

## MODELADO MATEMÁTICO DE CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA POR GASES INDUSTRIALES

Loiacono, S.M.<sup>1</sup>, Nagornov, O.<sup>2</sup>, Pugliese, N.I.<sup>3</sup> Crescentino, L.<sup>3</sup> Núñez, A.<sup>3</sup>; Pereyra, M.O.<sup>3</sup>; Mercado, J.N.<sup>3</sup>; Lucero, A.E.<sup>3</sup>, Cuevas, M.S.<sup>3</sup>.

*(1) Departamento de Informática. Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales. Universidad Nacional de San Juan.*

[sloiacono@iinfo.unsj.edu.ar](mailto:sloiacono@iinfo.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 Matemática. Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional de San Juan.*

[noriris@unsj.edu.ar](mailto:noriris@unsj.edu.ar)

RESUMEN: La contaminación del aire es fundamentalmente una consecuencia de las actividades humanas. Un modelo de concentración de contaminantes del aire permite predecir las concentraciones y emisiones de contaminantes, bajo ciertas condiciones meteorológicas, durante cierto tiempo. La mayor parte de los residuos industriales se descargan verticalmente al aire libre, mediante una chimenea. Una vez que el gas contaminado sale del punto de descarga, la columna de humo tiende a expandirse y mezclarse con el aire ambiental donde se diluyen los residuos gaseosos, para finalmente dispersarse y bajar al suelo. Los contaminantes afectan tanto la salud humana, como la de los vegetales. En zonas rurales, en las cercanías de una fábrica, la exposición continua a las sustancias no deseadas produce no solo daño en la superficie de las hojas sino que reduce el crecimiento no solo de la planta sino también el de las frutas. En los cultivos comerciales eso significa una reducción directa de ingresos. En el presente trabajo se desarrollarán modelos matemáticos que describan la contaminación del aire debida a los gases emitidos por una chimenea industrial. Para este estudio es necesario analizar los parámetros que determinan las condiciones de la estabilidad atmosférica, ya que dichas condiciones influyen fuertemente en la concentración, dispersión y difusión de los contaminantes. Aplicando el método de diferencias finitas para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales. Se estima la estabilidad y convergencia de la solución numérica. Se elabora el algoritmo de la solución numérica y su correspondiente método computacional para la estimación de la concentración de los gases emitidos por una industria en una zona rural. Con los resultados obtenidos en esta investigación se podrá determinar la influencia de los contaminantes analizados en la calidad del aire en las cercanías de una industria.

### 1 INTRODUCCIÓN

En áreas rurales y urbanas hay fuentes de contaminación del aire, como consecuencia de las actividades humanas. Actualmente la principal contaminación del aire en la Provincia de San Juan es debida a las emisiones vehiculares y en menor escala debida a las industrias. Este trabajo se ha focalizado en el estudio del impacto que produce la contaminación de una industria minera localizada a 25 km al norte de la ciudad capital de San Juan, en el departamento Albardón. La mayor parte de los residuos industriales

se descargan verticalmente al aire libre, mediante una chimenea. Una vez que el gas contaminado sale del punto de descarga, la columna de humo tiende a expandirse y mezclarse con el aire ambiental donde se diluyen los residuos gaseosos, para finalmente dispersarse y bajar al suelo (Davis y. Masten, 2004). Es importante entonces, el estudio y análisis de la estabilidad atmosférica para formular los modelos que permitan predecir las concentraciones en la contaminación del aire. Para el estudio de la contaminación producida por las chimeneas industriales, en una primera aproximación, se usa habitualmente el modelo de Gauss, basado en la solución de la ecuación de balance de masas en derivadas parciales; para cálculos más precisos se usa una combinación de modelos en la que la distribución horizontal es similar a la de Gauss y la distribución vertical sujeta a procesos más complejos tales como advección, asentamiento, transformaciones mutuas (Lev y col., 1995), este método es conocido como la Aproximación de Euler-Lagrange. Es significativo el estudio del transporte de contaminantes atmosféricos, basado en el modelado de este proceso por medio de la ecuación que describe en forma diferencial la ley de conservación de masa de cualquier sustancia en la atmósfera. Esta ecuación incluye el modelado de ciertos procesos como difusión, transporte por vientos, cambio de cantidad de sustancia debido a reacciones químicas, entre otros. En este proceso de modelado del transporte difusivo en la atmósfera, puede despreciarse la difusión molecular frente a la turbulenta. Es de gran importancia la determinación de los coeficientes de difusión turbulenta para lograr un modelado satisfactorio. La determinación *de* estos coeficientes se basa en la Teoría K de difusión turbulenta.

Los resultados de este estudio aportarán importante información para el análisis de la calidad de vida en las cercanías de una industria.

## 2. OBJETIVO

En el presente trabajo se desarrollan modelos matemáticos que describan la contaminación del aire debida a los gases emitidos por una chimenea industrial.

## 3. METODOLOGÍA

### 3.1 MODELO MATEMÁTICO Y SOLUCIÓN NUMÉRICA

#### *3.1.1 Formulación del modelo*

Para planificar y poner en práctica programas de control de la contaminación del aire, es necesario predecir las concentraciones en el medio ambiente. Un correcto modelo de concentración de contaminación del aire, permitirá predecir las concentraciones y emisiones de contaminantes con una condición meteorológica especificada, durante un periodo determinado. El modelo de Gauss y la Aproximación de Euler-Lagrange, son aptos para el estudio de contaminación en áreas lejos de la fuente de contaminación (Modelo Regional).

Para resolver el problema de advección-difusión, el primer paso es el proceso de discretización, consistente en la conversión de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales a un sistema de ecuaciones algebraicas, también llamado esquema en diferencias finitas. Este proceso introduce errores, es por eso que debe analizarse la

aproximación de la solución numérica. El segundo paso es el estudio de la estabilidad del esquema numérico, por medio del método de Von Newman. Ambas propiedades, aproximación y estabilidad, resultarán en la convergencia de la solución numérica a la solución exacta.

### *3.1.2 Parámetros del modelado matemático*

Para modelar el proceso de difusión-advección en la atmósfera, es necesario tener en cuenta los siguientes parámetros:

- Parámetros de estabilidad de la atmósfera.
- Flujo de emisión de cada contaminante.
- Principales características del campo de vientos.
- Coeficiente de difusión horizontal y vertical.
- Velocidad de deposición de cada especie.
- Velocidad de las reacciones químicas.
- Densidad de cada especie.
- Concentración inicial de cada especie.

Es por ello que se analizaron las principales características meteorológicas de la región bajo estudio como frecuencia y velocidades predominantes de los vientos y variación de la temperatura. Estos estudios fueron hechos en base a datos anuales, proporcionados por la estación meteorológica de la fuerza aérea, ubicado en el aeropuerto D.F. Sarmiento. Se determinó que en la provincia, la dirección predominante de los vientos es desde el sur al norte, con velocidades variables de acuerdo a la estación del año, con un promedio de 10 km/h. Las principales características del campo de viento pueden obtenerse con el procedimiento desarrollado por Samarskaya, 1977, método que asume en términos generales que la componente vertical del viento es igual cero, donde el campo de viento satisface la ecuación de balance de masas. Además las componentes  $u$  y  $v$  pueden ser obtenidas por interpolación. Asume también que la influencia de la difusión horizontal puede ser despreciada frente a la componente horizontal del viento. Considera además que el movimiento del viento durante un episodio no tiene fluctuaciones y se aplican las ecuaciones de balance de momento (Navier-Stokes). Se tuvo en cuenta también que la industria analizada explota la dolomita, trabajando en forma continua las 24 horas. Las piedras procesadas, que se traen de las montañas vecinas, son de aproximadamente 120 a 200 mm y poseen un 93 % de  $\text{CO}_3\text{Ca}$ . El tiempo de calcinación en el horno es de unos 48 minutos. La altura promedio de las chimeneas es de 25 o 30 m, con un diámetro de 600 mm. Se analizó el combustible usado en la industria, para determinar el flujo de gases emitidos por la chimenea, como así también la velocidad de deposición de las sustancias que lo componen.

Los valores de las diversas constantes usadas fueron tomados de un trabajo previo de difusión de contaminantes atmosféricos en la periferia de la ciudad de San Juan, desarrollado por el grupo de investigadores (Clemente y col., 2005).

### *3.1.3 Modelo para la distribución de contaminación del aire.*

Se introduce la ecuación de difusión-convección sin interacciones mutuas entre contaminantes. Debido al movimiento de las moléculas, la difusión produce una disminución de la concentración. Basándose en las ecuaciones de balance pueden

describirse los procesos de difusión atmosférica, donde despreciando la termodifusión y la barodifusión se obtiene la ecuación de difusión convectiva, aplicada a fluidos incompresibles en los que  $\rho$  es constante, por lo que resulta la ecuación de difusión-convección:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \text{div}(C_i \bar{u}) = \text{div}(D \nabla C_i) \quad (1)$$

Para varias sustancias se introducen concentraciones parciales  $C_i$ , donde  $i$  representa el número de sustancias, obteniendo un sistema de ecuaciones diferenciales parciales (PDEs) para describir la evolución de las concentraciones. La ecuación (1) describe la dispersión de los contaminantes en la atmósfera sin interacción entre los gases, pero dichas interacciones químicas juegan un rol importante por lo que deben ser consideradas, entonces para  $i = 1, \dots, n$  especies químicas la ecuación de balance para cada una será:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u C_i) + \frac{\partial}{\partial y}(v C_i) + \frac{\partial}{\partial z}(w C_i) = \\ = \frac{\partial}{\partial x}\left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_V \frac{\partial C_i}{\partial z}\right) + E_i + R_i \end{aligned} \quad (2)$$

Donde:

$K_H$  y  $K_V$  son los coeficientes de difusión horizontal y vertical respectivamente en  $m^2/\text{seg}$ .

$u, v, w$  son las componentes de la velocidad del viento en cada dirección en  $m/\text{seg}$ .

$E_i$ : corresponde a la emisión (fuente puntual) en  $kg/h$ .

$R_i$ : representa los términos de producción y pérdida de gases en la fase química.

### 3.1.4 Condiciones de frontera

La región bajo estudio es un paralelepípedo cuyas fronteras son:

$$\{x = 0, x = L_X\}; \{y = 0, y = L_Y\}; \{z = 0, z = H\}.$$

$$\begin{aligned} 1) \quad \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=L_X} = 0 \\ 2) \quad \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_{y=L_Y} = 0 \\ 3) \quad \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=H} = 0 \\ 4) \quad \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=0} = -f(x, y, t) / K_V \rho \end{aligned} \quad (3)$$

Las condiciones 1) y 2) consideran que los perfiles de concentración en la frontera lateral son suficientemente suaves, y la primer derivada igual a cero.  
 La condición 3) significa ausencia de flujo de aire a través de la cara superior.  
 La condición 4) implica el flujo desde la superficie en contacto con la fuente de emisión.

### 3.1.5 Condición inicial

Se determina la condición inicial para el estudio de la distribución de concentración como sigue:

$$C(x=0, y, z) = C_0(y, z)$$

Siendo  $C_0$  = concentración inicial en ppb.

## 4. RESULTADOS DEL MODELO

Se aplica el modelo para estimar la concentración de  $\text{NO}_2$  emitido por la chimenea industrial a diferentes distancias y bajo diferentes condiciones climáticas. Los cálculos se hacen considerando una altura real de la chimenea de 30 m y la altura de la pluma variable de acuerdo a la clasificación de estabilidad atmosférica, con velocidad de viento constante. Se consideraron diferentes velocidades de deposición seca a varias distancias de la chimenea. Los datos de emisión usados en el programa se muestran en la Tabla 1.

**TABLA 1.** Datos de Emisión

Substancia	Emisión (Kg/h)	Densidad (Kg/m)	m (A/F)
$\text{N}_2$	2160	1,25	0,22/0,04
$\text{CO}_2$	1332	1,96	
$\text{NO}_2$	14,8	2,05	
$\text{SO}_3$	7,92	3,57	
$\text{H}_2\text{O}$	108	0,80	
Otras	25,3	2,68	

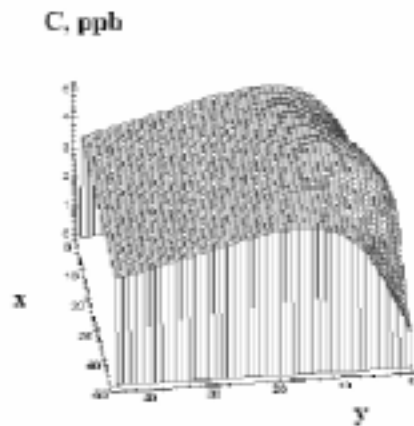
En la tabla 1,  $m$  corresponde a la clasificación de estabilidad atmosférica.

Para la representación gráfica se ha considerado el origen del sistema de coordenadas ubicado en la base de la chimenea, tomando el eje horizontal alineado con la dirección del viento. La escala en la dirección horizontal está expresada en número de nodos. En dirección  $x$  la longitud mostrada es 6000 m, en dirección  $y$  es 600 m.

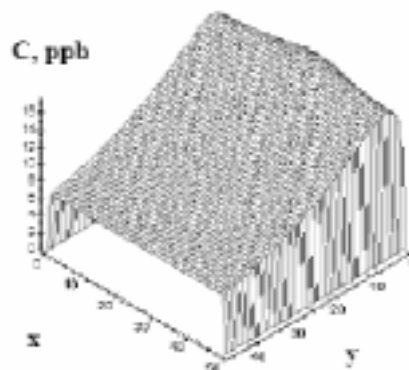
En Fig.1, y Fig. 2 se muestra la distribución de la contaminación producida por la chimenea de la industria. La pluma sube a considerable distancia sobre la chimenea, dado que el gas es emitido a mayor temperatura que la atmosférica y con velocidad

vertical. Para los cálculos de la altura de la pluma, se supuso que el gas es emitido desde un punto  $(0,0,H)$ .

Se presenta en particular la concentración de óxidos de nitrógeno en *ppb*, para una distancia de  $6000\text{ m}$  de la chimenea, con velocidad del viento de  $1\text{ m/seg}$  y velocidad de deposición seca de  $0.01\text{ m/seg}$ , para la misma chimenea y para dos alturas efectivas diferentes, determinadas por las condiciones climáticas.



**FIGURA 1.** Concentración de Óxidos de Nitrógeno en *ppb* ( $H=100\text{ m}$ , velocidad del viento:  $1\text{ m/seg}$ ).



**FIGURA 2.** Concentración de Óxidos de Nitrógeno en *ppb* ( $H=70\text{ m}$ , velocidad del viento =  $1\text{ m/seg}$ ).

## 5. CONCLUSIONES

El modelo desarrollado permite predecir las concentraciones de gases emitidos por una chimenea a diferentes distancias y bajo diferentes condiciones climáticas.

Analizados los resultados se observa que se produce una disminución del máximo pico de concentración en las cercanías de la chimenea si se aumenta: ya sea la altura efectiva de la chimenea, o la velocidad de deposición seca, o la velocidad del viento o la distancia a la chimenea.

Estos resultados contrastados con los de un estudio previo (Clemente y col. 2005), en el que se consideró la emisión vehicular de una ciudad como una chimenea (fuente puntual) frente a las distancias regionales, arrojan comportamiento similar.

El modelo desarrollado, puede aplicarse a otras industrias en la provincia, aportando información útil tanto para organismos gubernamentales, como empresas, sobre la calidad de vida en las cercanías de la industria para determinar la conveniencia o no de construcción de viviendas en las adyacencias.

## BIBLIOGRAFÍA

- Clemente, M.A.; Gil García, C.O. Ortega, E.; Pugliese, N.I.; Núñez, A; Loiacono, S.; Alonso, N.; Pereyra, M. y Gil, M.F.( 2005) “Propagación de contaminantes a distancias regionales” XII EMCI Nacional-IV Internacional. Facultad de Ingeniería, U.N.S.J.
- Davis, M.L. y Masten, S.J. (2004) Ingeniería de las Ciencias Ambientales. Mc Graw Hill Interamericana.
- Lev, T.D.; Talerko N.N; Tarnopolskiy, A.G.; Shnaldman, V.A. (1995) Dry deposition of atmospheric pollutants over the Sea of Azov and the northern Black Sea. Meteorology and Hydrology. N° 6.
- Samarskaya, E.A. (1997) Mathematical model of contamination propagation in atmosphere. Mathematical Modeling. V9, N°11.