnal Variations of Ozone and Other Pollutants in an Urban Area., Atmospheric Environmental ., Vol. 12, pp.2469-2479.

Organización Latinoamericana de Energía: Guía para la Evaluación de Impacto ambiental de Centrales Termoeléctricas, Quito Ecuador, diciembre 1993, pp 47-104.

Peters L. K. and Richards L. W. (1977): Extension of Atmospheric dispersion models to incorporate fast reversible reactions. Atmospheric Environment 11, 101-108.

Pruppacher H.R., Semonin R. G. and Slinn W. (1983): Precipitation Scavenging, Dr. y Deposition and Resuspension, Elsevier, New York.

Rachel Laird A, Richard W, Miksad., Department of civil Engineering, University of Texas at Austin (1982): A Simple Model for Urban Ozone Impact Predictions., December 1982, Vol. 32, No.12, Air Pollution Control Association.

Salcido A., Saldaña R. (1993): Modelación y Dispersión de Contaminantes Atmosféricos. Boletín IIE, marzo-abril, 79-82.

Salcido, A. (1995): ARIANNA. Un modelo de Gases en Redes para el Diagnóstico de Campos de Viento En: Modelación Matemática de la Dispersión Atmosférica de Contaminantes. Segunda Parte. Instituto de Investigaciones Eléctricas, IIE/15/5576/I 02/A. Tomo I.

Salcido, A. (1996): ARIANNA. A Lattice Gas Approach to the Wind Field Diagnostic Problem, Computational Mechanic Publications. En Prensa.

Secretaría de Desarrollo Social y Instituto Nacional de Ecología; Norma Oficial Mexicana NOM 085-Ecol-1994, Diario oficial. Marzo, México D.F., 1994.

Seigneur C., Tesche T. W., Roth P. M. and Liu M. K. (1983): On the treatment of point source emissions in urban air quality modeling. Atmospheric Environment 17, 1655-1676.

Seigneur Christina, Pradeep Saxena, Philip M. Roth (1984): Computer Simulations of the Atmospheric Chemistry of Sulfate and Nitrate Formation, Science, Vol 225, pp 1028-1029.

Seigneur, C.: Saxena, P., Mirabella, V.A. (1985): Diffusion and Reaction of Pollutants in Stratus Clouds: Application to Nocturnal Acid Formation in plumes. *Envir. Sci. Technol.* 19, 821-828.

Seigneur, C. (1992): Understand the Basics of Air-Quality Modeling, *Chemical Engineering Progress*, pp. 68-74.

Seinfeld, J.H. (1986): *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*, John Wiley & Sons, Inc.

Seinfeld J.H. (1988): Ozone Air Quality Models: A Critical Review., *Journal of air Pollution Control Association.*, Vol. 38 (5), pp. 615-645.

Shea, J.R. (1977): A Chemical Reaction in a Turbulent Jet. *J. Fluid Mech.* 81, 317-333.

Shu W. R. (1976): Turbulent chemical reactions: applications to atmospheric chemistry. Ph.D. thesis, Department of Chemical Engineering, California Institute of Technology.

Shu W. R., Lamb R. G. and Seinfeld J. H. (1978): A model of second-order chemical reactions in a turbulent fluid-II. Application to atmospheric plumes. *Atmospheric Environment* 12, 1699-1705.

Sons, Inc. Seinfeld, J. H. (1988): Ozone Air Quality Models. A Critical Review. *JAPCA* 38, 616-645.

Stedman, D. H., Jackson, J. O. (1975): The photostationary state in photochemical smog. *Proceedings of the Symposium on Chemical Kinetic Data for the Upper and Lower Atmosphere*, 15-18 September, warrenton, Virginia, published as supplment to Volume VII of the *Int. J. Chem. Kinet.*

Stewart D. A. and Liu M. K. (1981): Development and application of a reactive plume model. *Atmospheric Environment* 15, 2377-2393.

Sulfan Hameed and Jane Dignon (1987): Changes in the Geographical distributions of Global Emissions of NO<sub>x</sub> and SO<sub>x</sub> from Fossil-Fuel Combustion Between 1966 and 1980, *Atmospheric Environment*, Vol 22, No. 3, pp 441-449.

Urone, P., Lutsep, H., Noyes, C.M., and Parcher, J.F. (1968). *Environ. Sci. Technol.* 2, 611.

Varey R. H. et at. (1978): The oxidation of nitric oxide en power station plumes, a numerical model. CERL, Laboratory Note RD/L/N 14/78.

Wayne R.P. (1987): The photochemistry of Ozone., *Atmospheric Environmenta*, Vol. 21(8), pp.1683-1694.

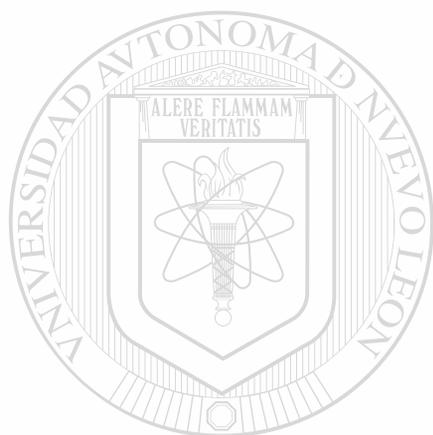
White W. H. (1979): NO<sub>x</sub>-O<sub>3</sub> photochemisty in power plant plume comparison of theory with observation, *Envir. Sci. Technol.* 11, 995-1000

Wilson, W.E., Jr., and Levy, A. (1970), J. Air Pollut. Control Assoc. 20, 385.

William B. Innes (1981): Effect of Nitrogen Oxide Emissions on Ozone Levels in Metropolitan Regions., Environmental Science Technology., Vol. 15(8), pp. 904-912.

Zeedik H., C.A. Velds (1973): The Transporte of Sulphur Dioxide over a Long Distance, Atmospheric Environment, Vol 7, pp 849-862.

Zannetti P. (1990) : Air Pollution Modeling. Theories, Computational Methods and Available Software, Computational Mechanics Publications, Southampton, Boston, Van Nostrand Reinhold, New York.



UANL

---

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

1875