

Proyecto de Carreteras - T 052

CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA POR TRÁNSITO VEHICULAR

MSc. Ing. Nora Iris PUGLIESE
Ing. Jorge Orlando AGUIRRE
Ing. Jorge Nelson MERCADO
Ing. Miguel Oscar PEREYRA

Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de San Juan.

ARGENTINA

RESUMEN

La contaminación del aire debida a la presencia de sustancias indeseables puede causar efectos nocivos tanto en la salud humana como en la vegetación. Cuando es causada por fuentes naturales, la contaminación puede ser asimilada por la naturaleza, pero ello no ocurre cuando la contaminación es consecuencia de la actividad humana.

La contaminación proveniente de los motores de combustión interna es una de las fuentes que más deteriora la calidad del aire. La concentración de contaminantes se incrementa debido a las reacciones fotoquímicas. Los cielos despejados conducen a la formación de capas de inversión térmica en especial durante las primeras horas de la mañana, que contribuyen a problemas globales de polución del aire, tales como smog, lluvia ácida, agotamiento de la capa de ozono y calentamiento global.

En este trabajo se presenta un estudio efectuado sobre el comportamiento de los contaminantes en su fase de liberación y dispersión hacia la atmósfera. Se ha desarrollado el modelo de emisiones para contaminantes atmosféricos, producidos por la actividad vehicular en la ciudad de San Juan, y se han estimado las concentraciones de ozono bajo diferentes condiciones climáticas. Se realizó una simulación del comportamiento de los contaminantes, planteando el correspondiente modelo matemático y su solución numérica. Por medio de un programa computacional se resolvieron las ecuaciones de dispersión y se analizó la convergencia y estabilidad de la solución.

De los resultados obtenidos se infiere que los niveles de emisión de óxidos de nitrógeno en la ciudad de San Juan presentan un nivel de contaminación significativo, en comparación con la polución registrada en otras ciudades en las que se cuenta con información al respecto.

1. Introducción

La principal contaminación del aire en las grandes ciudades se debe 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 e hidrocarburos, iniciadas por la luz solar. Se determina la concentración de ozono producida en San Juan. Siendo el objetivo de este estudio desarrollar el modelo de emisiones para contaminantes atmosféricos en la ciudad de San Juan y estimar la contaminación del aire en variadas condiciones climáticas.

En este análisis 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, el ciclo de tránsito diario). 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 analiza también la influencia de las condiciones de borde en la solución numérica.

2. Modelo Matemático

Planteo del Problema

El área bajo estudio es la principal zona urbana de la ciudad de San Juan, un cuadrado de $6 \times 6 \text{ km}^2$, 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 puede escribirse:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial C_i u}{\partial x} + \frac{\partial C_i v}{\partial y} + \frac{\partial C_i w}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_V \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) + R_i,$$
$$t \geq 0, \quad 0 \leq x \leq X, \quad 0 \leq y \leq Y, \quad 0 \leq z \leq H,$$

donde C_i es concentración para cada especie; t es tiempo, u, v, w son las componentes de velocidad del viento a lo largo de las coordenadas x, y y z , K_H, K_V coeficientes de difusión horizontal y vertical; el término 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:

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

donde el término $f(x, y, t)$ está determinado por la emisión vehicular que es la 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 [1]:

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

Coeficiente de difusión

La variación vertical de la difusividad se ha tomado de acuerdo a Reynolds y otros [2]:

$$K_v(z) = \begin{cases} [2,5q(x, y, t) - 77,3]z/H + 30,9, & 0 \leq z/H \leq 0,4, \\ q(x, y, t), & 0,4 \leq z/H \leq 0,8, \\ 5[30,9 - q(x, y, t)]z/H + 5q(x, y, t) - 123,6, & 0,8 \leq z/H \leq 1, \end{cases}$$

$$q(x, y, t) = 0,85\sqrt{u^2 + v^2} + 232,$$

Donde las unidades de K_v y q son en m^2/min , y las unidades de las componentes horizontales del viento son en m/min .

Velocidad del viento

La velocidad del viento se mide en solo seis 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 $\text{div} \dot{W} = 0$, donde $\dot{W} = (u, v, 0)$ es el vector velocidad, bidimensional. Se introduce la siguiente representación de las componentes del viento [3]:

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

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:

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

donde la función $P(x, y) = \sum_{i=1}^{2n} a_i P_i(x, y)$ es la solución de la ecuación de Laplace. Se eligen como soluciones de la ecuación de Laplace, las funciones armónicas:

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

donde (x, y) son puntos cualquiera fuera del área bajo estudio. Entonces, 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:

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

donde u_k e 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 [3]:

- 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:

$$\frac{\iint}{\iint z} K_V \frac{\iint u}{\iint z} = 2w_z(v_g - v), \quad \frac{\iint}{\iint z} K_V \frac{\iint v}{\iint z} = 2w_z(u_g - u)$$

donde v_g y u_g son las componentes horizontales del viento geostrófico, w_z es la componente de la velocidad angular de la rotación de la tierra. Las ecuaciones de borde son: $u = u_g$ y $v = v_g$ en $z = H$, y $u = u_a, v = v_a$ en la superficie.

Modelo de emisiones

El modelo de emisiones para los contaminantes atmosféricos en la ciudad de San Juan, está basado en la metodología desarrollada por Costa y Baldasano [4]. La principal fuente de contaminación atmosférica en la ciudad está relacionada con la emisión vehicular. El área bajo estudio es un cuadrado de 144 km² que incluye el área principal de la ciudad, dividida para fines operativos en celdas de 0.6x0.6 km². La figura 1 muestra el área bajo estudio con la correspondiente grilla.

Se aplica la aproximación bottom-up para encontrar el monto emitido por celda en la unidad de tiempo [4,5]. 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. Esta aproximación da un detallado inventario de emisiones, pero requiere un alto esfuerzo computacional, debido a la cantidad de datos involucrados.

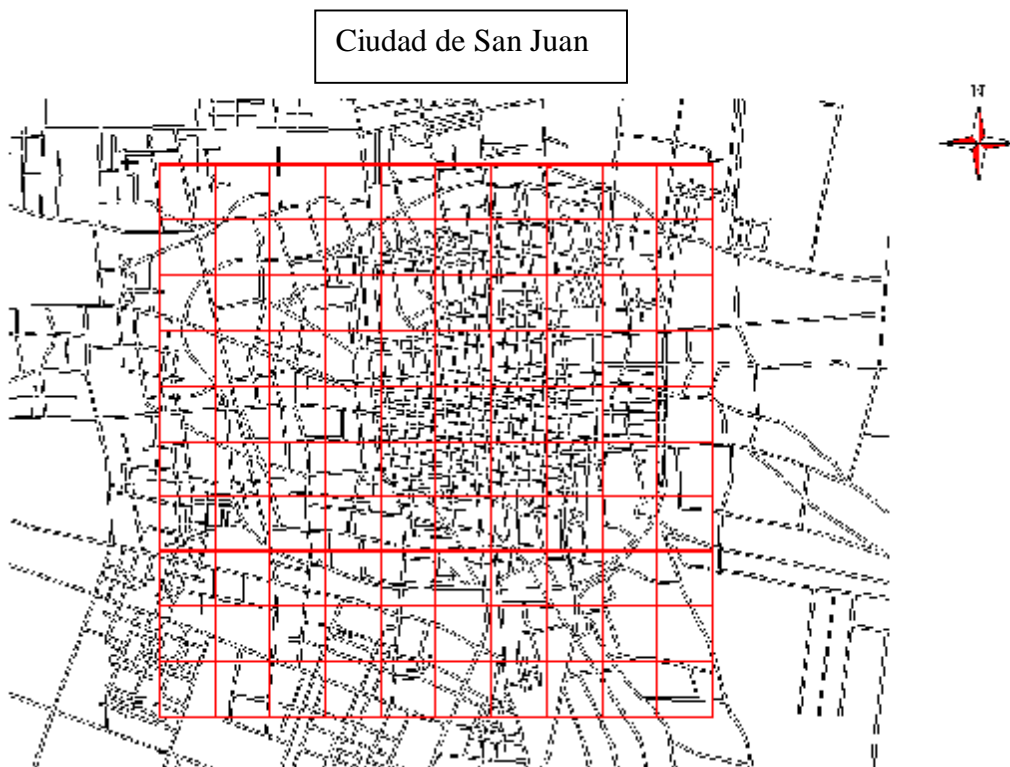


Figura 1: Área bajo estudio

La información del número y tipo de vehículos, consumo de combustibles, tipo de rutas y sus longitudes, etc. se basa en datos de Estadísticas y Censos de San Juan. El número de vehículos para autopistas, rutas y fueron provistos por Vialidad Nacional, que posee cinco

puntos de control en la zona bajo estudio. La evolución del ciclo diario de la intensidad de tránsito en uno de esos puntos de control se muestra en la figura 2.

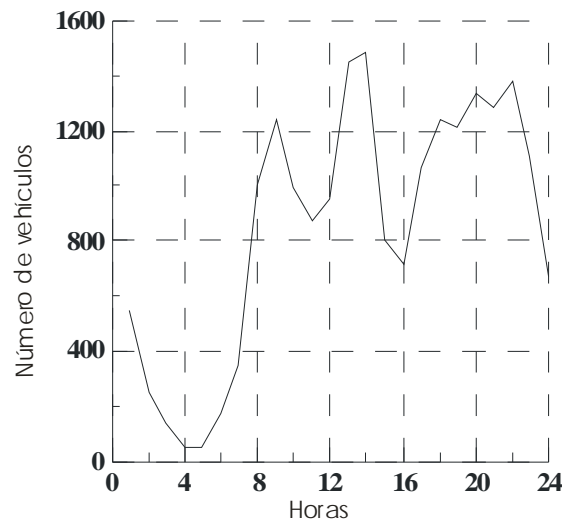


Figura 2: Ciclo diario de vehículos en un punto de control

A los efectos de estimar las emisiones de óxidos de nitrógeno del tránsito vehicular, se deben considerar todos los tipos de rutas: autopistas, carreteras 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.

Emisiones en caliente

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:

$$E_{ij}^h = N_{ij} d_j G_{ij} F_i,$$

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 valores en l / km;

F_i Factor de Emisión de NOx considerado (g / l).

El factor de emisión es función del tipo de contaminante, velocidad de conducción y categoría de vehículo: diesel y nafteros livianos y motocicletas; diesel semi livianos y diesel pesados.

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

$$E_t^h = \sum_i \sum_j N_{ij} d_j G_{ij} F_i$$

Emisiones en frío

Solo se calculan estas emisiones en las rutas de tipo 2 y 3, ya que 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 (independiente del tipo de ruta);

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:

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

Para estimar el número de vehículos de cada tipo que circulan en cada tipo de ruta, se considera que los autos arrancan en frío tres veces al día y se distribuye el número de arranques durante las 24 horas en las cien celdas.

Se determina 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, se suman las emisiones en frío y en caliente.

Cálculo de las emisiones de hidrocarburos

Para el cálculo de las emisiones de hidrocarburos se usa la siguiente fórmula:

$$E_{ij} = N_{ij} d_j F_i$$

Donde

N_{ij} Número de Vehículos circulando por hora por cada tipo de ruta durante las 24 horas.

d_j Longitud de cada tipo de ruta en cada celda en (km).

F_i Factor de emisión de hidrocarbono en (g/km)

Para considerar el total de emisiones en todas las celdas:

$$E_i = \sum_i \sum_j N_{ij} d_j F_i$$

El $F_i = 3.2$ g/km según lo propuesto por De Vlieger (1997).

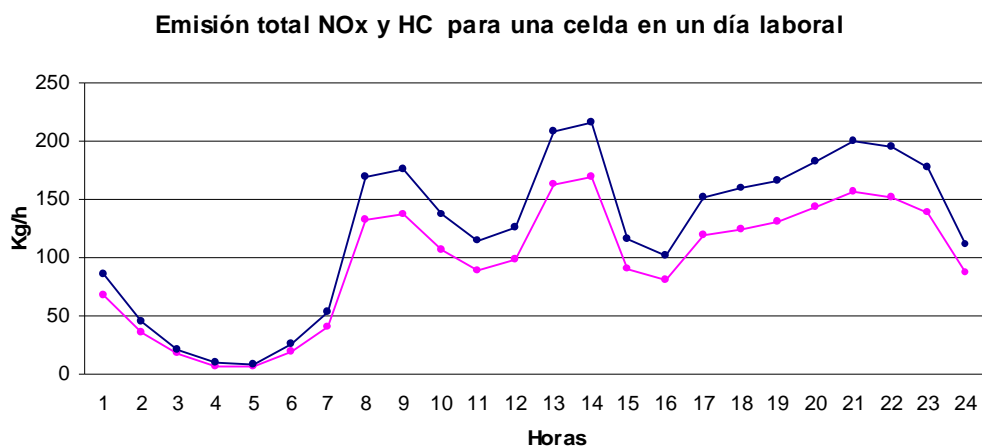
El cálculo de HC, se hace para cada hora del día, aplicando la fórmula.

La siguiente tabla muestra los resultados tanto de las emisiones de NOx como de HC para cada hora de un día:

| Hora | Emisión total NOx (kg/h) por celda | Emisión total HC (kg/h) por celda |
|------|------------------------------------|-----------------------------------|
| 1 | 67 | 85.76 |
| 2 | 35 | 44.8 |
| 3 | 17 | 21.76 |
| 4 | 7 | 8.96 |
| 5 | 6 | 7.68 |
| 6 | 20 | 25.6 |
| 7 | 41 | 52.48 |
| 8 | 132 | 168.96 |
| 9 | 137 | 175.36 |
| 10 | 107 | 136.96 |
| 11 | 89 | 113.92 |
| 12 | 98 | 125.44 |

| Hora | Emisión total NOx (kg/h) por celda | Emisión total HC (kg/h) por celda |
|------|------------------------------------|-----------------------------------|
| 13 | 163 | 208.64 |
| 14 | 169 | 216.32 |
| 15 | 91 | 116.48 |
| 16 | 80 | 102.4 |
| 17 | 119 | 152.32 |
| 18 | 125 | 160 |
| 19 | 130 | 166.4 |
| 20 | 143 | 183.04 |
| 21 | 156 | 199.68 |
| 22 | 151 | 194.88 |
| 23 | 139 | 177.92 |
| 24 | 87 | 111.36 |

Emisiones totales de NOx y HC.



Puede verse que el máximo de emisión de NOX y de HC es a las 14, horario correspondiente a una alta intensidad de tránsito, y con la radiación solar intensa que favorece la transformación fotoquímica.

Debido a los semáforos, en el centro de la ciudad, los automóviles circulan con gran cantidad de aceleraciones y frenadas. Este régimen de movimiento del vehículo, es caracterizado por una elevada emisión de hidrocarburos comparada con la de óxidos de nitrógeno. Contrariamente, los vehículos fuera de la ciudad circulan sin paradas, por lo que las emisiones de NO_x e HC son prácticamente del mismo orden.

La Figura 3 muestra las emisiones de HC en San Juan a mediodía.

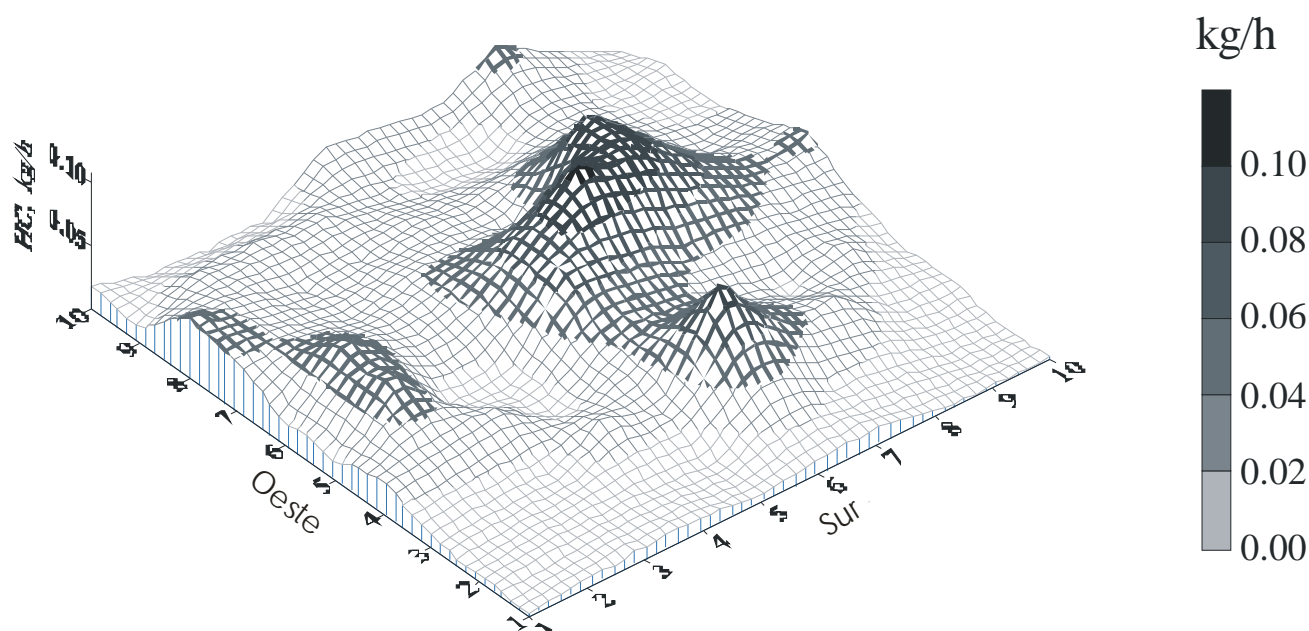
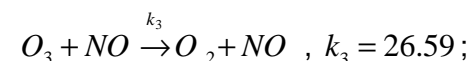
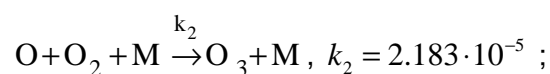
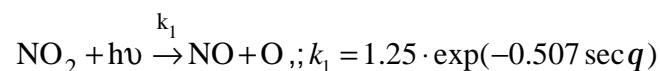
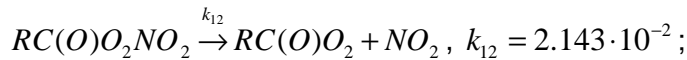
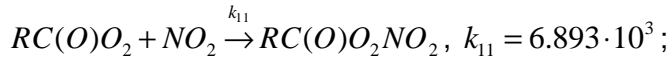
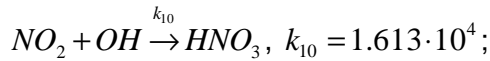
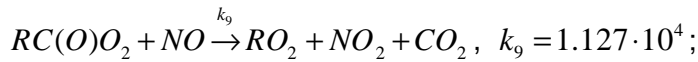
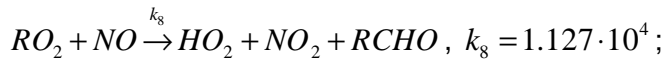
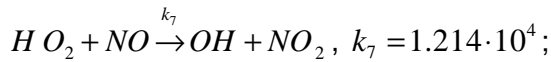
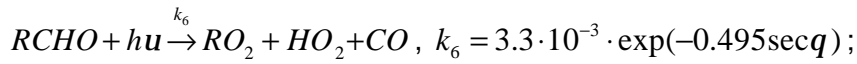
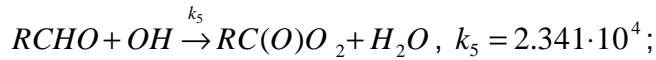
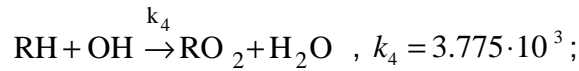


Figura 3: Distribución de Hidrocarburos Calculada en San Juan a las 2 p.m.

Modelo fotoquímico

Las transformaciones químicas resultan en la formación de smog [6]. En este análisis están involucradas las siguientes:





donde las velocidades de reacción son en $\text{ppm}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$ (excepto las unidades de k_1 y k_6 que están en 1/min). El correspondiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias es un sistema rígido. Para resolver este sistema se aplica el IMSL implementado en MS-Fortran.

3. Método de simulación

Condiciones iniciales y de frontera. Generalmente se consideran condiciones de frontera del tercer tipo, es decir: $-K_H \frac{\partial C}{\partial x_i} = v(C - C_{ext})$, donde C_{ext} 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 parte superior de la capa límite atmosférica. La superficie inferior del paralelepípedo (la superficie terrestre) tiene una emisión de potencia S_i .

Método Split

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

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

donde los operadores diferenciales, \hat{L}_1 y \hat{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 ha permitido 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 numéricos

El modelo se aplica 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 depende de los parámetros meteorológicos. Por ejemplo cielos nublados desplazan los máximos hacia horas de la tarde.

En la figura 4 se muestran las concentraciones de ozono en la superficie de la ciudad de San Juan, en un día típico de verano. Puede observarse que las concentraciones de ozono exceden el valor crítico de 85 ppb durante 5 a 8 horas por día.

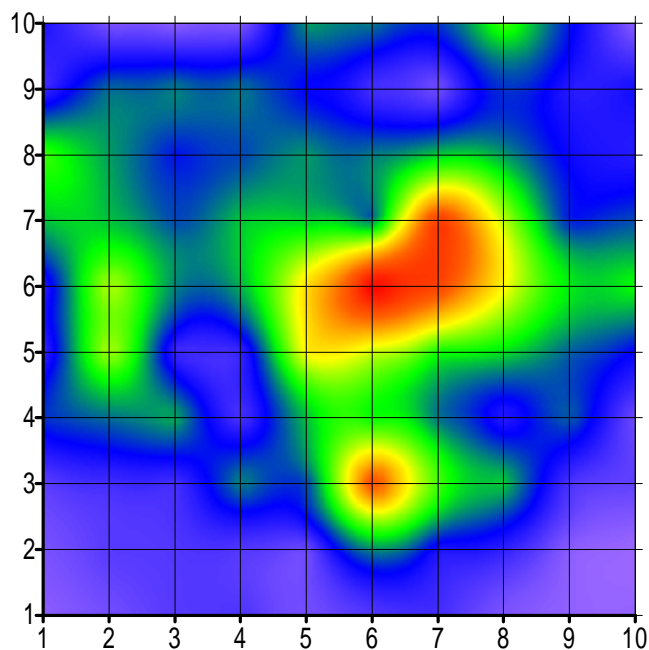


Figura 4: Mapa de concentración de ozono en el centro de San Juan

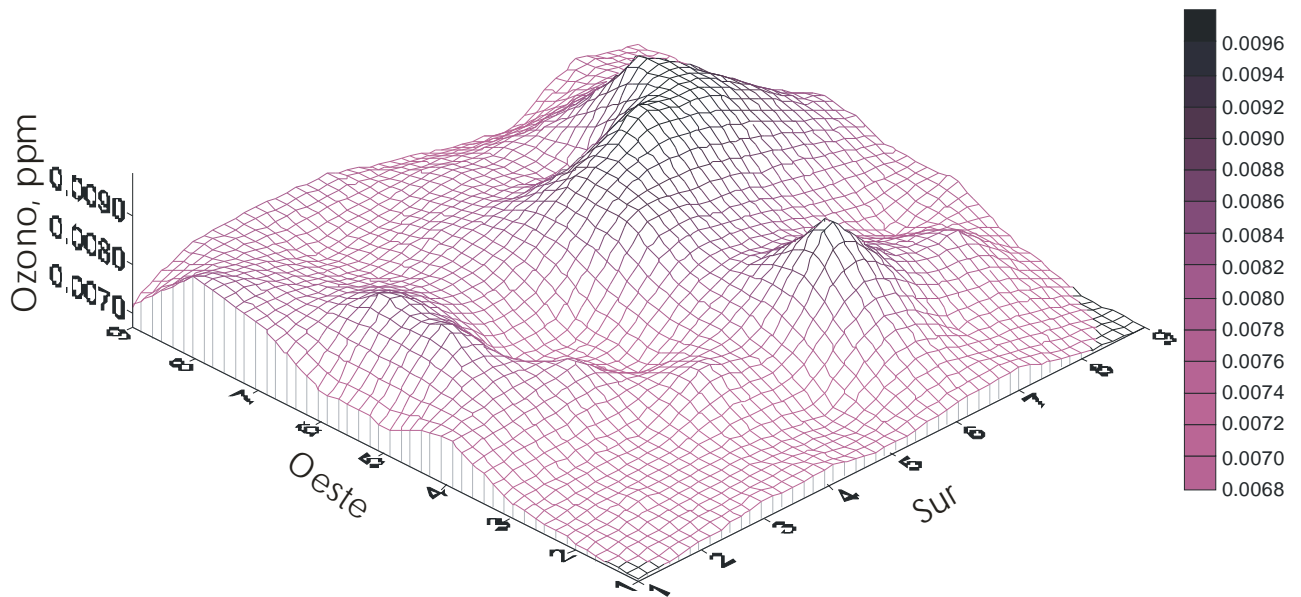


Figura 5: Distribución del ozono en San Juan a las 2 p.m.

5. Conclusiones

Los cálculos que se muestran de la emisión de los óxidos de nitrógeno para el área de San Juan son de un nivel de contaminación significativos comparados con la contaminación que se observa en grandes urbes, a pesar de que el nivel de ozono proporciona valores más bajos que los reales al no considerar un conjunto de reacciones con los Compuestos Orgánicos Volátiles (VOCs). Estos últimos permiten un aumento significativo del ozono al disminuir los NO que a su vez disminuyen el nivel del ozono.

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

6. Referencias

- [1] Chang Y.S., Carmichael G.R. & Kurita H. The transport and formation of photochemical oxidants in Central Japan. *Atmospheric Environment*, **23(2)**, pp. 363-393, 1989.
- [2] Reynolds S.D., Roth P.M. & Seinfeld J.H. Mathematical modelling of photochemical air pollution-I. *Atmospheric Environment*, **7**, pp.1033-1061, 1973.

- [3] Samarskaya E.A. Formulation of mathematical model of air pollution propagation in atmosphere. *Mathematical modelling*, **9(11)**, pp. 59-71, 1997. (In Russian).
- [4] Costa M. & Baldasano J.M. Development of a source emission model for atmospheric pollutants in the Barcelona area. *Atmospheric Environment*, **30(2)**, pp. 309-318, 1986.
- [5] Lobil W., Orthofer R. & Winiwarter W. Spatially disaggregated emission inventory for anthropogenic NMVOC in Austria. *Atmospheric Environment*, **27A**, pp. 2575-2590, 1993.
- [6] Seinfeld J.H. *Atmospheric chemistry and physics of air pollution*. N.J. Wiley. 1986.