

## CONTAMINACIÓN DEL AIRE POR EMISIONES VEHICULARES

Pugliese N.I.<sup>1</sup>; Núñez A.<sup>1</sup>; Ortega E.<sup>1</sup>; Aguirre J.O.<sup>1</sup>; Romero G.<sup>1</sup>; Nagornov, O.<sup>2</sup>; Loiácono S.M.<sup>3</sup>; Alonso N.<sup>3</sup>.

(1) *Departamento de Matemática. Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional de San Juan.*  
[noriris@unsj.edu.ar](mailto:noriris@unsj.edu.ar)

(2) *Department 39-High Energy Density Physics. Moscow Engineering Physics Institute- Russia.*  
[nagornov@hotmail.com](mailto:nagornov@hotmail.com)

(3) *Departamento de Informática. Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales.*  
*Universidad Nacional de San Juan.*  
[sloiaco@iinfo.unsj.edu.ar](mailto:sloiaco@iinfo.unsj.edu.ar)

**RESUMEN:** Se entiende por contaminación del aire a la presencia de sustancias indeseables en el mismo, en concentraciones tales que pueden causar efectos nocivos tanto en la salud humana como en la vegetación. La contaminación proveniente de los motores de combustión interna es una de las que más contribuye perjudicialmente en la calidad del aire. Siendo de particular importancia en aquellas ciudades con alta concentración de vehículos en áreas pequeñas. La concentración de contaminantes se incrementa debido a las reacciones fotoquímicas, ya que en presencia de la luz solar se produce la interacción de los productos de gases de escape con el oxígeno. Los cielos despejados conducen a la formación de capas de inversión desde la tarde a las primeras horas de la mañana. Es por esto que durante esas horas la contaminación tiene lugar en la capa superficial de la atmósfera, alcanzando concentraciones críticas, contribuyendo a problemas globales de contaminación del aire, como smog, lluvia ácida, agotamiento de la capa de ozono y calentamiento global, ya que tienen el potencial de cambiar la atmósfera superior. Por lo expuesto resulta conveniente, estudiar el comportamiento de los contaminantes en su fase de liberación hacia la atmósfera y su dispersión. En este estudio se desarrolla el modelo de emisiones para contaminantes atmosféricos, producidos por la actividad vehicular, en la ciudad de Rawson, Provincia de San Juan y se estiman las concentraciones de Óxidos de Nitrógeno en variadas condiciones climáticas. A través de la simulación se modelará matemáticamente el comportamiento de los contaminantes, planteando el modelo matemático y su solución numérica. Por medio de un programa computacional se resolverán las ecuaciones de dispersión analizando la convergencia y estabilidad de la solución.

### 1. INTRODUCCIÓN

La principal contaminación del aire en las grandes ciudades es debida a las emisiones vehiculares. Las ciudades pequeñas con alta concentración de vehículos están también expuestas a una importante contaminación del aire. La formación de algunos contaminantes se produce por las reacciones fotoquímicas, como es el caso del ozono, componente importante del smog. Su formación involucra reacciones de óxidos de nitrógeno y los compuestos volátiles orgánicos, iniciadas por la luz solar. En el desarrollo del modelo de emisiones se aplica la aproximación bottom-up, que consiste en encontrar un conjunto de parámetros para cada celda elemental de la ciudad (número y tipo de vehículos, consumo de combustible, tipo y longitud de ruta, factores de emisión en caliente y en frío). Se analiza el sistema de reacciones fotoquímicas que contribuyen a la formación de smog. Obteniendo la solución del problema

tridimensional por el método split. Se estudia la influencia de las condiciones de borde en la solución numérica.

## 2. OBJETIVO

El objetivo de este estudio es estimar la contaminación del aire en variadas condiciones meteorológicas, a partir del desarrollo del modelo de emisiones vehiculares de una ciudad.

## 3. METODOLOGÍA

### 3.1 MODELO MATEMÁTICO

#### 3.1.1 Planteo del problema

El área bajo estudio es la ciudad de Rawson, un cuadrado de 3x3 km<sup>2</sup>, con una alta densidad de población. El modelo urbano se basa en la ecuación de conservación de masas que describe advección- difusión turbulenta y transformaciones fotoquímicas. El análisis se ha desarrollado en un sistema Euleriano de grilla tridimensional. La altura de la frontera superior,  $H$ , es mayor o igual que el espesor de la capa de mezcla. Las fronteras verticales de la región bajo estudio están fuera de la ciudad. La principal ecuación para la concentración de  $i$ -ésimo contaminante, basada en las ecuaciones de balance de masa, puede escribirse:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial C_i u}{\partial x} + \frac{\partial C_i v}{\partial y} + \frac{\partial C_i w}{\partial z} & \dots\dots\dots(1) \\ & = \frac{\partial}{\partial x} (K_H \frac{\partial C_i}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (K_H \frac{\partial C_i}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (K_V \frac{\partial C_i}{\partial z}) + R_i, \end{aligned}$$

$$t \geq 0, 0 \leq x \leq X, 0 \leq y \leq Y, 0 \leq z \leq H,$$

donde

$C_i$  es concentración para cada especie.

$t$  es tiempo.

$u, v, w$  componentes de velocidad del viento a lo largo de las coordenadas  $x, y, z$ .

$K_H, K_V$  coeficientes de difusión horizontal y vertical.

$R_i$  tiene en cuenta la variación del contaminante  $i$  debido a las reacciones químicas;

$X, Y$  y  $H$  son las dimensiones horizontal y vertical de la región bajo estudio, respectivamente.

Las condiciones de borde vertical son:

$$\frac{\partial C_i}{\partial z} = -f_i(x, y, t) / K_V, \text{ en } z = 0,$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial z} = 0, \text{ en } z = H,$$

donde el término  $f(x, y, t)$  está determinado por la emisión vehicular como fuente emisora.

Se aplican dos tipos diferentes de condiciones de borde horizontales en  $x = 0, X$  y en  $y = 0, Y$ . La distribución vertical inicial se considera de la forma (Chang y col., 1989):

$$C(z) = C|_{z=0} \cdot \exp(-z/m) \quad (2)$$

### 3.1.2 Coeficiente de difusión

La variación vertical de la difusividad se ha tomado de acuerdo a Reynolds y col., 1973.

### 3.1.3 Velocidad del viento

La velocidad del viento se mide solo en algunos puntos de la ciudad. Por lo tanto, esos datos fueron interpolados en los puntos de la grilla. La interpolación del campo de viento satisface la ecuación de incompresibilidad  $\text{div} \vec{W} = 0$ , donde  $\vec{W} = (u, v, 0)$  es el vector velocidad, bidimensional. Se introduce la siguiente representación de las componentes del viento (Samarskaya, 1997):

$$u = \sum_{i=1}^{2n} a_i g_i^1(x, y, t), \quad v = \sum_{i=1}^{2n} a_i g_i^2(x, y, t), \quad (3)$$

Donde  $n$  es el número de estaciones de medición,  $a_i$  es un factor de peso y  $g_i^1(x, y), g_i^2(x, y)$  son incógnitas. Por otro lado las componentes del viento se pueden escribir como sigue:

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial P}{\partial y}, \quad (4)$$

donde la función  $P(x, y) = \sum_{i=1}^{2n} a_i P_i(x, y)$  es la solución de la ecuación de Laplace:

$$P_i(x, y) = \ln \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}, \quad (5)$$

donde  $(x, y)$  son puntos cualquiera fuera del área bajo estudio. Las funciones  $g_i^1(x, y), g_i^2(x, y)$  pueden ser representadas por  $P_i(x, y)$ . Para encontrar  $a_i$  es necesario resolver el sistema algebraico lineal:

$$u_k = \sum_{i=1}^{2n} a_i \frac{\partial P_i(x_k, y_k)}{\partial x}, \quad (6)$$

$$v_k = \sum_{i=1}^{2n} a_i \frac{\partial P_i(x_k, y_k)}{\partial y},$$

donde  $u_k$  y  $v_k$  son las componentes del viento en las estaciones de medición;  $x_k$  e  $y_k$  son las coordenadas para la  $k$ -ésima estación.

Los cálculos muestran que la solución depende de la elección de los puntos  $(x, y)$ . Una distribución simétrica de estos puntos alrededor del área bajo estudio, es una juiciosa interpolación del campo de vientos. Si las estaciones de medición estuvieran eventualmente en la región bajo estudio, entonces una interpolación válida sería ubicando estaciones ficticias fuera del área bajo estudio. Para disminuir la perturbación del campo real de vientos, esta estación debe ser ubicada lejos de la frontera. La

velocidad del viento en este punto puede ser tomada como un valor promedio de las velocidades medidas en las otras estaciones.

La distribución vertical del campo de velocidades está basada en las siguientes presunciones (Samarskaya, 1997):

- 1) En la dirección horizontal, el transporte debido a la difusión turbulenta, es mucho menor que el de advección;
- 2) El campo de velocidades entre mediciones se considera estable.

La ecuación de Navier Stokes se reduce entonces a un sistema de dos ecuaciones:

$$\frac{\partial}{\partial z} K_V \frac{\partial u}{\partial z} = 2\omega_z (v_g - v),$$

$$\frac{\partial}{\partial z} K_V \frac{\partial v}{\partial z} = 2\omega_z (u_g - u)$$
(7)

donde

$v_g$  y  $u_g$  componentes horizontales del viento geostrófico;  $\omega_z$  componente de la velocidad angular de la rotación de la tierra.

Las ecuaciones de borde son:

$$u = u_g, v = v_g \text{ en } z = H,$$

$$u = u_a, v = v_a \text{ en la superficie.}$$

#### 3.1.4. *Dispersión de los contaminantes*

La dispersión de los contaminantes en la atmósfera está sujeta a factores meteorológicos y topográficos, por lo que es importante para el estudio de la calidad del aire el conocimiento de estos parámetros. Este estudio se hace en las capas bajas de la atmósfera y el área bajo estudio está localizada aproximadamente de 0 a 500 metros sobre el nivel terrestre. Dentro de los factores que influyen en el área, desde el punto de vista de este estudio son: la variación de la temperatura con la altura, la presión atmosférica y la dirección y velocidad del viento. Siendo estos últimos los de mayor relevancia, ya que a mayor velocidad del viento hay mayor turbulencia y por lo tanto más rápida y completa será la dispersión. Para este estudio, se contó con datos meteorológicos proporcionados por la estación meteorológica de la Fuerza Aérea del aeropuerto Las Chacritas y por el INTA. Con respecto a la topografía, la posición de las montañas influye en la acumulación de humo. Analizados los datos meteorológicos y topográficos se concluyó que debido a la posición de las montañas (la Cordillera de los Andes al oeste, la montaña del Pie de Palo al este y las montañas del Villicum al norte), el viento predominante es de sur a norte, con velocidad moderada (de 11 a 23 km/h) y con menor frecuencia el viento del sudeste al noroeste con baja velocidad (10 km/h). La temperatura varía entre  $-2\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $18\text{ }^{\circ}\text{C}$  en invierno y entre  $17\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $36\text{ }^{\circ}\text{C}$  en verano. La presión es generalmente baja; entre 942 hPa y 950 hPa, es decir no superior a 947 hPa. La lluvia es prácticamente nula en la región.

#### 3.1.5 *Modelo de emisiones*

El modelo de emisiones para los contaminantes atmosféricos en la ciudad, está basado en la metodología desarrollada por Costa y Baldasano, 1986. La principal fuente de contaminación atmosférica en la ciudad está relacionada con la emisión vehicular. El

área bajo estudio es un cuadrado dividido para fines operativos en celdas de  $0.3 \times 0.3 \text{ km}^2$ . Se aplica la aproximación bottom-up para encontrar el monto emitido por celda en la unidad de tiempo (Loibl y col., 1993). La información detallada para cada celda, como número de vehículos, tipo de vehículos, consumo de combustible, etc. es esencial para computar la contribución de las celdas en las emisiones totales. A los efectos de estimar las emisiones de óxidos de nitrógeno del tránsito vehicular, deben considerarse todos los tipos de rutas: autopistas, rutas y calles, clasificadas así según la velocidad promedio de circulación en las mismas, 70, 40 y 30 km/h respectivamente. Se han tomado en cuenta dos tipos de emisiones: *emisiones en caliente*: cuando el motor está térmicamente estabilizado y *emisiones en frío*, tienen lugar durante el calentamiento del motor. Para calcular las emisiones en caliente:  $E_{ij}^h$  del contaminante NOx, por celda, emitido por vehículos tipo  $i$  en rutas tipo  $j$ , usamos la expresión:

$$E_{ij}^h = N_{ij} d_j G_{ij} F_i, \text{ (g/km}^2 \text{ hora)} \quad (8)$$

donde:

$N_{ij} d_j$  kilómetros recorridos por hora por vehículos tipo  $i$  en ruta tipo  $j$ , (km/hora);

$G_{ij}$  consumo de combustible para vehículos tipo  $i$  en ruta  $j$ , (l / km);

$F_i$  Factor de Emisión de NOx, función del tipo de contaminante, velocidad de conducción y categoría de vehículo.

Integrando para todas las rutas y tipos de vehículos se obtiene el total de emisiones en caliente

$$E_t^h = \sum_i \sum_j N_{ij} d_j G_{ij} F_i \text{ (g/km}^2 \text{ hora)} \quad (9)$$

Para el cálculo de las *Emisiones en frío* se considera que en la autopista no hay arranque de vehículo en frío. Para determinar estas emisiones se necesitan los siguientes parámetros:

$N_{ij}$  número de vehículos tipo  $i$  circulando a lo largo de la ruta tipo  $j$ ;

$M_i$  consumo de combustible por unidad de tiempo (l / hora) para vehículos tipo  $i$ ;

$T_{it}$  tiempo de calentamiento desde el arranque hasta alcanzar el estado de régimen (seg), siendo  $t$  la hora en que tiene lugar el arranque;

$F_i$ : Factor de Emisión de NOx. (g / l).

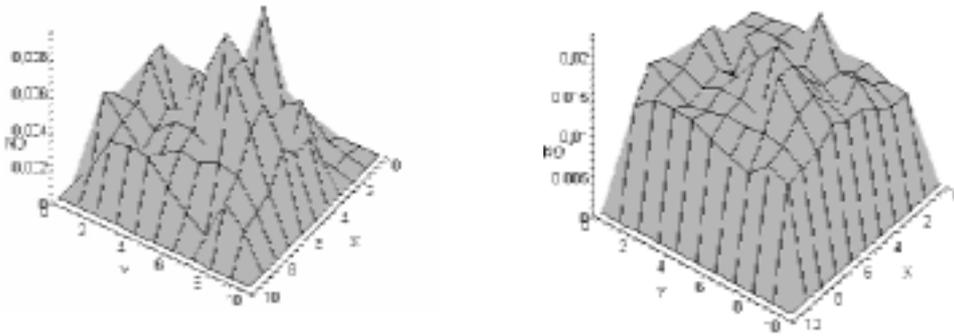
La fórmula usada para su cálculo es:

$$E_t^c = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 N_{ij} M_i T_{it} F_i \quad (10)$$

Para estimar el número de vehículos de cada tipo que circulan en cada tipo de ruta, se consideró que los autos arrancan en frío tres veces al día y se distribuyó el número de arranques durante las 24 horas en las cien celdas. Se determinó el consumo de combustible para cada tipo de vehículo en frío, como así también el tiempo de calentamiento para las diferentes horas del día. Finalmente para determinar las emisiones totales, sumando las emisiones en frío y las emisiones en caliente.

$$E_T \left( g / km^2 \text{ hora} \right) = E_i^h + E_i^c \quad (11)$$

En la siguiente figura puede verse las concentraciones de óxido de nitrógeno determinada en dos momentos diferentes del día: en la mañana (8 a.m.) y al medio día (2 p.m.), respectivamente.



**FIGURA 1** Distribución de NO en ppm (8 a.m) y a las (2 p.m).

El nivel de óxidos de Nitrógeno es más alto al medio día (2 p.m.), cuando la radiación solar es elevada. A pesar de tener un perfil de distribución agudo en las primeras horas de la mañana, debido a la difusión las concentraciones se acumulan y distribuyen en toda la ciudad. Como una consecuencia la distribución de concentración de ozono tiene forma aguda en las mañanas y más suave al medio día.

### 3.2. MÉTODO DE SIMULACIÓN

#### 3.2.1 Condiciones de frontera.

Generalmente se consideran condiciones de frontera del tercer tipo, es decir:

$$-K_H \frac{\partial C}{\partial x_i} = v(C - C_{ext}), \text{ donde } C_{ext} \text{ es la concentración de contaminación en el exterior}$$

de la frontera de la región calculada. Ya que no se conoce esta concentración “a priori”, se supone que en la periferia de la ciudad se caracteriza por un perfil de concentración relativamente suave. Debido a esto es posible considerar a la ecuación igualada a cero. Esta suposición sirve para las caras laterales de la región bajo cálculo y también para la cara superior. La superficie inferior del paralelepípedo (la superficie terrestre) tiene una emisión de potencia  $S_i$ .

#### 3.2.2 Método Split

El sistema principal de ecuaciones para determinar la concentración del i-ésimo contaminante, puede ser escrito como sigue:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \hat{L}_1 C_i + \hat{L}_2 C_i = R_i, \quad (12)$$

donde los operadores diferenciales:  $L_1$  y  $L_2$ , son los responsables para la difusión y la advección respectivamente. Se aplica el método de diferencias finitas, implícito con fórmulas de diferencias atrasadas debido a la rigidez del esquema. La aplicación del método split permitió encontrar la solución numérica óptima del problema. Para la convergencia de la solución numérica es suficiente verificar el orden de aproximación y estabilidad de la solución numérica. Se ha investigado la estabilidad numérica del método mediante el método de separación de variables. Se ha construido un esquema de estabilidad absoluta

#### 4. RESULTADOS

El modelo se aplicó para el cálculo de la concentración de ozono en el área bajo estudio, para diferentes condiciones meteorológicas. El viento aumenta la dispersión de los contaminantes atmosféricos, cambiando la distribución de concentración de ozono. En las noches las concentraciones de ozono disminuyen a mínimos valores. Las emisiones vehiculares elevadas y la alta radiación solar al medio día producen la máxima concentración de ozono. Sin embargo la posición de los máximos es función directa de los parámetros meteorológicos. Por ejemplo los cielos nublados desplazan los máximos hacia horas de la tarde.

#### 5. CONCLUSIONES

Los cálculos muestran que la emisión de los óxidos de nitrógeno para el área bajo estudio es de un nivel de contaminación significativo.

El viento reduce los niveles de contaminación. La frecuente presencia de noches claras, produce la radiación por inversión. El programa de contaminación desarrollado en este estudio permite la predicción de la contaminación del aire para diferentes condiciones climáticas.

La principal ventaja del modelo de emisiones presentado en este trabajo es que puede ser fácilmente actualizado cambiando los datos. El esquema desarrollado puede ser útil para futuros estudios de otros contaminantes en el área.

#### BIBLIOGRAFIA

- Costa, M. y. Baldasano, J.M (1986). Development of a source emission model for atmospheric pollutants in the Barcelona area. *Atmospheric Environment*, 30(2), pp. 309-318.
- Chang, Y.S.; Carmichael, G.R y Kurita (1989) H. The transport and formation of photochemical oxidants in Central Japan. *Atmospheric Environment*, 23(2), pp. 363-393.
- Lobil, W., Orthofer, R. y Winiwarter, W. (1993) Spatially disaggregated emission inventory for anthropogenic NMVOC in Austria. *Atmospheric Environment*, 27A, pp. 2575-2590.
- Reynolds, S.D.; Roth, P.M y Seinfeld, J.H. (1973). Mathematical modeling of photochemical air pollution-I. *Atmospheric Environment*, 7, pp.1033-1061,
- Samarskaya, E.A. (1997)Formulation of mathematical model of air pollution propagation in atmosphere. *Mathematical modelling*, 9(11), pp. 59-71.