

## **DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES EN LA ATMÓSFERA: ANÁLISIS DE MODELOS**

**Marcelo Caputo, Marcelo Gimenez y Miguel Schlamp**

División Seguridad Instalaciones Nucleares

Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica  
Av. Bustillo Km. 9,500, San Carlos de Bariloche, 8400 Río Negro, Argentina  
e-mail: caputom@cab.cnea.gov.ar, web page: <http://www.cab.cnea.gov.ar>

**Key Words:** *Dispersión atmosférica, modelos gaussianos, modelos de puff, AERMOD, HYSPLIT, PCCOSYMA.*

**Abstract.** *Las regulaciones con respecto de las emisiones de contaminantes a la atmósfera se remontan, en el ámbito nuclear, a la instalación de las primeras centrales de potencia para la producción de energía eléctrica, en la década del 50, por parte del Reactor Safeguards Committee; mientras que en el ámbito industrial en la década del 70, con el nacimiento de la EPAUSA (Environmental Protection Agency, USA). Desde aquel entonces empieza a tomar importancia el cálculo de la dispersión de contaminantes y su impacto sobre los bienes y las personas.*

*Este trabajo estará centrado en la presentación de las bases teóricas de los modelos analíticos de dispersión de contaminantes y una breve comparación con los modelos numéricos destacando las ventajas y desventajas de la utilización de cada uno de ellos para el cálculo de impacto ambiental.*

*Por último se se presentarán tres códigos típicos para el cálculo de la dispersión de contaminantes, dos de ellos provenientes del área de control ambiental (AERMOD, HYSPLIT) mientras que el tercero fue diseñado para el cálculo de dosis recibida por parte de una instalación nuclear tanto en operación normal como durante una hipotética situación accidental (PCOSYMA).*

## 1. INTRODUCCIÓN

Los modelos de dispersión son poderosas herramientas computacionales que permiten calcular la concentración de gases y aerosoles luego de que éstos fueron emitidos a la atmósfera. Estos modelos calculan la dilución de los contaminantes en la atmósfera. Su uso es cada vez más importante en la toma de decisiones en los más diversos ámbitos, por ejemplo, los resultados de los modelos fotoquímicos son utilizados para decidir la autorización de nuevas emisiones industriales por parte de los gobiernos, lo cual tiene un impacto económico y social. En el caso de emisiones accidentales los modelos pueden ser utilizados para decidir las medidas a tomar para minimizar los efectos sobre la población y los bienes. Por tal motivo, es imperativo mejorar los modelos y verificarlos con datos experimentales.

Cada uno de los usos mencionados lleva a que los modelos utilizados sean optimizados para la predicción de distintos parámetros. Para fines regulatorios el usuario está interesado en que el código realice buenas predicciones de la máxima concentración horaria. Para el caso de uso en accidentes nucleares, el modelo debería ser capaz de predecir correctamente la ubicación de una curva de nivel de concentración de contaminante para tomar decisiones sobre la evacuación y reubicación de la población.

En este trabajo estamos interesados en analizar los modelos de dispersión para el cálculo del impacto ambiental producido por la emisión a la atmósfera de compuestos (radioactivos o químicos). Para ello, en general, el procedimiento a seguir se divide en cuatro partes, no necesariamente desacopladas:

- Características físicas de la fuente y razón de emisión.
- Velocidad y dirección de transporte, a partir de la distribución de los vientos.
- Dispersión de los contaminantes.
- Efectos de las fuentes y sumideros, como ser, wash-out, deposición, transformaciones químicas, resuspensión, etc.

Este procedimiento se aplica en general para todo tipo de fuente. En particular en el ámbito nuclear el Organismo Internacional de Energía Atómica<sup>1</sup> presenta un procedimiento a seguir para la evaluación de la ubicación de una instalación nuclear y la estimación del impacto ambiental tanto en operación normal como durante una hipotética secuencia accidental. Las recomendaciones realizadas para tal fin son:

- Estudios meteorológicos de al menos un año y consideraciones acerca de la validez de la extensión para tiempos más largos.
- Estudios de la topografía.
- Estudio de la dispersión, para el cual se definen seis posibles métodos para el cálculo:
  - Método del tipo Pasquill-Gifford

- Método del gradiente vertical de temperatura.
- Método basado en la fluctuación de viento.
- Método de la sigma partida.
- Método del gradiente vertical de temperatura y la velocidad del viento.
- Método modificado del número aproximado de Richardson.

Todos los métodos definidos en el tercer punto utilizan modelos gaussianos para el cálculo de la concentración. En este trabajo estamos interesados en los modelos a utilizar para el estudio de la dispersión de los contaminantes.

Los modelos gaussianos utilizados son analíticos, computacionalmente económicos y sus expresiones matemáticas reflejan claramente los fenómenos que intervienen en el problema. Estos modelos se diferencian de los modelos numéricos en que no requieren sistemas computacionales tan poderosos ni usuarios altamente especializados, aunque sus predicciones son menos precisas.

### 1.1. La ecuación de difusión atmosférica

Si se considera un sistema con  $N$  especies químicas diluidas en un fluido, desde un punto de vista euleriano la concentración de cada especie debe satisfacer en cada elemento de volumen la siguiente ecuación de balance :

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\bar{u}_j + u'_j) c_i] = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j \partial x_j} + R_i(c_1, \dots, c_N) + S_i(\vec{x}, t) \quad (1)$$

donde  $c_i$  es la concentración de la especie química  $i$ ,  $R_i$  es la producción de la especie  $i$  por reacciones químicas,  $S_i$  es la fuente de la especie  $i$ ,  $D_i$  es la difusibilidad de la especie  $i$  en el fluido,  $\bar{u}_j$  es la velocidad media del fluido,  $u'_j$  es la componente turbulenta de la velocidad del fluido. Junto con la ecuación 1, el fluido debe satisfacer la ecuación de Navier-Stokes y el principio de conservación de energía. En general, el sistema de ecuaciones puede ser tratado como un sistema desacoplado ya que la concentración de los contaminantes es del orden de partes por millón por lo cual no genera modificaciones apreciables en el comportamiento del sistema. Si se escribe la velocidad del viento  $u$  y la concentración del contaminante  $c_i$  como:

$$u = \bar{u} + u' \quad c_i = \bar{c}_i + c'_i \quad (2)$$

donde la barra significa componente media y la prima componente turbulenta, tenemos que la ecuación 1 se transforma en:

$$\frac{\partial \langle c_i \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_j \langle c_i \rangle) + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle u'_j c'_i \rangle = D_i \frac{\partial^2 \langle c_i \rangle}{\partial x_j \partial x_j} + \langle R_i(\langle c_1 \rangle + c'_1, \dots, \langle c_N \rangle + c'_N) \rangle + S_i(\vec{x}, t) \quad (3)$$

donde  $\langle \rangle$  es el promedio sobre el ensamble de ocurrencias. Entonces considerando que la difusión molecular es muy pequeña comparada con la difusión turbulenta y suponiendo la atmósfera como incompresible, resulta:

$$\frac{\partial \langle c_i \rangle}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \langle c_i \rangle}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle u'_j c'_i \rangle + \langle R_i (\langle c_1 \rangle + c'_1, \dots, \langle c_N \rangle + c'_N) \rangle + S_i(\vec{x}, t) \quad (4)$$

Esta ecuación se conoce como la **ecuación de difusión atmosférica**. Los distintos modelos que se presentan a continuación intentan solucionar en forma aproximada, para distintas hipótesis y distintas condiciones atmosféricas, la ecuación anterior.

## 2. TIPOS DE MODELOS

### 2.1. Modelos de pluma gaussiana estacionarios

Estos modelos aparecen por primera vez en la década del veinte con el nacimiento de la teoría de transporte por gradiente. El uso de los modelos de dispersión gaussianos están limitados a situaciones con flujo uniforme y turbulencia homogénea, fuentes continuas (ya sean lineales o puntuales) y la velocidad del viento mayor que las fluctuaciones de velocidad debido a efectos turbulentos.<sup>2</sup>

Debido a que las predicciones de estos modelos fueron validadas con resultados experimentales, se extendió su uso para fines regulatorios, siendo éste su uso más importante. Hay que tener en cuenta que la validez de sus predicciones están restringidas a las inmediaciones de la fuente (del orden de las decenas de kilómetros dependiendo de las condiciones atmosféricas y del tipo de terreno). Por otro lado se puede decir que estos modelos son:

- conceptual y analíticamente simples.
- computacionalmente económicos.
- consistentes con la naturaleza aleatoria de la turbulencia.

Para comprender claramente las limitaciones de estos modelos, es necesario puntualizar las aproximaciones realizadas durante su deducción:<sup>2</sup>

- La emisión es constante y uniforme, al menos durante el intervalo de tiempo que le toma a la pluma llegar hasta la ubicación del receptor más alejado.
- Se suponen condiciones meteorológicas constantes y flujo estacionario al menos por el tiempo que le tome a la pluma arribar hasta el receptor más alejado.
- La masa se conserva en la pluma, esto implica que si se calcula el flujo de contaminante a través de cualquier superficie transversal a la dirección del viento debe resultar igual a la razón de emisión.

- Tanto la distribución vertical como horizontal del contaminante se supone gaussiana, para cualquier distancia viento abajo.
- No se considera el perfil vertical de la velocidad y dirección del viento.
- La dispersión en la dirección del viento es despreciable frente al transporte por la velocidad media del viento, esto implica que los viento más leves considerados deben ser lo suficientemente intensos como para cumplir con esta restricción.

La ecuación que describe la concentración del contaminante emitido por una fuente puntual desde la altura  $h$  y suponiendo reflexión total del contaminante en el piso, es:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left[\frac{-(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[\frac{-(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\} \quad (5)$$

donde  $Q$  es la razón de emisión del contaminante,  $u$  es la velocidad media del viento,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  parámetros de dispersión en la dirección  $y$  y  $z$  respectivamente.

El principal problema de estos modelos de dispersión es la determinación de los parámetros de dispersión. Teóricamente se puede ver que para tiempos largos los parámetros de dispersión son proporcionales a  $t^{1/2}$ . Sin embargo a la hora de calcular la dispersión se recurre a las relaciones experimentales medidas por distintos autores para diferentes condiciones atmosféricas, obteniéndose de esta forma ecuaciones para los parámetros de dispersión para cada condición atmosférica por ejemplo, las relaciones de Pasquill-Gifford, las de Cramer o las de Briggs,<sup>3</sup> que dividen la condición atmosférica en clases de estabilidad de acuerdo a observaciones experimentales. Por otro lado existen en la actualidad modelos basados en correlaciones empíricas los cuales miden la condición atmosférica con parámetros continuos como la Longitud de Monin-Obukov. Entonces las clases de estabilidad mencionadas más arriba fueron relacionadas con estos parámetros y la rugosidad del terreno para pasar de calcular los coeficientes de dispersión en forma discreta (o sea funciones que cambian cuando cambia la estabilidad) a funciones de validez un poco más general y continuas. Los parámetros y variables que describen la condición atmosférica se deducen a partir de la teoría de similaridad. Con estas se estima la desviación de la velocidad del viento y luego se calculan los parámetros de difusión. Las relaciones de similaridad utilizadas son obtenidas a partir de resultados experimentales y análisis dimensionales. Pal Arya<sup>2</sup> presenta cuatro conjuntos de relaciones de similaridad dependiendo de la condición atmosférica:

1. Capa límite en condición neutra: en esta condición con la atmósfera se encuentra completamente turbulenta y homogénea, el flujo de momento es aproximadamente constante con la altura y está dado casi exclusivamente por la fricción en la superficie terrestre. Por lo tanto un parámetro importante es la distancia al piso. Por el mismo motivo otro parámetro importante es la velocidad de fricción  $u_* \equiv (\tau_0/\rho)^{1/2}$  con  $\tau_0$  la componente  $(x, y)$  del tensor de tensiones sobre la superficie y  $\rho$  la densidad del aire. Para este caso resulta que

las desviaciones standards son:

$$\frac{\sigma_u}{u_*} \simeq 2,5 \quad \frac{\sigma_v}{u_*} \simeq 1,9 \quad \frac{\sigma_w}{u_*} \simeq 1,3 \quad (6)$$

2. Capa límite en condición estable (estratificada): para esta situación atmosférica Monin y Obukov propusieron que los gradientes medios y las características turbulentas de la atmósfera dependen de la altura, la velocidad de fricción (como un generador mecánico de turbulencia), del flujo de calor ( $H_0/\rho c_p$  donde  $H_0$  es el flujo de calor sensible sobre la superficie y  $c_p$  la capacidad calorífica del aire a presión constante), y de  $g/T_0$  donde  $T_0$  es la temperatura del aire a la presión de referencia. La desviación standard de la velocidad se escribe en este caso como:

$$\frac{\sigma_{u,v}}{u_*} = \left(12 - 0,5 \frac{h}{L}\right)^{1/3} \quad \text{para } \frac{h}{L} < 0 \quad \frac{\sigma_w}{u_*} = 1,3 \left(1 - 3 \frac{h}{L}\right)^{1/3} \quad \text{para } \frac{z}{L} \leq 0 \quad (7)$$

3. Capa límite en convección libre local: a diferencia del caso anterior en esta condición la velocidad de fricción en el suelo no es importante ya que, debido a la inestabilidad del sistema, la turbulencia es generada casi en forma exclusiva por las corrientes convectivas de aire. Por esta causa las variables relevante para esta condición son  $z$ ,  $g/T_0$  y  $H_0/\rho c_p$ . Estas relaciones de similaridad no son utilizadas en los modelos de dispersión de contaminantes.
4. Capa límite en situación inestable: En este caso la turbulencia está controlada por grandes celdas convectivas cuyos tamaños son del orden de la altura de la capa límite atmosférica ( $h$ ). Las variables relevantes en este caso son  $h$ ,  $g/T_0$  y  $H_0/\rho c_p$ . Para este caso las desviaciones standard son:

$$\frac{\sigma_u}{W_*} \simeq \frac{\sigma_v}{W_*} \simeq \frac{\sigma_w}{W_*} \simeq 0,60 \quad \text{con} \quad W_* = \left(\frac{g}{T_0} \frac{H_0}{\rho c_p} h\right)^{1/3} \quad (8)$$

## 2.2. Modelo de pluma gaussiana quebrada

Este modelo es similar al modelo de pluma gaussiana estacionaria, pero considera las variaciones de la dirección del viento, lo que da origen a una pluma que se quiebra siguiendo estas variaciones. El cálculo lo realiza considerando la pluma dispersada del intervalo de tiempo anterior como un conjunto de fuentes puntuales de contaminante y que se dispersa con los datos meteorológicos del intervalo de tiempo actual.

Entonces para calcular la dispersión para el tiempo  $n$  se deben sumar todas las contribuciones de cada uno de los elementos de volumen  $dx_{n-1} dy_{n-1} dz_{n-1}$  producidos por la pluma al tiempo  $(n-1)$ . De acuerdo a Panitz,<sup>4</sup> la concentración integrada en el intervalo de tiempo  $n$  resulta:

$$C_n(x, y, z, t) = \frac{Q_0}{2\pi\sigma_y\sigma_z u_n} \exp\left(-\frac{\eta_n^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left(-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right\} \Delta f_n \quad (9)$$

donde  $C_n$  es la concentración de actividad integrada en el en el n-ésimo intervalo en la posición  $(x, y, z)$  (las unidades de  $C_n$  son  $\text{Ci}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-3}$ ),  $Q_0$  es la actividad total emitida en el n-ésimo intervalo de tiempo,  $h$  es la altura efectiva de emisión,  $u_n$  es la velocidad del viento a la altura  $h$ ,  $\eta_n$  es la distancia desde el centro de la pluma al punto considerado y  $\Delta f_n$  es la función que limita el alcance de la pluma. Esta resulta de realizar la integración de todos los volúmenes diferenciales que contribuyen a la concentración de contaminante para el siguiente intervalo de tiempo, siendo:

$$\Delta f_n = \frac{F_1(\xi_n) - F_2(\xi_n)}{2} \quad (10)$$

con

$$F_1(\xi_n) = \text{erf}\left(\frac{u_n \Delta t_n - \xi_n}{\sqrt{2}\sigma_y}\right) \quad F_2(\xi_n) = \text{erf}\left(-\frac{\xi_n}{\sqrt{2}\sigma_y}\right) \quad (11)$$

donde erf es la función error,  $\xi$  es la distancia desde la fuente al punto considerado en la dirección del viento y  $\Delta t_n = (t_n - t_{n-1})$  es el intervalo de tiempo de integración. Con esta función de modulación de la concentración modela la distancia recorrida por el contaminante debido al transporte por el viento más la dispersión en la misma dirección.

Con respecto a los parámetros de dispersión en este caso se utilizan los mismos mencionados para el modelo de pluma estacionaria.

### 2.3. Modelos de puff

La principal diferencia entre los modelos de pluma y los de puff es que estos últimos son aplicables a situaciones en las cuales el tiempo de emisión y el de observación es corto comparado con el tiempo necesario para que el contaminante llegue hasta la posición del receptor. Claramente se puede saber qué modelo utilizar para emisiones largas respecto del tiempo de viaje o emisiones de corta duración respecto del mismo tiempo, sin embargo para cuando los tiempos son comparables es necesario utilizar una combinación de estos dos (pluma y puff). Los modelos de puff también pueden utilizarse en condiciones de vientos leves o calmo. Otra diferencia importante es que los parámetros de dispersión que se utilizan son distintos a los utilizados en los modelos gaussianos.

Asumiendo por un lado que en todas las direcciones la distribución de la concentración de contaminante es gaussiana y por otro lado se considera la conservación de la masa, resulta para la concentración de contaminante el modelo de puff gaussiano. La ecuación que describe esta concentración es:

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q_{ip}}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (12)$$

donde la concentración fue descrita desde el centro del puff,  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  son los parámetros de dispersión para el puff y  $Q_{ip}$  es la emisión en ese intervalo de tiempo.

Para calcular los parámetros de dispersión se puede recurrir a la teoría de similaridad. Según

Hanna<sup>3</sup> para tiempos cortos (algunos segundos desde la emisión) la razón de difusión de un puff ( $d\sigma^2/dt$ ) es:

$$\frac{d\sigma^2}{dt} \propto t (\epsilon\sigma_0)^{2/3} \quad \sigma^2 = \sigma_0^2 + c_1 t^2 (\epsilon\sigma_0)^{2/3} \quad (13)$$

donde  $\epsilon$  es la difusividad turbulenta,  $t$  es el tiempo transcurrido desde la emisión y  $\sigma_0$  el tamaño inicial del puff. Y para tiempos largos se puede ver que:

$$\frac{d\sigma^2}{dt} \propto t^2 \epsilon \quad \sigma^2 = c_2 \epsilon t^3 \quad (14)$$

para tiempos aún más largos, esto es para tamaños de vórtices mayores que el tamaño del puff tendremos que:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sigma_{puff}^2 = \sigma_{pluma}^2 \quad (15)$$

Para estos parámetros de dispersión también se utilizan relaciones empíricas. Hanna<sup>3</sup> presenta los resultados de numerosos experimentos donde se midió el cambio de tamaño de un puff a medida que este se aleja de la fuente.

## 2.4. Otros tipos de modelos

**Modelos estadísticos** La base de estos modelos es que la difusión tiene un comportamiento estocástico, por lo tanto el comportamiento de una partícula puede ser descrito por una función densidad de probabilidad.

Si la partícula considerada no tiene memoria del estado anterior estaremos en presencia de la difusión molecular. Considerando un gran número de realizaciones del caso anterior, las predicciones se aproximan a los resultados obtenidos con los modelos estacionarios de pluma gaussiana presentados más arriba. Sin embargo estos no son válidos en la atmósfera ya que las perturbaciones turbulentas de la velocidad media se mantienen correlacionadas con sus valores anteriores por tiempos del orden de los minutos. La determinación de esta correlación representa el mayor problema de este tipo de modelos.

Esta técnica es potencialmente muy poderosa para la evaluación de la difusión para condiciones meteorológicas no uniformes y no estacionarias. La ventaja de esta técnica es que los cálculos de la dispersión están relacionados directamente con las características de la turbulencia a través de la función de auto-correlación de la velocidad del viento.<sup>2</sup>

**Modelos de Similitud** Estos modelos utilizan el hecho de que la atmósfera se comporta de manera similar en distintos lugares y momentos, manteniendo algunos parámetros constantes. Esta técnica es llamada análisis dimensional. Primero se deben reconocer las  $n$  variables y los  $m$  parámetros de distintas unidades que describen el problema a resolver. Luego se construyen  $n - m$  números adimensionales, independientes que representan el sistema a describir.<sup>2</sup> Las limitaciones más importantes de estos modelos es que son aplicables sólo a la difusión en



flujos turbulentos horizontalmente homogéneos y que las similitudes son aplicables sólo a unas pocas condiciones, no permitiendo una descripción general del problema.

**Modelos de gradiente de concentración** Si en la ecuación de difusión atmosférica se modela la difusión turbulenta como:

$$-\overline{u_j' C'} = K_j \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad (16)$$

Entonces la ecuación 4 puede ser escrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_j \frac{\partial C}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( K_j \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + S(\vec{x}, t) \quad (17)$$

Los términos cruzados fueron despreciados ya que ellos son por lo general despreciables frente a los términos diagonales. En la ecuación anterior hay implícitas una escala de longitudes y una escala de tiempo las cuales corresponden a los tiempos de promediado de la concentración y de las velocidad del viento. Estas escalas están incluidas en los coeficientes de difusión  $K$ . El problema de esta ecuación es que no puede ser resuelta en forma analítica para expresiones generales de los coeficientes de difusión y la velocidad del fluido. A este modelo se lo denomina modelo con ecuaciones de cierre de primer orden. En este caso la única variable desconocida es el valor medio de la concentración del contaminante.<sup>3</sup>

El problema se presenta para situaciones donde la ecuación 16 no es válida. Para extender la validez de estos modelos se plantean ecuaciones para  $u_j' C'$  las cuales depende de un nuevo conjunto de términos de tercer orden en las fluctuaciones. Si bien las predicciones de los valores medios de estos modelos de orden superior no mejoran significativamente las predicciones de los modelos de primer orden, tienen la ventaja que aportan información adicional (varianza y covarianza) sobre las propiedades de la turbulencia atmosférica la cual es particularmente útil para describir la dispersión.<sup>2</sup>

Una de las limitaciones de los modelos con ecuaciones de cierre de segundo orden es la descripción de la capa límite atmosférica en en situación convectiva. Esto es debido a que las investigaciones de laboratorio sobre las relaciones de cierre no son aplicables a la atmósfera. La otra limitación importante es que el promediado sobre ensambles exige que se promedien los efectos de todo el espectro de movimientos turbulentos, apareciendo la dependencia de los vórtices más grandes de la geometría del problema lo cual es importante para su aplicación en la atmósfera. Estos modelos son útiles para la investigación básica de los problemas de dispersión ya que son computacionalmente costosos.

**Modelos de DNS** Estos modelos intentan resolver directamente las ecuaciones instantáneas de Navier-Stokes en 3D para todo el dominio de interés. Sin embargo la resolución de cualquier problema atmosférico con este tipo de modelo esta actualmente fuera de rango aun para las super computadoras. El problema reside en que un gran número de puntos de grilla son necesarios para resolver las escalas más pequeñas y al mismo tiempo el dominio debe ser lo

suficientemente grande como para poder especificar en forma precisa las condiciones de contorno y resolver los movimientos de gran escala que son sumamente importantes en todos los procesos de intercambio y mezclado.<sup>2</sup>

**Modelos de Large Eddy Simulation** Estos modelos son menos fundamentales que los anteriores, pero sin embargo son computacionalmente más plausibles. Estos simulan sólo los vórtices turbulentos de mayor tamaño y los más pequeños son usualmente parametrizados con modelos de sub-grilla más simples. La técnica surge con los modelos de clima global y de circulación general. Sin embargo en las últimas décadas se comenzó a utilizarlos para la simulación de la capa límite atmosférica con bastante éxito para casi todas las situaciones, sin embargo cuando se presentan condiciones de estratificación muy fuertes e intermitencia estos modelos fallan. Con los últimos avances respecto de los modelos de sub-grilla y con el substancial incremento de la velocidad de cálculo se espera que estos modelos se conviertan en los más usados para el cálculo de la dispersión de contaminantes en la atmósfera.<sup>2</sup>

### 3. CÓDIGOS TÍPICOS PARA EL CÁLCULO DE LA DISPERSIÓN

#### 3.1. AERMOD

El código AERMOD (American Meteorology Society - Environmental Protection Agency Regulatory MODEl) fue desarrollado en colaboración entre la American Meteorology Society y la Environmental Protection Agency para el cálculo de la dispersión de corto alcance de contaminantes provenientes de fuentes estacionarias.<sup>5</sup> Desde el inicio de los programas de calidad de aire, hace casi 30 años, la plataforma para el cálculo de la dispersión en zona cercana no cambió significativamente, por lo cual la EPA decidió encarar un cambio en la estructura de los códigos utilizados para fines regulatorios.

El código AERMOD es un código de pluma estacionaria. En el caso de la atmósfera en condición estable (SBL) el código asume que la concentración del contaminante tiene una distribución gaussiana en las direcciones perpendiculares al viento. Para el caso de la capa límite atmosférica en situación convectiva (CBL) se considera una distribución gaussiana para la dirección horizontal y una doble gaussiana para la dirección vertical. Este código es capaz de describir el fenómeno que se produce cuando la carga térmica y cinética del gas es lo suficiente como para alcanzar y atravesar el tope de la capa límite sin haberse mezclado con el entorno, permitiendo luego el reingreso a la CBL del gas. Incorpora un tratamiento mejorado con respecto a su antecesor, el ISC3, en cuanto a las propiedades del terreno.

EL cálculo de la concentración de un contaminante en la CBL se calcula considerando la contribución de tres plumas distintas:

- a) Directa: es la contribución en la posición del receptor proveniente directamente del emisor.
- b) Indirecta: es la contribución proveniente de la cantidad de contaminante que llega al límite

de la CBL y vuelve a bajar produciendo un incremento en la concentración de contaminante.

- c) Penetrada: es la contribución producida por el reingreso de contaminante que debido a su energía cinética inicial o a que la fuente es más elevada que el límite de la CBL la penetró y luego re-ingresa a la CBL

La expresión general utilizada por el AERMOD para el cálculo de la dispersión en la capa límite atmosférica convectiva calcula la contribución de las tres plumas posibles:

### Pluma Directa

$$C_d(x_r, y_r, z_r) = \frac{Q f_P}{2\pi u \sigma_y} \exp\left(-\frac{y_r^2}{2\sigma_y^2}\right) \times \sum_{j=1}^2 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\lambda_j}{\sigma_{z_{dj}}} \left[ \exp\left(-\frac{(z_r - \psi_{dj} - 2mz_i)^2}{2\sigma_{z_{dj}}^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z_r + \psi_{dj} + 2mz_i)^2}{2\sigma_{z_{dj}}^2}\right) \right] \quad (18)$$

### Pluma indirecta

$$C_r(x_r, y_r, z_r) = \frac{Q f_P}{2\pi u \sigma_y} \exp\left(-\frac{y_r^2}{2\sigma_y^2}\right) \times \sum_{j=1}^2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\lambda_j}{\sigma_{z_{rj}}} \left[ \exp\left(-\frac{(z_r + \psi_{rj} - 2mz_i)^2}{2\sigma_{z_{rj}}^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z_r - \psi_{rj} + 2mz_i)^2}{2\sigma_{z_{rj}}^2}\right) \right] \quad (19)$$

### Pluma Penetrada

$$C_p(x_r, y_r, z_r) = \frac{Q(1-f_p)}{2\pi u \sigma_{yp} \sigma_{zp}} \exp\left(-\frac{y_r^2}{2\sigma_{yp}^2}\right) \times \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[ \exp\left(-\frac{(z_r - h_{ep} - 2mz_{ieff})^2}{2\sigma_{zp}^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z_r + h_{ep} + 2mz_{ieff})^2}{2\sigma_{zp}^2}\right) \right] \quad (20)$$

En todas las expresiones anteriores tenemos que las  $\sigma$  con subíndice  $y$  está indicando el coeficiente de dispersión en la dirección horizontal, con subíndice  $z$  en la dirección vertical, los subíndices  $d$ ,  $r$  y  $p$  indican el parámetro de dispersión para las plumas directa, indirecta y penetrada respectivamente, los subíndices  $j$  son los que suman los aportes de la doble gaussiana debido a las corrientes ascendente y descendentes con que se encuentra la pluma en su recorrido, el subíndice  $m$  recorre la suma sobre todas las contribuciones debidas a las fuentes imágenes que aparecen por el método empleado en la resolución para asegurar flujo igual a cero en la superficie y tope de la capa límite,  $z_i$  es la altura de la fuente,  $x_r$ ,  $y_r$  y  $z_r$  es la posición del receptor,  $1 - f_p$  es el porcentaje de material que atraviesa el tope de la capa límite,  $u$  es la velocidad del viento,  $\psi_{dj}$  es el coeficiente que toma en cuenta la velocidad ascendente y descendente de las

corrientes convectivas, Para el caso de SBL la concentración del contaminante se calcula con la siguiente ecuación:

$$C_s(x_r, y_r, z_r) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}u\sigma_{zs}} F_y \times \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[ \exp\left(-\frac{(z_r - h_{es} - 2mz_{ieff})^2}{2\sigma_{zs}^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z_r + h_{es} + 2mz_{ieff})^2}{2\sigma_{zs}^2}\right) \right] \quad (21)$$

En la expresión anterior  $F_y$  es la distribución lateral de contaminante. Para el cálculo de los parámetros de dispersión se utiliza una parametrización obtenida por Panofsky<sup>5</sup> en la cual se escribe la desviación standard de la velocidad como la suma de la desviación generada por turbulencia mecánica y la generada por turbulencia convectiva. Para la descripción de cada una de las desviaciones se utilizan parametrizaciones obtenidas en numerosos experimentos de los cuales se dedujeron relaciones de similitud definidas para cada condición atmosférica.

La última versión del código AERMOD incorpora las ecuaciones para evaluar el efecto de edificaciones sobre la dispersión y la deposición de aerosoles para lo cual utiliza el clásico modelo de resistencias.

### 3.2. PCCOSYMA

El código PCCOSYMA fue desarrollado dentro del proyecto MARIA<sup>6</sup> (Methods for Assessing the Radiological Impact of Accidents) para el cálculo de las consecuencias de una emisión a la atmósfera de material radiactivo sobre las zonas próximas a la fuente. Este código fue desarrollado entre Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) de Alemania y el National Radiological Protection Board (NRPB) de Inglaterra basándose en códigos pre-existentes como el UFOMOD y el MARC.

El PCCOSYMA consiste en un conjunto de programas que modelan cada uno de ellos distintas partes del accidente. En algunos casos se presentan modelos alternativos pudiendo el usuario especificar el que mejor describa la situación considerada. En particular los módulos dedicados a la dispersión son:

1. ATMOS que calcula la concentración en aire y la deposición en cada punto afectado por la pluma para una emisión unitaria de aerosoles, gases nobles, yodo elemental y yodo orgánico. También calcula el tiempo de arribo de la pluma a los distintos puntos de la grilla considerada.
2. CONCEN que multiplica el resultado de ATMOS por la emisión de cada nucleído teniendo en cuenta la aparición de la familia radioactiva.

El modelo de dispersión utilizado por este código es el de pluma gaussiana quebrada. Los parámetros de dispersión utilizados por este código están dados por  $\sigma_i = a x^b$  con  $a$  y  $b$  que dependen de la clase de estabilidad atmosférica y de la altura de emisión. Este código permite introducir los valores de  $a$  y  $b$  que mejor se adapten al dominio de modelado. Por último si la emisión se realiza con carga energética el programa incluye el modelo de Briggs para describir

el ascenso de la pluma boyante.

Dependiendo del conjunto de datos meteorológicos usados, los cálculos se llevan a cabo en forma determinística (secuencia de un único conjunto de datos) o probabilística (se analiza un amplio rango de condiciones atmosféricas). Al mismo tiempo los resultados se dividen en dos grupos dependiendo si se refieren a condiciones en un punto en particular o si se suma los efectos sobre toda la población involucrada en el accidente. Los resultados obtenidos se ven modificados si se consideran las medidas que se podrían adoptar durante el accidente. Las que considera el código son: (1) Blindaje, (2) Evacuación, (3) Relocalización, (4) Descontaminación de suelos y edificios, (5) Administración de tabletas de yodo, (6) Interdicción de alimentos. Cada una de las medidas anteriores son aplicadas de acuerdo a criterios que el usuario define en el input del código.

### 3.3. HYSPLIT

El HYSPLIT fue diseñado para el Bureau of Meteorology de Australia con la finalidad de responder a emergencias atmosféricas ante accidentes del tipo radiológico, volcánicas, etc. Este código utiliza un modelo híbrido entre el método euleriano y lagrangiano, ya que el cálculo de la advección lo realiza en un marco lagrangiano y el cálculo de la concentración lo realiza desde un punto de vista euleriano.<sup>7</sup>

Este modelo permite calcular la concentración de un contaminante ya sea utilizando el cálculo de la trayectoria de una partícula de fluido o el cálculo de la trayectoria y dispersión de un puff. Para el caso del puff se permite la difusión de esta hasta que su tamaño excede el tamaño de la grilla definida para las variables meteorológicas, de allí en más es separada en parcelas más pequeñas con la cantidad de masa que le corresponda.

Para el cálculo de la advección, por defecto, el modelo considera partículas para la dispersión vertical y puff para la dispersión horizontal obteniendo un buen compromiso entre tiempo de cálculo y precisión para las estimaciones de la concentración de contaminante. Si el código utiliza el método de la partícula para el cálculo de la dispersión la expresión utilizada es:

$$\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \vec{u}'(t) \Delta t \quad (22)$$

$$z(t + \Delta t) = z(t) + w'(t) \Delta t \frac{1}{Z_{top}} \quad (23)$$

donde  $\vec{x}$  es la posición horizontal,  $\vec{u}$  es la velocidad horizontal,  $z$  es la posición vertical y  $w$  es la velocidad vertical. La posición horizontal  $\vec{x}$  está dada en unidades de grilla y  $z$  está dada en unidades respecto del sistema de coordenada que sigue el terreno,  $\vec{u}'$  y  $w'$  se calculan de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\vec{u}'(t + \Delta t) = R(\Delta t) u'(t) + u'' \sqrt{1 - R(\Delta t)^2} \quad (24)$$

$$w'(t + \Delta t) = R(\Delta t) w'(t) + w'' \sqrt{1 - R(\Delta t)^2} + T_{Lw} (1 - R(\Delta t)) \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z} \quad (25)$$

$\vec{u}''$  y  $w''$  son componentes aleatorias de las perturbaciones,  $T_{Lw}$  es la escala de tiempo vertical de Lagrange,  $R(\Delta t)$  es la auto-correlación y  $\sigma_w$  es la dispersión de la velocidad del viento en la dirección vertical. El último término de la ecuación anterior se adiciona para evitar la acumulación de partículas en zonas de escasa turbulencias.<sup>7</sup> Este código también calcula la deposición seca y húmeda de gases y partículas, re-suspensión y decaimiento radiactivo.

#### 4. COMENTARIOS FINALES

En este trabajo se presentaron los modelos que se utilizan para el cálculo de la dispersión de contaminantes en la atmósfera en el marco de los códigos para el cálculo del impacto ambiental. Como se mencionó los modelos más utilizados son los gaussianos de pluma estacionaria debido a su simplicidad tanto computacional como teórica. Sin embargo con el paso de los años, el desarrollo exponencial de las computadoras a permitido incursionar en modelos más complejos que mejoran las predicciones de la dispersión. Este es el caso de la técnica LES que si llegar a la complicación de los modelos DNS resuelven en forma satisfactoria la dispersión en algunas condiciones atmosférica, aunque todavía no están preparados para ser utilizados en forma masiva y cotidiana como los gaussianos estacionarios.

En este momento los autores están trabajando sobre un nuevo modelo gaussiano, no estacionario, pseudo-analítico que resolvería la ecuación de transporte atmosférica considerando la velocidad de sedimentación de gases densos y partículas independientemente de la velocidad de deposición en el suelo. Con respecto a esta última se calcularía de acuerdo a las propiedades micro-físicas de la dinámica de las partículas, como ser crecimiento por condensación y coagulación, difusión browniana, resuspensión y captura en el piso o follaje. Este sería una alternativa al modelo de resistencia que no es consistente con la ecuación de conservación de masa.<sup>8</sup> Este modelo durante los primeros ensayos (para condición estacionaria y no estacionaria, con reflexión total en el piso y para gases livianos) arrojó resultados alentadores.

Por último es importante mencionar que en la industria nuclear se ha calculado el impacto de una emisión en operación normal o durante un hipotético accidente en una instalación nuclear desde hace 50 años y utilizando los modelos gaussianos. Esto contrasta con el uso en la industria convencional en la cual el cálculo del impacto por las emisiones en operación normal o accidental se han empezado a realizar entre la década del 60 y 70.

#### REFERENCIAS

- [1] Organismo internacional de Energía Atomica. *Dispersión Atmosférica en relación con el emplazamiento de centrales nucleares - Guía de Seguridad - Colección Seguridad No. 50-SG-S3*. Organismo internacional de Energía Atomica, (1982).
- [2] Pal Arya S. *Air Pollution Meteorology and Dispersion*. Oxford University Press, (1999).
- [3] Hanna S. R. Briggs G. A., Hosker R. P. *Handbook on Atmospheric Diffusion*. Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory, NOAA, (1982).
- [4] Panitz H. J. *Accident Consequence Assessments with Different Atmospheric Dispersion Models, A Benchmark Study*. Forschungszentrum Karlsruhe, (1989).

- [5] U.S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. *AERMOD: DESCRIPTION OF MODEL FORMULATION (Version 02222) EPA 454/R-02-002d*. Environmental Protection Agency, (2002).
- [6] European Commission. *PCCOSYMA Version 2.0 User Guide, EUR 16240 EN*. National Radiological Protection Board, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, (1995).
- [7] Roland R. Draxler. *HYSPLIT 4 USER GUIDE Version 4.6*. National Oceanic and Atmospheric Administration, (2002).