



**UNSAM**

UNIVERSIDAD  
NACIONAL DE  
SAN MARTÍN

## **UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN MARTÍN**

**INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN E INGENIERÍA AMBIENTAL**

**Nuevas herramientas para el estudio de la dispersión atmosférica de contaminantes en regiones de fuerte contraste térmico horizontal. Caso de estudio en la zona del río Uruguay en inmediaciones de Gualeguaychú.**

Trabajo de Tesis para optar por el título de  
Doctor en Ciencia y Tecnología Mención Química

Por: ***ORCELLET Emiliana Elisabet***

Director de Tesis: Dr. Guillermo J. Berri

Co-directora: Dra. Gabriela V. Müller

Asesor: Dr. Cesar A. Aguirre

Lugar de Trabajo: Facultad de Ciencias de la Salud - UNER

**Nuevas herramientas para el estudio de la dispersión atmosférica de contaminantes en regiones de fuerte contraste térmico horizontal. Caso de estudio en la zona del río Uruguay en inmediaciones de Gualeguaychú.**

INDICE	Apartado	Pagina
<b>Resumen</b>	-	6
<b>Abstract</b>	-	7
<b>Introducción</b>	-	8
<b>Capítulo I: Objetivos</b>	-	11
• Objetivo general	1.1	11
• Objetivo específico	1.2	11
<b>Capítulo II: Emisiones de compuestos de azufre total reducido (TRS)</b>	-	13
• Proceso de producción de pasta celulosa	2.1	13
• Emisiones de TRS durante el proceso de producción	2.2	15
• Umbrales de detección de olor de los compuestos TRS	2.3	16
• Índice de detección de olor	2.4	18
• Química de los compuestos TRS en la atmósfera	2.5	19
Reacción entre las especies H <sub>2</sub> S y OH	2.5.1	19
• Características de las fuentes de emisión	2.6	20
Ubicación de la fábrica de pasta celulosa	2.6.1	20
Distancia a los principales receptores argentinos	2.6.2	21
Emisiones Puntuales	2.6.3	22
Datos de las fuentes puntuales	2.6.3.1	23
• Emisiones Difusas	2.6.4	24
Sistema de Tratamiento de Efluentes Líquidos	2.6.4.1	24
• Tasas de Emisión	2.6.5	25
Distribución de la emisión de los componentes de TRS	2.6.5.1	26
• Conclusión	2.7	27
<b>Capítulo III: Registro de denuncias</b>	-	29
• Conclusión	3.1	31
<b>Capítulo IV: Descripción de los modelos y los datos empleados</b>	-	32
• Modelo ARPS-STO	4.1	32
Esquema numérico de resolución	4.1.1	33
Las ecuaciones del modelo	4.1.2	33
Modelo Smagorinsky dinámico para la resolución del tensor de Reynolds de sub-malla	4.1.3	35
• Modelo estocástico lagrangiano	4.2	38
La ecuación de Langevin	4.2.1	39
La ecuación de Fokker-Plank	4.2.2	40
La Función de Densidad Filtrada del Campo de Velocidad (VFDF)	4.2.3	41
El sistema de ecuaciones estocástico lagrangiano	4.2.4	41
Calculo de velocidad vertical	4.2.5	42
• Modelo de difusión y reacciones químicas (LES-STO)	4.3	43
La difusión por contacto	4.3.1	43

Modelo de reacciones químicas (LES-STO)	4.3.2	43
• Modelo MCLM	4.4	44
Validación del viento calculado con el modelo MCLM	4.4.1	47
• Datos de la modelación	4.5	49
• Conclusión	4.6	57
<b>Capítulo V: Resultados del modelo ARPS-STO-MCLM</b>	-	59
• Simulación de los eventos de olor	5.1	59
• Resumen de resultados	5.2	60
• Casos especiales	5.3	61
• Conclusión	5.4	62
<b>Capítulo VI: Resultados del modelo Hysplit</b>	-	68
• Resultado de la modelación con Hysplit versión off-line	6.1	69
Resumen de resultados con Hysplit versión off-line	6.1.1	71
• Resultado de la modelación con Hysplit versión on-line	6.2	72
Resumen de resultados con Hysplit versión on-line	6.2.1	74
• Conclusión	6.3	75
<b>Capítulo VII: Resultados del modelo de reacciones químicas LES-STO acoplado al modelo ARPS-STO-MCLM</b>	-	76
• Resultado de las modelaciones	7.1	77
• Conclusión	7.2	79
<b>Capítulo VIII: Discusión de resultados</b>	-	80
<b>Capítulo IX: Conclusiones</b>	-	84
Referencias	-	86
Anexo I	-	90

## **RECONOCIMIENTOS**

Este trabajo se ha realizado con el apoyo del proyecto PICT2008-1417 de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT), mediante una beca de Nivel Inicial.

La realización de esta tesis fue posible gracias a la dirección del Dr. Guillermo J. Berri y la co-dirección de la Dra. Gabriela V. Müller, quienes han acompañado plenamente el desarrollo de mis actividades académicas y de investigación.

Al asesoramiento brindado por el Dr. Cesar Aguirre en el uso de la herramienta metodológica empleada y por el apoyo continuo en el desarrollo de mi tesis.

Además se agradece a la Facultad de Ciencias de la Salud de la Universidad Nacional de Entre Ríos que ha brindado su espacio para el desarrollo de las actividades de investigación.

También quiero brindar mi reconocimiento a todas aquellas personas que en forma directa o indirecta contribuyeron a que este trabajo de investigación pudiera llevarse a cabo.

Por último un agradecimiento profundo a mi familia por la constante paciencia y apoyo que siempre demostraron.

## RESUMEN

El objetivo general del trabajo es el desarrollo de una nueva herramienta de modelado numérico para ser utilizada en estudios de dispersión atmosférica de contaminantes a escala regional sobre zonas ribereñas de fuerte contraste térmico horizontal, la que se adapta a la región del río Uruguay en inmediaciones de la localidad Gualeguaychú, Provincia de Entre Ríos. Para ello se emplea el modelo Advanced Regional Prediction System (ARPS), acoplado al Modelo de Capa Límite en Mesoescala (MCLM), y se realiza una validación de la misma empleando la información disponible de la zona.

Se modelan once eventos de mal olor que tuvieron lugar entre septiembre y diciembre de 2009, atribuidos a las emisiones de azufre total reducido (TRS) de una fábrica de pasta de celulosa de la zona, que motivaron la intervención del municipio local. Nueve de los once eventos simulados resultan exitosos ya que coincide la posición de la pluma modelada en relación al lugar de la denuncia, con el resultado de la constatación de la misma. El empleo de otro modelo de dispersión, con el objeto de realizar una validación independiente, da coincidencia de resultados en más de la mitad de los casos.

Se incorpora además un modelo de reacciones químicas para el cálculo de la concentración de sulfuro de hidrógeno, componente mayoritario de los compuestos TRS, resultando que en los casos estudiados el índice de olor calculado supera el umbral de detección en los puntos de las denuncias.

La conclusión del estudio es que, a pesar de la natural incertidumbre de los resultados de la simulación numérica, la herramienta de modelado desarrollada se puede utilizar tanto en estudios de diagnóstico de situaciones, empleando información meteorológica histórica, como en la previsión de situaciones conflictivas e incluso de emergencia, empleando en este caso pronósticos meteorológicos a corto plazo que la misma herramienta puede generar.

**Palabras claves:** modelado numérico, dispersión atmosférica, ambientes costeros, diagnóstico y pronóstico.

## **ABSTRACT**

The objective of this work is to develop a new tool for the study of atmospheric dispersion of pollutants over riverside areas of strong surface thermal contrast, which is adapted to the region of the Uruguay River region in the vicinity of Gualeguaychú, Argentina. For this purpose, the Advanced Regional Prediction System (ARPS) is employed, coupled to the Boundary Layer Forecast Model (MCLM), and a validation is performed using the information available for the area.

Eleven malodor events, in which the local authorities intervened and are attributed to the total reduced sulfur (TRS) emissions from a local pulp mill plant, are modeled during the period September-December 2009. Nine of them are successful modeling cases since the position of the modeled plume, with respect to the location of the events; coincide with its verification. The use of another dispersion model, with the purpose of an independent validation, agrees with the results in more than half the cases.

A chemical reaction model is incorporated in order to calculate the concentration of hydrogen sulfide, the main TRS component. The odor detection index calculated for the studied cases is above the detection threshold in the location of the complaint.

The conclusion of the study is that, despite the inherent uncertainty of numerical simulation results, the implemented modeling system can be used not only for diagnostic studies, using historical information, but also for forecasting potentially conflictive situations, using in this case short term meteorological forecasts that the self-tool can generate.

**Keywords:** numerical modeling, atmospheric dispersion, riverside areas, diagnosis and forecast.

## INTRODUCCIÓN

El término dispersión atmosférica se refiere al conjunto de procesos que ocurren en la atmósfera y por los cuales se transportan, diluyen y remueven los contaminantes hasta alcanzar una fuente receptora. En este contexto, la dispersión de los contaminantes está determinada tanto por variaciones locales, regionales o globales de las condiciones atmosféricas, como así también por diversos efectos ligados a la topografía del lugar y las características físicas y propiedades térmicas de la superficie terrestre. El movimiento atmosférico tiene su origen en el calentamiento desigual de la superficie de la Tierra y los relieves naturales del terreno, de diferentes dimensiones, y los contrastes físicos de la superficie modifican el régimen local de los vientos, con un efecto directo sobre el movimiento de los contaminantes en la atmósfera. Por lo tanto, si se desea entender y, en alguna medida, modelar la dispersión, la transformación química y el destino de los contaminantes emitidos a la atmósfera, es necesario comprender los procesos atmosféricos básicos que influyen en su movimiento y su transformación, y también las escalas espaciales y temporales en que se registran.

Los cuerpos extensos de agua ejercen una acción condicionante y reguladora del tiempo y el clima local sobre una amplia región que se extiende hacia el interior de la tierra firme. Las regiones lindantes con extensos espejos de agua constituyen zonas de fuerte contraste térmico superficial debido a la marcada diferencia entre la capacidad calorífica de la tierra y el agua. En tal condición se desarrolla una circulación local en las capas bajas de la atmósfera conocida con el nombre de brisa de mar-tierra. La misma debe su existencia a la diferencia de temperatura entre el agua y la tierra y está caracterizada por un flujo local del aire en capas bajas de la zona más fría a la zona más caliente. El contraste térmico tierra-agua acompaña en su variación al ciclo diario de la temperatura, lo que a su vez le imprime una característica variable a esta brisa. Además, la geometría de las costas condiciona fuertemente el movimiento atmosférico en capas bajas al determinar zonas fijas de convergencia y divergencia del flujo del aire. El movimiento atmosférico en esta situación puede presentar complejas características de naturaleza tridimensional con significativa variación temporal.

El río Uruguay en inmediaciones de Gualaguaychú presenta un ancho variable entre 2 y 8 kilómetros, que sumado al cambio de noventa grados en la orientación del curso de agua al pasar de la dirección este-oeste a la dirección norte-sur, constituyen ingredientes apropiados para imprimirle a la circulación atmosférica en las capas bajas de la región características

inhomogéneas. El estudio de la contaminación ambiental originada por las emisiones al aire en un ambiente de características meteorológicas variables y complejas como esa región del río Uruguay requiere del empleo de herramientas apropiadas, condición que los métodos y modelos tradicionales normalmente no satisfacen.

La circulación atmosférica en capas bajas en regiones costeras ha sido ampliamente estudiada en forma teórica y experimental, como así también ha sido simulada empleando modelos numéricos atmosféricos. Por ejemplo, en el caso del Río de La Plata la circulación atmosférica de capas bajas fue simulada por Berri et al. (2010) empleando un modelo de capa límite en mesoescala especialmente diseñado por la región, con el que logran reproducir las observaciones. Otros modelos de mesoescala se han empleado en el estudio de la circulación de la brisa de mar y tierra, por ejemplo Case et al. (2004) que usó el Sistema de Modelado Regional Atmosférico (RAMS) acoplado al modelo Eta, Colby (2004) que usó el modelo MM5 y Zhang et al. (2005) que usó el modelo de mesoescala espectral NCEP.

El objetivo general de este trabajo es desarrollar una nueva herramienta para el estudio de la dispersión atmosférica de contaminantes en la zona del río Uruguay en inmediaciones de Gualaguaychú. Las características de la zona, como se indicó, requieren de la adaptación de un modelo a la escala de la región que permita representar acertadamente los detalles de circulación atmosférica. Para lograr ese objetivo se emplea el modelo ARPS (Advanced Regional Prediction System), desarrollado por el Center of Analysis and Prediction of Storms de la Universidad de Oklahoma, acoplado al Modelo de Capa Límite en Mesoescala –MCLM- desarrollado por Berri et al. (2010).

Para validar la herramienta desarrollada se modela una serie de eventos de contaminación regional por las emisiones de compuestos de azufre total reducido (TRS por sus siglas en inglés – Total Reduced Sulphur-), producidas por la fábrica de pasta de celulosa de la localidad de Fray Bentos, República Oriental del Uruguay. Son esos los únicos casos en que hay información de libre acceso sobre la contaminación de aquel origen. Esos eventos estuvieron caracterizados por episodios de mal olor en diferentes puntos de la región, los que fueron registrados y constatados por el Plan de Vigilancia Ambiental del municipio local. La ubicación de los puntos de las denuncias y el momento en que ocurrieron se comparó con la localización de la pluma contaminante simulada por el modelo a nivel de respiración humana para ese mismo momento.

En el Capítulo 1 se describen los objetivos generales y específicos del presente trabajo. En el Capítulo 2 se realiza una descripción general del caso de estudio seleccionado y sus características. El Capítulo 3 se refiere al registro de denuncias del Plan de Vigilancia Ambiental. En el Capítulo 4 se describen los modelos y los datos empleados en el desarrollo del trabajo. En el

Capítulo 5 se presentan los resultados de la aplicación del modelo ARPS-STO-MCLM, en el Capítulo 6 los resultados del modelo Hysplit off-line y on-line. En el Capítulo 7 se muestran los resultados de la aplicación del modelo de reacciones químicas LES-STO. En el apartado 8 se realiza la discusión de los resultados obtenidos y en el Capítulo 9 se presentan las conclusiones de la tesis

# CAPITULO I

## OBJETIVOS

### 1.1 Objetivo general

El objetivo general de este trabajo es desarrollar una nueva herramienta para el estudio de la dispersión atmosférica regional de contaminantes en la región del río Uruguay en inmediaciones de la localidad Gualeguaychú, Provincia de Entre Ríos, mediante el empleo del modelo Advanced Regional Prediction System – Lagrangian Stochastic Model (ARPS-STO), acoplado al Modelo de Capa Límite en Mesoescala (MCLM), y realizar una validación de la misma empleando la información disponible de la zona.

### 1.2 Objetivos específicos

- a) Adaptar el modelo ARPS-STO, acoplado al modelo MCLM, para el estudio de la dispersión atmosférica de contaminantes sobre la región del río Uruguay en inmediaciones de Gualeguaychú.
- b) Seleccionar una serie de eventos de contaminación regional por los malos olores producidos por las emisiones de compuestos TRS desde la fábrica de pasta de celulosa de la localidad de Fray Bentos, República Oriental del Uruguay.
- c) Modelar la dispersión atmosférica de TRS de los eventos seleccionados empleando el modelo ARPS-STO-MCLM.
- d) Validar el viento calculado por el modelo ARPS-STO-MCLM durante los eventos seleccionados, con las observaciones de una torre meteorológica del lugar.

- e) Comparar la posición de la pluma contaminante simulada por el modelo ARPS-STO-MCLM con la ubicación de los puntos de la región en donde el Plan de Vigilancia Ambiental del municipio local registró y constató los eventos de mal olor.
- f) Incorporar al modelo ARPS-STO-MCLM el módulo de reacciones químicas LES-STO para calcular las concentraciones de sulfuro de hidrógeno a nivel de respiración humana.
- g) Comparar la concentración calculada con los umbrales de detección de la sustancia.
- h) Evaluar la utilidad del sistema de modelado de dispersión atmosférica de emisiones contaminantes en la región, y su empleo en el diagnóstico y previsión del impacto ambiental de situaciones potencialmente conflictivas.

## **CAPITULO II**

### **EMISIONES DE COMPUESTOS DE AZUFRE TOTAL REDUCIDO (TRS)**

Este capítulo tiene por objetivo general describir la forma en que se producen las emisiones de TRS, los componentes que lo forman y sus propiedades olorosas y las características físicas de las emisiones. Se presentan las generalidades del proceso de producción de pasta celulosa y el origen de las emisiones de compuestos TRS. Se describen las propiedades de estos compuestos azufrados, en particular lo que se refiere a la generación de olores desagradables, el valor del umbral de concentración en aire que los hace perceptibles, y los índices utilizados para determinar la percepción o no de los mismos.

Se detalla la ubicación de la fábrica de pasta celulosa y se describen las diferentes fuentes de emisión consideradas en el estudio. Se detallan los datos físicos de cada una de las fuentes puntuales y difusas, y en particular de qué manera se calcularon las tasas de emisión a partir de información básica.

Es importante destacar que los datos empleados se tomaron del Informe de Estudio de Impacto Ambiental (EsIA) que la consultora Ecometrix realizó en el año 2006, ya que es la única fuente bibliográfica disponible que detalla los datos de la fuente en cuestión. Los resultados del EsIA se presentaron ante organismos nacionales e internacionales en el momento previo a la instalación de la fábrica de pasta celulosa. Esos datos reflejan detalles del diseño de la planta y fueron aportados por la empresa al momento de la realización del EsIA correspondiente. No es posible disponer de datos de monitoreos realizados luego de la puesta en servicio de la planta, ya que los mismos son registrados bajo normas de estricta confidencialidad de los organismos fiscalizadores, y en consecuencia no es posible verificar la calidad o veracidad de tales datos.

#### **2.1 Proceso de producción de pasta celulosa**

El proceso básico para fabricar pasta celulosa consiste en la eliminación de la lignina. Este compuesto, constituyente de la madera y que actúa como cemento en su estructura, es el principal obstáculo para poder obtener celulosa de buena calidad.

El proceso consta de dos etapas claramente diferenciadas: el pulpaje y el blanqueo, resultando relevante a los fines del presente trabajo la primera de ellas, cuyo objetivo es remover la lignina para liberar la fibra de celulosa, separándola de los otros componentes.

Este proceso puede ser de dos tipos: mecánico o químico, siendo para este último caso el método denominado Kraft el más empleado a nivel mundial.

Este método consiste en descortezar los trozos de madera para luego reducir los mismos a astillas. Dichas astillas son transportadas a través de correas a reactores, denominados digestores, donde se cuece con hidróxido de sodio, sulfuro de sodio y carbonato cálcico (licor blanco), a 200 °C y alta presión para reducir los trozos a una pulpa, disolviendo gran parte de la lignina que une a las fibras de madera, liberando así dichas fibras (ver Figura 2.1).

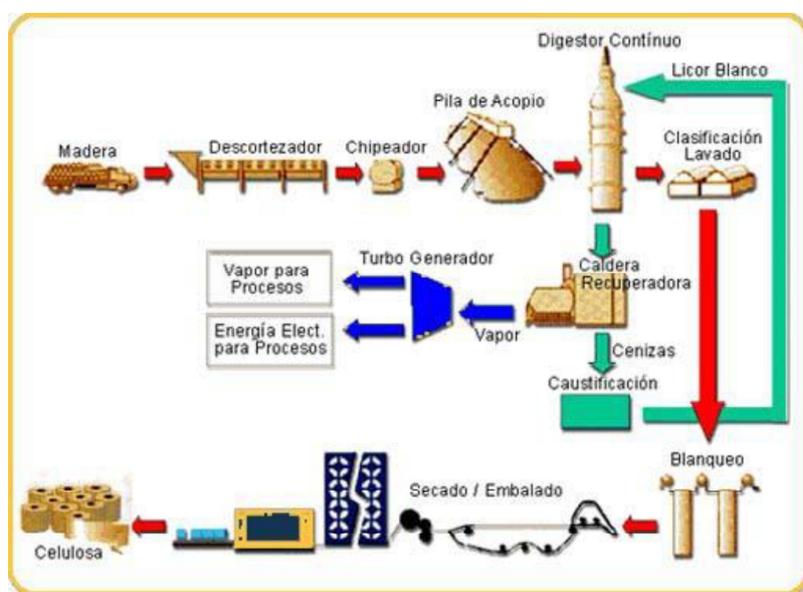


Figura 2.1: Esquema simplificado de proceso de producción de pasta celulosa. (Fernández Diez, 2010)

Después de la cocción, se separan los gases sulfúricos para ser tratados (generalmente son incinerados), y el resto de la mezcla es filtrada por diferentes mecanismos para retirar los trozos que no se han degradado durante la cocción.

El producto de la cocción se procesa en filtros lavadores. La pulpa es enjuagada con agua para arrastrar los líquidos de cocción y recuperar los compuestos químicos utilizados. La pasta es filtrada y espesada al quitarle agua, donde se separan las fibras y el licor residual. La pulpa obtenida se clasifica, limpia, espesa y almacena.

La mezcla de madera disuelta y productos químicos, denominada licor negro, es usualmente removida de la lavadora con alrededor de un 14 a 17 % de sólidos. Luego es concentrada a través de la evaporación hasta un nivel de 65% en sólidos de los cuales entre un 3 y un 5% están compuestos por especies azufradas (Harper, 1989).

Después de este proceso, el licor negro es rociado dentro de la caldera de recuperación la cual es similar a una caldera convencional, dentro de la cual el agua residual se evapora y el material orgánico se quema. La fracción inorgánica se recupera como compuestos de sodio. La mayor parte del azufre se reduce para formar sulfuro de sodio ( $\text{Na}_2\text{S}$ ), y el sodio residual se encuentra en forma de carbonato de sodio ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ). (Ver Figura 2.2).

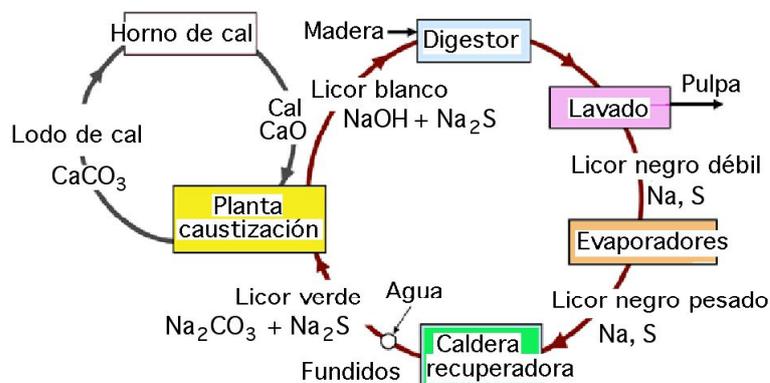
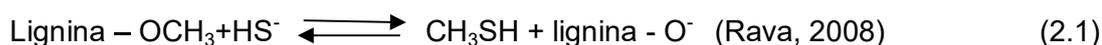


Figura 2.2: Esquema simplificado de proceso de recuperación. (Fernández Diez, 2010)

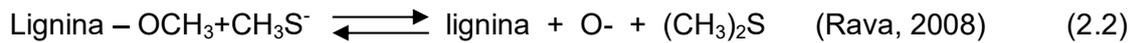
## 2.2 Emisiones de TRS durante el proceso de producción

Durante las diferentes etapas del proceso de fabricación de pasta celulosa se generan emisiones de compuestos TRS entre los cuales se destacan el metil mercaptano, el dimetil sulfuro, el dimetil disulfuro y el sulfuro de hidrógeno.

En el proceso de cocción tiene lugar la reacción (2.1) de formación de metil mercaptano ( $\text{CH}_3\text{SH}$ );



El dimetil sulfuro ( $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ ), es formado por la reacción de los iones mercaptanos ( $\text{CH}_3\text{S}^-$ ) y el grupo metoxi presente en el licor de pulpa y en la estructura de la lignina (Liang, 2008) como se detalla en la reacción (2.2);



Sin embargo el dimetil disulfuro ((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>S<sub>2</sub>), no es formado directamente durante el proceso de cocción, sino como resultado de la oxidación del metil mercaptano cuando el licor negro entra en contacto con el aire en los procesos sucesivos (Liang, 2008), según la reacción (2.3);



Este tiene un punto de ebullición más alto que otros compuestos TRS, por lo tanto la retención en el licor negro es mayor.

El sulfuro de hidrógeno inorgánico (H<sub>2</sub>S) generalmente representa la mayor emisión gaseosa de los procesos Kraft y no se genera en el proceso de cocción debido a las condiciones alcalinas del mismo. Este compuesto es formado en el proceso consecutivo donde el licor negro y las aguas de lavado son almacenadas y el pH decrece por debajo de 10 e incluso a valores menores y el sulfuro de sodio presente en el licor se disocia y se convierte en H<sub>2</sub>S (Liang, 2008).

Un porcentaje menor de sulfuro de hidrógeno es formado, también, durante el proceso de pirólisis del licor negro en la caldera de recuperación (Liang, 2008). En esta línea, este compuesto inorgánico, es generado debido a la presencia de sulfuro de sodio residual (Na<sub>2</sub>S) que no ha sido suficientemente lavado o cuando se utiliza combustible conteniendo cantidades importantes de azufre o cuando los gases no condensables son incinerados (Steen, 1984).

Estos compuestos TRS presentan la particularidad de despedir olores muy característicos que resultan desagradables para el ser humano, por lo cual se los denominan generalmente gases olorosos.

### **2.3 Umbrales de detección de olor de los compuestos TRS**

El nivel de olor se estima a partir de la concentración de la sustancia o conjunto de sustancias de interés y su correspondiente umbral de detección de olores.

El umbral de olor se define como la mínima concentración de una sustancia en el aire que es detectable por el hombre. Los umbrales de olor son altamente variables debido a la distinta capacidad de las personas para detectarlos y a las diferentes condiciones ambientales que pueden alterar la percepción. (EPA, 2002).

Los olores característicos asociados a cada uno de los compuestos TRS se describen en la Tabla 2.1.

Componente	Descripción de Olor
Sulfuro de Hidrógeno	Huevo podrido
Metil mercaptano	Cebolla, ajo
Dimetil sulfuro	Vegetales putrefactos
Dimetil disulfuro	Proceso de putrefacción

Tabla 2.1: Componentes de los TRS y descripción de los olores característicos. (Arellano, 2009)

En la Tabla 2.2 se detallan los efectos de la exposición de los seres humanos al sulfuro de hidrógeno por inhalación, descritos por la EPA en el documento denominado Control of TRS Emisión for Existing Mills, (1979).

Concentración de H <sub>2</sub> S (µg/m <sup>3</sup> )	Efectos
1 – 45	Umbral de olor. No causa daños a la salud
10	Efectos en ojos, sensibilidad a la luz
150	Olor ligeramente perceptible
500	Olor definido
15000	Concentración mínima que causa irritación ocular
30000	Concentración máxima tolerable para una jornada laboral de 8 hs
30000 – 60000	Fuerte olor perceptible pero no intolerable. Mínima concentración que causa irritación pulmonar.
150000	Fatiga olfatoria en 2-15 min. Irritación ocular y respiratoria en 1 h. Muerte en 8 a 48 hs.
270000 – 480000	No serios daños por 1 h pero intensa irritación local. Irritación ocular de 6 a 8 min.
460000 – 1120000	Concentración peligrosa después de 30 min o menos.
900000	Fatal en 30 min.
1160000 – 1370000	Rápida inconciencia. Detención del sistema respiratorio y muerte. Posiblemente sin percepción de olor.
1500000 +	Inmediata inconciencia y muerte

Tabla 2.2: Efectos de la exposición de los seres humanos al sulfuro de hidrógeno por inhalación. (EPA, 1979).

La Organización Mundial de la Salud (OMS) estableció para el sulfuro de hidrógeno umbrales de detección, reconocimiento y valor guía de olor, basados en datos proporcionados por paneles de expertos y estudios experimentales (OMS, 2000), que se presentan en la Tabla 2.3.

Sustancia	Umbral de detección (µg/m <sup>3</sup> )	Umbral de reconocimiento (µg/m <sup>3</sup> )	Valor Guía (µg/m <sup>3</sup> )
Sulfuro de Hidrógeno	0.2- 2	0.6 - 6	7

Tabla 2.3: Umbrales de detección, reconocimiento y valor guía de Sulfuro de Hidrógeno. (OMS, 2000).

Entiéndase como umbral de reconocimiento a la mínima concentración de una sustancia que puede ser identificada por el hombre cuyo olor es atribuido directamente a dicho compuesto, y valor guía aquel definido a los efectos de proteger la salud pública, considerando que por debajo del mismo no se presentan riesgos a los individuos expuestos.

En la Tabla 2.4 se presentan los umbrales de detección para el metil mercaptano, dimetil sulfuro y dimetil disulfuro propuesto por la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (EPA).

Compuestos	Umbral de olor ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )
Metil Mercaptano $\text{CH}_3\text{SH}$	4.5
Dimetil Sulfuro $(\text{CH}_3)_2\text{S}$	2.9
Dimetil Disulfuro $(\text{CH}_3)_2\text{S}_2$	23.7

Tabla 2.4: Umbrales de olor para metil mercaptano, dimetil sulfuro, dimetil disulfuro. (EPA, 1979).

En la Tabla 2.5 se presentan los umbrales promedios utilizados para evaluar los impactos en el EsIA realizado por Ecometrix (2006), Anexo C.

Sulfuro de Hidrógeno ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )	Metil Mercaptano ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )	Dimetil Sulfuro ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )	Dimetil Disulfuro ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )
0.7	2	3	23

Tabla 2.5: Umbrales promedio de detección de olor obtenidos del Informe de Ecometrix, (2006).

Los valores de la Tabla 2.5, son concordantes con los establecidos por los otros organismos (OMS y EPA, ver Tablas 2.2, 2.3 y 2.4), razón por la cual en el presente trabajo se emplean los valores de la Tabla 2.5 para el cálculo del índice de detección de olor ( $I_o$ ) que se describe a continuación.

## 2.4 Índice de detección de olor

Los efectos odoríferos causados por la combinación de varios gases pueden ser aditivos o antagonicos (Ecometrix, 2006). A los compuestos TRS se les atribuye un impacto odorífero aditivo, que se calcula a partir de la suma de las concentraciones registradas de cada compuesto, divididos por su respectivo umbral de detección. Esta sinergia entre los compuestos TRS se basa en estudios de Vanderstraeten y colaboradores (1988), quienes han determinado que la intensidad de las mezclas es influenciada de manera más fuerte por mercaptanos y otros compuestos polisulfurados que por la presencia de  $\text{H}_2\text{S}$ .

El impacto odorífero combinado de los cuatro componentes se calcula como la suma de la relación entre la concentración de cada componente en aire y su respectivo umbral de detección de olor, según la ecuación (2.4);

$$I_o = \frac{C_{H_2S}}{UO_{H_2S}} + \frac{C_{CH_3HS}}{UO_{CH_3HS}} + \frac{C_{(CH_3)_2S}}{UO_{(CH_3)_2S}} + \frac{C_{(CH_3)_2S_2}}{UO_{(CH_3)_2S_2}} \quad (2.4)$$

dónde  $I_o$  es el índice de detección de olor, el numerador es la concentración de cada componente de TRS calculada con el modelo y el denominador es el umbral de detección de olor de cada uno de ellos.

Según el informe de Ecometrix (2006) los impactos odoríferos son reconocibles cuando  $I_o \geq 3$ , generan quejas cuando  $I_o \geq 5$  y son objetables cuando  $I_o \geq 10$ , lo que se resume en la Tabla 2.6.

Valor de $I_o$	Resultado
$I_o \geq 3$	Olor reconocible
$I_o \geq 5$	Olor denunciabile
$I_o \geq 10$	Olor objetable

Tabla 2.6: Índice de detección de olor según Anexo C del informe Ecometrix, (2006).

En este último aspecto se destaca que no se ha encontrado alguna otra referencia que defina los impactos odoríferos asociados al índice de detección, por lo cual se considera esta escala para la comparación y descripción de los resultados obtenidos.

## 2.5 Química de los compuestos TRS en la atmósfera

### 2.5.1 Reacción entre las especies $H_2S$ y OH

La reacción entre las especies  $H_2S$  y OH ha sido suficientemente estudiada (Baulch et al., 1982; Grosjean et al., 1984; Seinfeld, 1986) y se conocen los productos de la misma como así también los tiempos de residencia en la atmósfera. De todas formas, estas reacciones están basadas en concentraciones estimadas de OH del orden de  $10^6$  moléculas por  $cm^3$  (Seinfeld, 1986).

En este trabajo se considera la reacción (2.5):



Las ecuaciones (2.6) de velocidad de reacción son las siguientes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[H_2S]}{dt} = -k[H_2S][OH] \\ \frac{d[OH]}{dt} = -k[H_2S][OH] \\ \frac{d[H_2O + SH^-]}{dt} = k[H_2S][OH] \end{array} \right. \quad (2.6)$$

Donde  $k = 5,3 \cdot 10^{-12}$  ( $\text{cm}^3 \cdot \text{molécula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ) según Baulch et al. (1982); es decir  $k = 130,425$  ( $\text{ppm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ). (Para detalles del cálculo ver Anexo 1).

## 2.6 Características de las fuentes de emisión

### 2.6.1 Ubicación de la fábrica de pasta celulosa

La Figura 2.3 ilustra la ubicación de la fábrica de pasta celulosa, su zona de influencia y los principales puntos de impacto considerados en este estudio. La misma se encuentra en la margen izquierda del río Uruguay. Su ubicación próxima al río y cerca de donde éste cambia de curso le otorga características geográficas particulares a la zona de estudio que deben ser consideradas al momento del empleo de los modelos de dispersión atmosférica. En la Figura 2.4 se presenta una vista general del establecimiento donde se pueden apreciar las dimensiones de dicho emprendimiento y su proximidad al curso de agua.

La zona de estudio se definió considerando la ubicación de los principales posibles receptores argentinos, los cuales son: ciudad de Gualeguaychú, Pueblo General Belgrano, Balneario Ñandubaysal y Puente Internacional. (Ver Figura 2.5).



Figura 2.3: Vista general de la zona de influencia.



Figura 2.4: Vista General de la planta de pasta celulosa. Fuente: Google Earth 2015.

### 2.6.2 Distancia a los principales receptores argentinos

En la Figura 2.5 se pueden apreciar las distancias desde la fábrica de pasta celulosa hasta los principales puntos de interés para este trabajo. Es así que el punto más alejado de la fuente es la ciudad de Gualeduaychú a una distancia de 27 km, seguido por Pueblo General Belgrano a 24 km, el Balneario Ñandubaysal a 12.5 km y por último el Puente Internacional a 2 km.

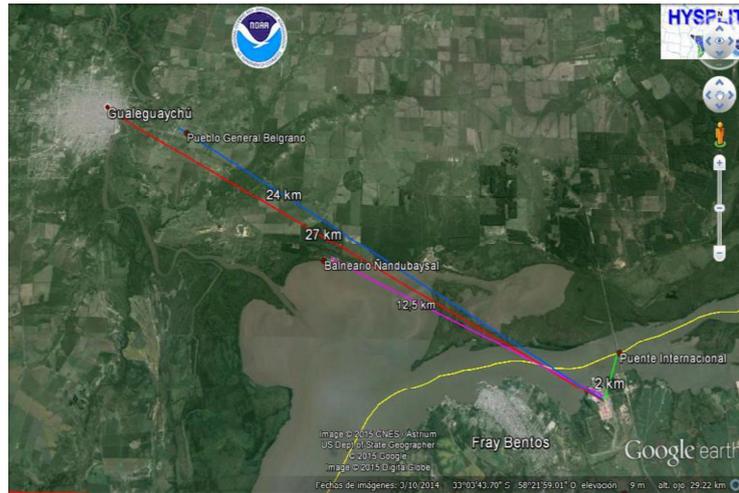


Figura 2.5: Distancia a los principales puntos de interés. Fuente: Google Earth 2015.

### 2.6.3 Emisiones Puntuales

De las fuentes puntuales de la fábrica de pasta celulosa se destacan: caldera de recuperación, horno de cal y caldera de gases olorosos concentrados (GOC) + bypass de gases olorosos diluidos (GOD), caldera de gases GOC y bypass de gases GOD. La ubicación de la chimenea principal se puede apreciar en las Figuras 2.6 y 2.7.

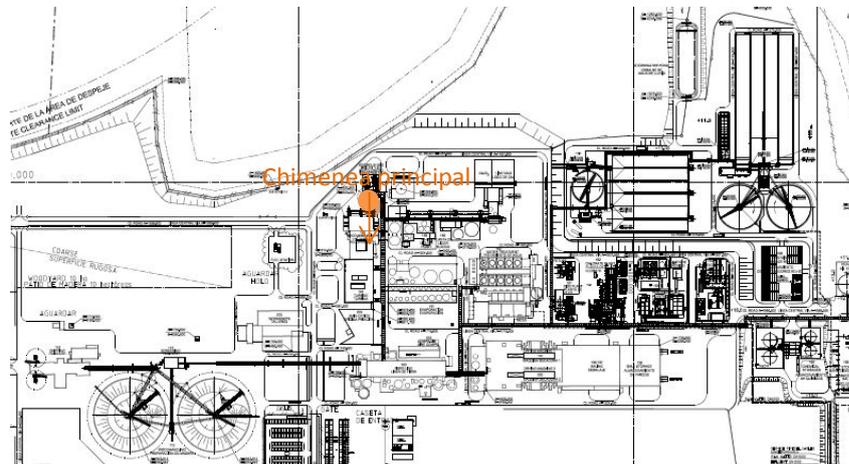


Figura 2.6: Diagrama de la planta, donde se ilustra la ubicación de la chimenea principal. Monitoreo Ambiental de la Operación- Comisión de Seguimiento- Fray Bentos, 19 de octubre de 2007. Botnia.



Figura 2.7: Imagen de la chimenea principal de la planta. Fuente: Google Earth. 2015.

### 2.6.3.1 Datos de las fuentes puntuales

Las coordenadas de la chimenea principal son: 58°15'36" O y 33°07'00" S. Dentro de la estructura de hormigón se ubican varias chimeneas individuales correspondientes a diferentes fuentes puntuales según el detalle de la Figura 2.8 y la Tabla 2.7.

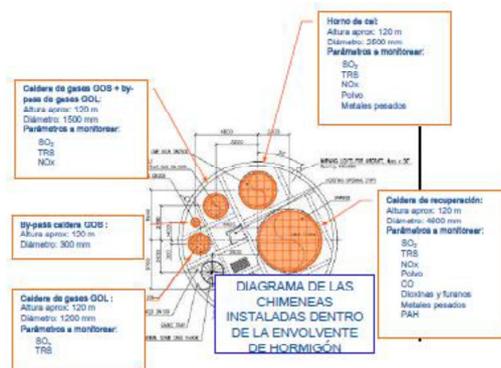


Figura 2.8: Diagrama de chimeneas instaladas dentro del envoltente de hormigón. Monitoreo Ambiental de la Operación- Comisión de Seguimiento- Fray Bentos, 19 de octubre de 2007. Botnia.

Fuente	Altura de Chimenea (m)	Diámetro Chimenea (m)	Veloc. Salida (m/s)	Temp. Salida (°C)	Vol. Húmedo (m <sup>3</sup> /s)
Caldera de Recuperación	120	4.6	22	160	340
Horno de Cal	120	2.5	14	220	68
Caldera de Gases GOC + by pass GOD	120	1.5		50	
Caldera de gases GOD	120	1.2		300	
Bypass gases GOC	120	0.3		300	

Tabla 2.7: Características físicas de las emisiones y propiedades físicas de los gases de salida (según Tabla C2.1-1 del informe Ecometrix, 2006).

## 2.6.4 Emisiones Difusas

### 2.6.4.1 Sistema de Tratamiento de Efluentes Líquidos

Diversos estudios han demostrado que los sistemas de tratamiento de efluentes líquidos de las plantas de celulosa son la principal fuente de emisión de  $H_2S$  (Dilsook, 2004), generado a partir de la descomposición anaeróbica de sulfatos y sulfitos. (Hoa et. al., 1996).

En la Figura 2.9 se muestra el sistema de tratamiento de la fábrica de pasta celulosa considerado como una única fuente de emisión difusa de compuestos TRS, y en la Tabla 2.8 se detallan las características de la misma.

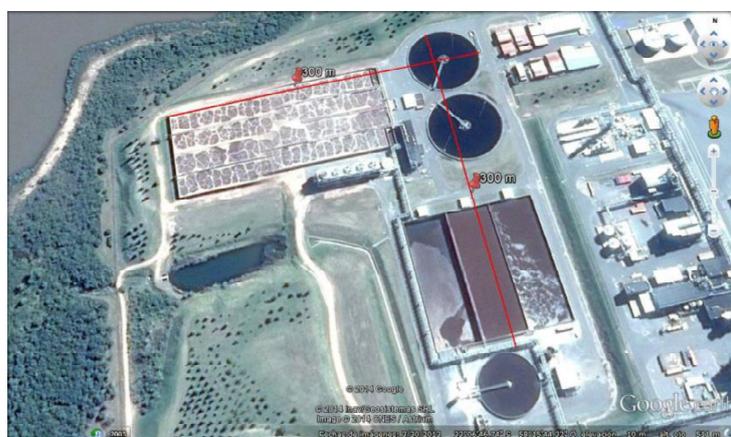


Figura 2.9: Vista del sistema de tratamiento de efluentes líquidos de la fábrica de pasta celulosa. Fuente Google Earth. 2015.

Superficie	90000 m <sup>2</sup>
Longitud	-58°15'7,04" O
Latitud	-33°06'44" S
Radio X de la fuente	150 m
Radio y de la fuente	150 m

Tabla 2.8: Características de la fuente de emisión difusa.

Cabe destacar que la superficie considerada para realizar la simulación se estima en 70650 m<sup>2</sup>, ya que se considera el sistema completo de efluentes líquidos como una única fuente difusa de emisión.

## 2.6.5 Tasas de Emisión

Las tasas de emisión de las fuentes puntuales se calculan para la situación de operación normal en base a la producción anual estimada de 1.000.000 Adt/a (tonelada de celulosa secada por aire por año), durante 350 días de operación. Estos datos se toman del informe Ecometrix (2006) y se detallan en la Tabla 2.9.

Parámetro	Unidad	Caldera de Recuperación	Horno de Cal	Incinerador NGS	Planta de Tratamiento
SO <sub>2</sub> (como S)	Kg/Adt	0.20	0.07	0.03	
NO <sub>x</sub> (como NO <sub>2</sub> )	Kg/Adt	0.80	0.45	0.10	
TSP	Kg/Adt	0.24	0.04	0.02	
PM10	Kg/Adt	0.22	0.04	0.02	
PM 2.5	Kg/Adt	0.16	0.03	0.01	
TRS (como H <sub>2</sub> S)	Kg/Adt	0.033	0.014	0.003	0.00174
VOC	Kg/Adt	0.08	0.02	-	

Tabla 2.9: Tasas de emisión en kg/Adt (tonelada de pulpa producida secada al aire) de los diferentes compuestos para las fuentes puntuales, en condiciones de operación normal. (Tabla C2.3-1 de informe Ecometrix, 2006).

Según el informe de Ecometrix, (2006), durante el primer año de operación se presume que este sistema ventee con mayor frecuencia hasta que todos los sistemas estén en pleno funcionamiento.

### 2.6.5.1 Distribución de la emisión de los componentes de TRS

Dado que las unidades del informe de Ecometrix (2006), son kilogramos de sustancia emitida por tonelada de pasta de celulosa seca producida (kg/ADt –del inglés kilograms per air dried ton of pulp), fue necesario realizar una serie de consideraciones para convertir ese valor a una tasa de emisión promedio a lo largo del año, es decir masa emitida por unidad de tiempo. Esto se logra dividiendo la masa total emitida en un año (M) por el tiempo total de operación en igual período (T).

La masa total emitida M se obtiene como el resultado de multiplicar la masa de sustancia normalizada por tonelada de pasta de celulosa (unidades de kg/ADt), por la cantidad de toneladas que se proyecta producir en un año, que es 1.000.000 toneladas en este caso. Para la determinación del tiempo total T se consideraron 350 días de operación normal durante el año, con igual criterio que Ecometrix (2006). Se define entonces un factor de 33.07 (resultante de dividir la producción anual en gramos igual a 1.000.000.000 y el tiempo de operación en segundos igual a 30.240.000) que al multiplicarlo por el valor expresado en unidades de kg/ADt permite obtener la tasa de emisión expresada en unidades de g/s.

Además para el caso del TRS fue necesario aplicar una corrección similar ya que la Tabla C2.3-1 del informe Ecometrix (2006) presenta la emisión de TRS como su equivalente H<sub>2</sub>S, a pesar que aquél tiene cuatro componentes. La Tabla 2.10 presenta la fracción de las cuatro sustancias que componen la emisión total de TRS según la Tabla C2.3-5 del informe Ecometrix (2006).

	Porcentaje de emisión de TRS		
	Peso molecular (g)	Caldera de Recuperación	Horno de cal
sulfuro de hidrógeno SH <sub>2</sub>	34	34%	97%
metilmercaptano (CH <sub>3</sub> )SH	48	40%	1%
dimetilsulfuro (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> S	62	16%	1%
dimetildisulfuro (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> S <sub>2</sub>	94	10%	1%

Tabla 2.10: Fracción de sustancias componentes de los TRS (Tabla C 2.3-5 del anexo C del informe Ecometrix, 2006)

El peso molecular de la mezcla TRS, ponderado según las fracciones de la Tabla 2.10 y los respectivos pesos moleculares, da como resultado 50.08 g para la caldera de recuperación y 35.02 g para el horno de cal. En el caso de la caldera de recuperación, 50.08 g de TRS contienen 11.56 g de H<sub>2</sub>S (que resulta ser la contribución de H<sub>2</sub>S de un 34%, en peso, a la mezcla de TRS). Por lo tanto una emisión de 11.56 g de H<sub>2</sub>S representa en realidad una emisión de 50.08 g de TRS, es decir 4.33 veces superior.

Para modelar la totalidad de TRS es necesario aplicar un factor igual a 4.33 para convertir la emisión expresada como H<sub>2</sub>S en emisión total de TRS. En el caso del horno de cal, 35.02 g de TRS contienen 32.98 g de H<sub>2</sub>S (que resulta ser la contribución de H<sub>2</sub>S de un 97%, en peso, a la mezcla de TRS). En este caso una emisión de 32.98 g de H<sub>2</sub>S representa una emisión de 35.02 g de TRS, es decir 1.06 veces superior. En consecuencia, las tasas de emisión de TRS resultan de aplicar los factores 4.33 y 1.06 para la caldera de recuperación y el horno de cal, respectivamente, a las emisiones de Tabla C2.3-1 del informe Ecometrix (2006).

Las emisiones de la calderas de gases GOC y GOD se asignan a la caldera de recuperación ya que a pesar que el Anexo C del informe Ecometrix (2006) no las identifica en la Tabla C2.1-1, el Anexo A indica que tales emisiones serían venteadas desde la caldera de recuperación u otro dispositivo independiente, aunque no especifica cual.

Según lo descrito anteriormente se obtienen las tasas de emisión de TRS promedio anual, en g/s, detalladas en la Tabla 2.11.

Fuentes Puntuales	TRS g/s
Caldera recuperación	4.73
Horno de cal	0.49
Caldera de gases GOD	0.43
Caldera de gases GOC	
Total	5.65

Tabla 2.11: Tasa de emisión promedio anual (g/s) en condiciones de operación normal calculada en base a la información de las Tablas C2.3-1, A8.7-9 del informe Ecometrix (2006), para las fuentes puntuales.

De acuerdo a la Tabla 2.7, el volumen de escape húmedo para las fuentes puntuales consideradas, es de 408 m<sup>3</sup>/s, y la tasa de emisión total resultante de la Tabla 2.11 es de 5650 mg, es decir que la concentración de emisión de TRS en el efluente gaseoso es 13.84 mg/m<sup>3</sup>.

Las emisiones desde la planta de tratamiento de residuos líquidos se consideran a nivel del suelo, con velocidad de salida cero y a temperatura ambiente.

Fuentes Difusas	TRS g/s
Planta residuos líquidos	0.06

Tabla 2.12: Tasa de emisión promedio anual (g/s) en condiciones de operación normal, calculada en base a la información de las Tablas C2.3-1, A8.7-9 del informe Ecometrix (2006), para las fuentes difusas.

Empleando las tasas de emisión de cada una de las fuentes expresadas en las Tablas 2.11 y 2.12 se calcularon los porcentajes de emisión particular sobre la emisión total, concluyendo que: el 90% de la emisión de TRS proviene de la caldera de recuperación, el 9% del horno de cal y el 1% restante de la planta de tratamiento de residuos líquidos.

En base a los porcentajes de la Tabla 2.10, se estimó que el porcentaje de emisión total correspondiente a cada compuesto de azufre total reducido es la siguiente:

- Sulfuro de Hidrógeno 40.33%
- Metilmercaptano: 36.09%
- Dimetil Sulfuro: 14.49%
- DimetilDisulfuro: 9.09%

## 2.7 Conclusión

La fábrica de pasta celulosa está ubicada en la localidad de Fray Bentos, República Oriental del Uruguay, en la margen izquierda del Río Uruguay y cercana al puente Internacional General San Martín. La proximidad al río, cuyo curso es allí variable tanto en dirección como en

ancho, requiere el empleo de herramientas apropiadas que deben ser adaptadas a la situación local, para modelar apropiadamente las condiciones particulares del proceso de dispersión atmosférica.

## CAPITULO III

### REGISTRO DE DENUNCIAS

En el presente capítulo se describe el registro de denuncias implementado en el marco del del Plan de Vigilancia Ambiental del Río Uruguay (PVA), del Municipio de Gualeguaychú en el cual se asientan las denuncias sociales referentes a la percepción de olores desagradables. En base a este registro se seleccionaron los días a modelar.

Durante el año 2009, para el periodo julio – diciembre se registraron 35 denuncias por parte del PVA, asociadas a la percepción aparente de olores desagradables atribuidos al funcionamiento de la fábrica de pasta celulosa.

Sin embargo para este estudio solo se considerará el periodo de septiembre – diciembre, ya que no se cuenta con los datos meteorológicos necesarios para los meses anteriores. En este periodo se registraron 11 denuncias, constatadas o no por el PVA, entendiéndose por:

- **DENUNCIA CONSTATADA:** aquella en la cual se registró alguna queja social referente a olores desagradables atribuidos a la fábrica de pasta celulosa radicada en la localidad de Fray Bentos, ROU, y la misma fue verificada in situ, mediante el trabajo de campo realizado por el personal del PVA, al percibir los malos olores.
- **DENUNCIA NO CONSTATADA:** aquella en la cual se registró alguna queja social referente a olores desagradables provenientes de la fábrica de pasta celulosa radicada en la localidad de Fray Bentos, ROU y la misma no fue verificada in situ, mediante el trabajo de campo realizado por el personal del PVA, al no percibir los malos olores.

En la Figura 3.1 se presenta el mapa de olores desarrollado a partir del registro de denuncias del PVA de la ciudad de Gualeguaychú, del cual resultan los principales puntos receptores del impacto asociado a las emisiones de TRS de la fábrica de pasta celulosa.

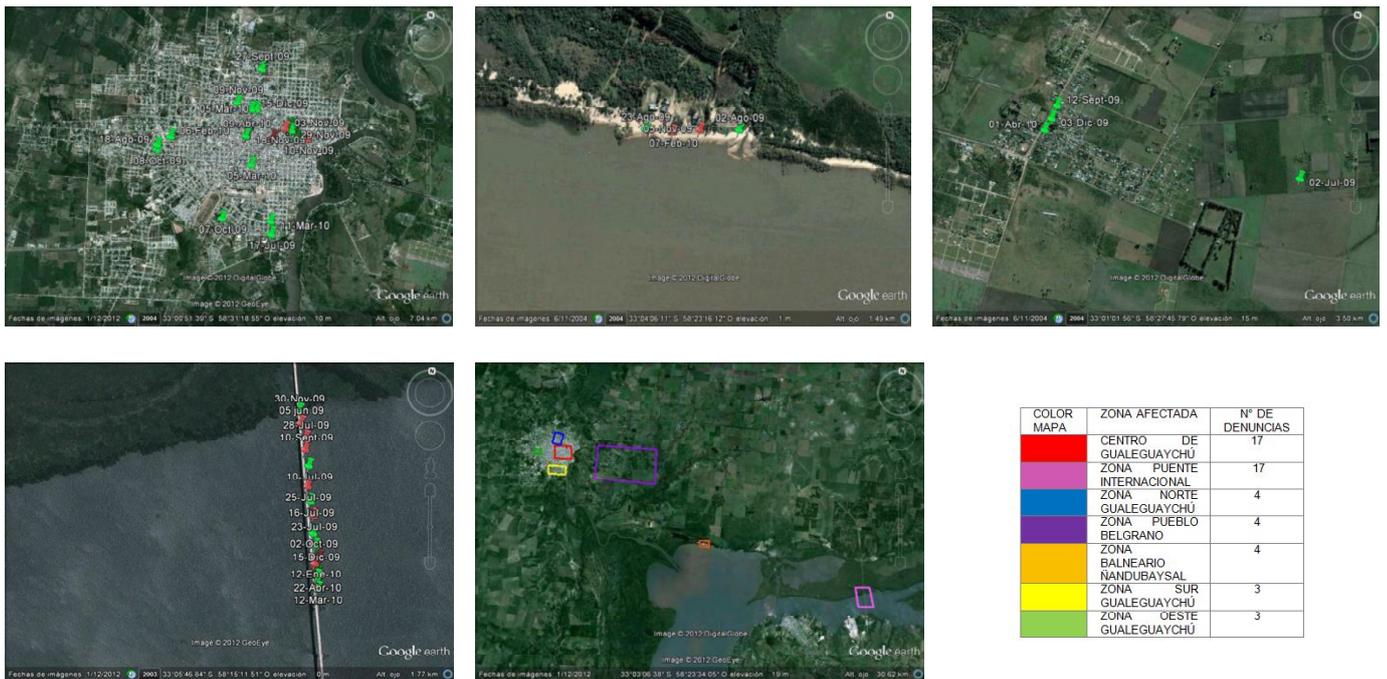


Figura 3.1: Mapa de Olores – Zonificación por ubicación.

Este registro, realizado por el PVA de la ciudad de Gualeguaychú, fue utilizado para fundamentar la elección de los días a modelar.

En la Tabla 3.1, se muestra un resumen de las denuncias registradas por los Agentes Municipales del PVA para el periodo de interés, cuyos días fueron seleccionados para efectuar las modelaciones.

Fecha Año 2009	Horario	Lugar	Actividad	Dir. Viento	Observaciones
10-set	9:45 a 11:45	Puente Internacional	Salida por denuncia	SO	Se percibió olor.
12-oct	10:30 a 12:30	Puente Internacional	Salida por denuncia	SO	Se percibe olor.
03-nov	22:45 a 02:20	Ciudad	Salidas por denuncias	SE	Se recibieron 7 denuncias de distintos puntos de la ciudad,
05-nov	08:00 a 10:00	Ñandubaysal	Salida por denuncia	SE	No se percibió olor.
10-nov	14:30 a 20:30	Salida por denuncia	Salida por denuncia	SE	Se recibió una denuncia en calle San Martin 371.
29-nov	21:00 a 22:30	Ciudad	Salida por denuncia	SSE	No se percibió olor.
30-nov	10:30 a 10:50	ENET N°1	Salida por denuncia		No se percibió olor, se labró acta
30-nov	14:30 a 21:30	Puente Internacional, Barrio Don Pedro	Denuncia	S	No se percibió olor.
01-dic	21:30 a 23:45	Ciudad	Salida por denuncia	SE	Denuncias de calles Fray Mocho y San Juan
03-dic	05:00 a	Pueblo Gral	Salida por	SE	No se percibió olor.

	06:30	Belgrano	denuncia	
15-dic	08:30 a 9:00	Ciudad - Irigoyen 182	Salida por denuncia	No se percibió olor.
15-dic	09:15 a 10:30	Ciudad	Salida por denuncia	Salida a Urquiza el Oeste, San José 370, ENET N°1. No se perciben olores.
15-dic	10:40 a 12:00	Ciudad- ENET N°1	Salida por denuncia	No se percibió olor.

Tabla 3.1: Resumen de denuncias registradas en la Localidad de Gualeguaychú por malos olores.  
Según registro del Plan de Vigilancia del Río Uruguay – Municipalidad de Gualeguaychú.

Cabe destacar que en los años posteriores las denuncias registradas por malos olores fueron disminuyendo progresivamente: en el año 2010 se registraron 32 denuncias, en el 2011 seis, en el 2012 no se registró ninguna denuncia, en el 2013, 2014 y 2015 solamente se registró una denuncia.

Esta disminución se asocia al dictamen de la Corte Internacional de la Haya del año 2010 en relación al conflicto, el consecuente levantamiento del corte de Arroyo Verde y el retiro de las personas que permanecían en el lugar.

### 3.1 Conclusión

Utilizando el registro de denuncias llevado adelante por el PVA de la ciudad de Gualeguaychú se realizó un mapa de olores donde se observa la distribución geográfica de las denuncias registradas, siendo la zona del Puente Internacional la principal afectada. Consecuentemente se seleccionaron los días a modelar del periodo septiembre-diciembre de 2009. En este año se registró el mayor número de denuncias debido a la puesta en funcionamiento de la fábrica de pasta celulosa. En los años posteriores este número fue decreciendo progresivamente.

## **CAPITULO IV**

### **DESCRIPCIÓN DE LOS MODELOS Y LOS DATOS EMPLEADOS**

En este capítulo se describe brevemente la formulación y el funcionamiento de los modelos utilizados, sus datos, la validación del modelo de circulación atmosférica y la definición del índice de olor empleado.

Se evaluaron en total 11 eventos en 10 días del periodo septiembre-diciembre del año 2009 debido a que varios estudios demuestran que en el periodo primavera-verano predominan los vientos NE-E por lo cual las emisiones podrían afectar la zona de interés. (Camilloni, 2008).

El conjunto de días se seleccionó considerando el registro de denuncias por olores desagradables del PVA. Estos días son 10 de septiembre; 12 de octubre; 03, 05, 10, 29 y 30 de noviembre; 01, 03 y 15 de diciembre de 2009. El 30 de noviembre de 2009, se realizaron dos simulaciones debido a que se registraron, en distintos periodos de tiempo, 2 denuncias no constatadas.

Para la modelación de los días seleccionados se empleó el modelo ARPS-STO (Advance Regional Prediction System), acoplado al modelo MCLM (Modelo de Capa Límite en Mesoescala).

De acuerdo a los objetivos del presente trabajo los resultados se obtienen como promedio del tiempo modelado y a nivel de respiración, por lo cual no se realiza el análisis vertical de las plumas de dispersión.

#### **4.1 MODELO ARPS-STO**

Para obtener una descripción del comportamiento de las grandes escalas de la turbulencia, adoptamos el modelo de meso-escala de tipo no-hidrostatico y compresible ARPS 4.5.2 (Advanced Regional Prediction System) desarrollado por el CAPS (Center of Analysis and Prediction Storm) de la Universidad de Oklahoma (USA) cuyos programas fuentes escritos en

FORTTRAN 77 se encuentran disponibles en la página <http://www.caps.ou.edu/ARPS>. Este modelo es utilizado para el seguimiento de tormentas, posee sub-modelos de flujo de calor y vapor de agua, formación de nubes y precipitación. Para ello tiene en cuenta la orografía y cobertura del terreno como así también las condiciones iniciales tanto del suelo como de la capa límite atmosférica. Si bien los modelos de sub-malla Smagorinsky Standard (Smagorinsky, 1963) modificado por Lilly (1967) y 1,5 TKE (Turbulent Kinetic Energy) propuesto por Shumann (1975) que posee para el cálculo del tensor de Reynolds de sub-malla brindan resultados satisfactorios para las aplicaciones meteorológicas de meso-escalas, no son suficientes para describir con un grado de precisión aceptable los fenómenos de transporte turbulento, difusión y reacciones químicas que ocurren en los episodios de contaminación. Es por ello que este código ha sido modificado por Aguirre (2005) incluyendo la opción del cálculo del tensor Reynolds de sub-malla por el método Smagorinsky dinámico (Germano et al. 1991).

#### **4.1.1 Esquema numérico de resolución**

Desde el punto de vista de la resolución numérica, el cálculo se basa en el método de diferencias finitas centradas sobre una celda de tipo *Arakawa C-grid* y utiliza un sistema de coordenadas curvilíneo que sigue las ondulaciones de terreno. El modelo atmosférico tiene en cuenta la compresibilidad del flujo. La presencia de ondas acústicas debidas a las variaciones de densidad del aire limita el paso de tiempo de resolución numérica de tipo explícito. Es por esta razón que ARPS utiliza dos pasos de tiempo diferentes. En pasos de tiempo reducidos integra la ecuación de ondas acústicas y para las demás variables utiliza pasos de tiempo más grandes. Esto permite mayor eficiencia en la resolución numérica general del modelo. El esquema numérico utilizado para obtener la solución de las ecuaciones diferenciales integradas en el paso de tiempo grande es de 4<sup>to</sup> orden centrado de tipo explícito mientras que el utilizado para integrar las ecuaciones de presión y componente vertical de la velocidad del aire es de tipo *Cranck-Nicholson* de manera tal que se puede elegir el tamaño vertical de la malla de cálculo sin tener en cuenta el valor impuesto para el pequeño paso de tiempo.

#### **4.1.2 Las ecuaciones del modelo**

La descripción del flujo de aire en sus tres componentes  $u$ ,  $v$ ,  $w$  según los ejes principales  $x$ ,  $y$ ,  $z$  respectivamente, se obtiene a partir de la resolución de las ecuaciones de conservación de la masa y de la cantidad de movimiento. Las magnitudes termodinámicas que son calculadas en cada paso de tiempo de la simulación numérica son: la temperatura potencial  $\theta$ , la presión total  $p$ , la densidad del aire  $\rho$ , la relación de mezcla del vapor de agua  $q_v$ , y del agua en sus estados

sólido y líquido qli. Inicialmente se establece una descomposición de tipo Reynolds según planos horizontales de manera tal que los mismos serán expresados como la suma de un valor medio según estos planos (estado base) y una fluctuación según las ecuaciones (4.1):

$$\begin{aligned}
u(x, y, z, t) &= \bar{u}(z) + u'(x, y, z, t) \\
v(x, y, z, t) &= \bar{v}(z) + v'(x, y, z, t) \\
w(x, y, z, t) &= w'(x, y, z, t) \\
\theta(x, y, z, t) &= \bar{\theta}(z) + \theta'(x, y, z, t) \\
p(x, y, z, t) &= \bar{p}(z) + p'(x, y, z, t) \\
\rho(x, y, z, t) &= \bar{\rho}(z) + \rho'(x, y, z, t) \\
q_v(x, y, z, t) &= \bar{q}_v(z) + q'_v(x, y, z, t) \\
q_{li}(x, y, z, t) &= q'_{li}(x, y, z, t)
\end{aligned} \tag{4.1}$$

Las ecuaciones de conservación de las magnitudes calculadas se obtienen considerando las hipótesis de invariancia temporal del estado base para todas las magnitudes y la relación hidrostática sólo para el estado base de la presión (modelo compresible). De esta forma las ecuaciones del modelo filtradas son las siguientes (4.2 y 4.3):

$$\frac{\partial \tilde{u}_j^\oplus}{\partial x_j} = 0 \tag{4.2}$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus)}{\partial x_j} = \bar{\rho} g_i B^\oplus - \left( \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^\oplus + 2 \epsilon_{ijk} \Omega_j \tilde{u}_k^\oplus - \frac{\partial \tilde{R}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \nu \left( \frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j^\oplus}{\partial x_i} \right) \right) \tag{4.3}$$

donde  $B$  es la magnitud que considera los efectos de empuje hidrostático debido a fluctuaciones de la densidad del aire,  $R_{ij}$  es el tensor de *Reynolds de sub-malla*,  $\Omega$  es el valor de la velocidad angular de la tierra y  $\nu$  es la viscosidad cinemática del aire a presión normal. En esta ecuación se ha considerado la descomposición de Leonard (1974) para expresar la correlación de velocidades filtrada, teniendo en cuenta que la suma del tensor de *Leonard* y del tensor *Cruzado* es nula (Deardorf, 1970), queda sólo el tensor de *Reynolds de sub-malla* como única magnitud a resolver.

La ecuación de la fluctuación de la presión se resuelve a partir de la ecuación de conservación de la masa (4.2) y de la ecuación (4.4) de estado de los gases perfectos considerando la humedad del aire (Klemp and Wilhelmson, 1978):

$$\left( \frac{\partial p'}{\partial t} \right)^\oplus = - \left( u_i \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^\oplus - g_i \tilde{u}_i^\oplus - V_s^2 \frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial x_i} + V_s^2 \bar{\rho} \left( \frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \right)^\oplus \tag{4.4}$$

en donde  $V_s$  es la velocidad del sonido,  $A$  es la relación entre la constante de los gases perfectos para el aire seco y el aire húmedo y el término de correlación velocidad-gradiente de la fluctuación de la presión es resuelto utilizando un modelo a gradiente (Deardorff, 1980).

En todas las ecuaciones precedentes se ha considerado la notación  $\bar{\rho}u_i = \tilde{u}_i$  y la operación de filtro espacial siguiente (4.5):

$$u_i^\oplus(\bar{x}, t) = \int_V u_i(\bar{x} - \bar{r}, t) G(\bar{r}) d\bar{r} \quad (4.5)$$

En la cual  $G(r)$  es la función de convolución del filtro espacial:

$$G(\bar{r}) = \begin{cases} 1/\Delta, & \text{si } |\bar{x} - \bar{r}| < \Delta/2 \\ 0, & \text{si } |\bar{x} - \bar{r}| \geq \Delta/2 \end{cases} \quad (4.6)$$

$$\int_V G(\bar{r}) d\bar{r} = 1 \quad (4.7)$$

$$\Delta = (\Delta x + \Delta y + \Delta z)^{1/3} \quad (4.8)$$

donde  $\Delta$  es el tamaño característico de las celdas que componen la malla de cálculo.

De la misma forma pueden expresarse las ecuaciones (4.9) de conservación de las magnitudes escalares ( $\theta$ ,  $q_v$ ,  $q_{ii}$ ):

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\theta^\oplus)}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_j^\oplus\bar{\theta})}{\partial x_j} \delta_{j3} + \frac{\partial(\tilde{u}_j^\oplus\theta^\oplus)}{\partial x_j} = S_\theta - \frac{\partial h_{\theta j}}{\partial x_j} \quad (4.9)$$

donde  $S_\theta$  denota las fuentes y sumideros de energía y  $h_{\theta j}$  expresa los flujos turbulentos (Xue et al. 2000).

#### 4.1.3 Modelo Smagorinsky dinámico para la resolución del tensor de Reynolds de sub-malla.

El tensor de *Reynolds de sub-malla* expresa el aporte de la cantidad de movimiento desde las pequeñas escalas hacia las grandes. Este aporte está expresado en el término filtrado de la correlación de velocidades de la componente residual (4.10):

$$\tilde{R}_{ij} = (\tilde{u}_i^- u_j^-)^\oplus \quad (4.10)$$

donde  $u_i^- = u_i - u_i^\oplus$  es la componente residual del campo de velocidades una vez aplicado el filtro.

Este término se modela como una viscosidad ya que, en promedio, la energía contenida en las grandes escalas de la turbulencia es transmitida hacia las más pequeñas hasta ser disipada según la teoría de la cascada de energía de *Kolmogorov*. Es por esta razón que a este término se lo conoce como *viscosidad turbulenta de sub-malla* y puede ser modelado bajo la forma de la aproximación de *Boussinesq* (4.11):

$$\tilde{R}_{ij} = -2\bar{\rho}k_m S_{ij}^{a\oplus} + \frac{1}{3}\tilde{R}_{kk}\delta_{ij} \quad (4.11)$$

En la ecuación (4.11)  $k_m$  se denomina *coeficiente de difusión turbulenta* y  $S_{ij}^{a\oplus}$  es la parte asimétrica del *tensor de deformación filtrado*  $S_{ij}^\oplus$ :

$$S_{ij}^\oplus = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i^\oplus}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^\oplus}{\partial x_i}\right) \quad (4.12)$$

$$S_{ij}^{a\oplus} = S_{ij}^\oplus - \frac{1}{3}S_{kk}^\oplus\delta_{ij} \quad (4.13)$$

El modelo *Smagorinsky* propone el cálculo del *coeficiente de difusión turbulenta* como el producto de un parámetro que depende del tamaño característico de la celda de cálculo y un tensor equivalente de deformación (4.14):

$$k_m = (C_s\Delta)^2 \left| \underline{S}^\oplus \right| \quad (4.14)$$

donde  $C_s$  es llamado coeficiente de Smagorinsky y  $\left| \underline{S}^\oplus \right| = (2S_{ij}^\oplus S_{ij}^\oplus)$ .

El coeficiente  $C_s$  se calcula de manera dinámica, es decir en cada paso de tiempo y para cada nodo de la malla de cálculo, teniendo en cuenta las condiciones del flujo turbulento. Para ello se realiza un segundo filtrado (llamado filtro test) de tamaño mayor al primero de manera que sea posible realizar la corrección del coeficiente de Smagorinsky propuesto al iniciar el cálculo. De esta forma, el coeficiente se corrige en cada paso de tiempo y para cada nodo del dominio (4.15):

$$(C_s\Delta)^2 = \frac{1}{2\bar{\rho}} \frac{\tilde{L}_{ij}^{(M)a} M_{ij}}{M_{ij}^2} \quad (4.15)$$

donde  $\tilde{L}_{ij}^{(M)a}$  es el la parte asimétrica del tensor de Leonard modificado (4.16):

$$\tilde{L}_{ij}^{(M)a} = (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus)^T - \tilde{u}_i^{\oplus T} u_j^{\oplus T} - \frac{1}{3} \left[ (\tilde{u}_k^\oplus u_k^\oplus)^T - \tilde{u}_k^{\oplus T} u_k^{\oplus T} \right] \delta_{ij} \quad (4.16)$$

y el tensor  $M_{ij}$  está dado por:

$$M_{ij} = \left( \underline{S}^\oplus | S_{ij}^{a\oplus} \right)^T - \alpha^2 \left| \underline{S}^\oplus \right|^T S_{ij}^{a\oplus T} \quad (4.17)$$

En las ecuaciones (4.16) y (4.17) el superíndice  $T$  denota la operación de filtro test y el parámetro  $\alpha$  representa la relación de tamaño entre los dos tipos de filtro.

Ha sido necesario incluir en la determinación dinámica del coeficiente de Smagorinsky expresado en (4.15) un factor de corrección que tiene en cuenta la variación vertical del tamaño de las celdas de cálculo en la zona próxima a la pared lateral. Esta expresión es similar a la utilizada por Van Driest (1956):

$$(C_s \Delta)^2 = \frac{1}{2\bar{\rho}} \frac{\tilde{L}_{ij}^{(M)a} M_{ij}}{M_{ij}^2} \left[ 1 - e^{-z^+/25} \right]^2 \quad (4.18)$$

donde  $z^+ = \frac{zu_*}{\nu}$  es la coordenada vertical  $z$  medida en unidades de pared con  $u^*$  la velocidad de fricción.

Para terminar de modelar el tensor de Reynolds de sub-malla (4.11) queda solamente el cálculo de la traza del mismo, el que se puede obtener resolviendo la ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta de sub-malla ( $E^-$ ):

$$\tilde{R}_{kk} = 2\bar{\rho}E^-$$

$$E^- = \frac{1}{2} (u_k^- u_k^-)^\oplus$$

$$\frac{d(\bar{\rho}E^-)}{dt} = \underbrace{-(u_i^- u_k^-)^\oplus \frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial x_k}}_{\text{Producción}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \tilde{u}_i^- \left( E^- + R_{ik} + \frac{p'^-}{\bar{\rho}} \right) \right]^\oplus}_{\text{Difusión}} - \underbrace{g \left[ \delta_{i3} \frac{\tilde{u}_i^-}{\bar{\rho}} B^- \right]^\oplus}_{\text{Gravedad}} - \underbrace{\frac{1}{2} \varepsilon_{ii}}_{\text{Disipación}} \quad (4.19)$$

Los términos que componen esta ecuación de transporte se modelan de manera similar al

tensor de *Reynolds de sub-malla*, es decir utilizando modelos a gradiente (Deardorff, 1980). En particular para el término de disipación, Aguirre (2005) ha realizado una pequeña modificación a la propuesta original de *Deardorff* cambiando la constante de disipación viscosa para las celdas de cálculo adyacentes a la pared lateral por una función de amortiguación de tipo *Van Driest*.

$$\frac{1}{2} \varepsilon_{ii} = \bar{\rho} \frac{C_\varepsilon}{l} (E^-)^{3/2} \quad (4.20)$$

$$l = \begin{cases} 0,76(E^-)^{1/2} \delta_{i3} \left( \frac{g}{\bar{\theta}} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \right)^{-1/2} & \text{si } l < \Delta \text{ y } \delta_{i3} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} > 0 \\ \Delta & \text{si no} \end{cases} \quad (4.21)$$

$$C_\varepsilon = \begin{cases} 3,9 & \text{si } z = \Delta z_{\min} \\ 0,19 + 0,51 \frac{l}{\Delta} & \text{si no} \end{cases} \quad \text{Deardorff (1980)} \quad (4.22)$$

$$C_\varepsilon = \left( 0,19 + 0,51 \frac{l}{\Delta} \right) \left[ 4,57 e^{\left( \frac{z - \Delta z_{\min}}{30z_0} \right)} + 1 \right] \quad \text{Aguirre (2005)} \quad (4.23)$$

En las ecuaciones (4.22) y (4.23)  $\Delta z_{\min}$  es la altura de la primera celda de cálculo encima de la pared y  $z_0$  es la rugosidad característica.

## 4.2 MODELO ESTOCÁSTICO LAGRANGIANO

Con el fin de obtener un modelo de simulación de la dispersión atmosférica de especies químicas pasivas o reactivas, sus trayectorias, concentraciones, evolución temporal y espacial de las mismas, es necesario acoplar al modelo de simulación de grandes escalas de la turbulencia (LES – por su término en inglés Large Eddy Simulation), un modelo de seguimiento de partículas fluidas dentro de la celda de cálculo, es decir, simular el comportamiento de las pequeñas escalas de la turbulencia no resueltas por LES que son las que rigen los movimientos fluctuantes dentro de la misma.

El *modelo Lagrangiano* permite obtener trayectorias de partículas fluidas hipotéticas moviéndose en el seno del fluido, considerando las características turbulentas del mismo como son la *energía cinética turbulenta de sub-malla* ( $E^-$ ), los valores de velocidad media en el seno fluido ( $\bar{u}_i$ ), el tensor de *Reynolds de sub-malla* ( $R_{ij}$ ) y la energía que se disipa por viscosidad molecular ( $\varepsilon_{ij}$ ); todas ellas magnitudes derivadas de los modelos utilizados en LES. Es decir que existe coherencia entre las magnitudes obtenidas por LES para la descripción de las grandes

escalas de la turbulencia y las que son simuladas utilizando el *modelo Lagrangiano* para obtener las pequeñas escalas.

Se dice que el modelo es estocástico porque además de términos de tipo determinista, posee términos de carácter aleatorio en analogía a la hipótesis de desplazamiento microscópico de una molécula que sigue un movimiento *browniano*. Langevin (1908) ha concebido un modelo que tiene en cuenta los efectos de inercia de las partículas sometidas a la turbulencia en el seno de una masa fluida mientras que Wiener (1923) ha construido un proceso estocástico para representar la posición de una partícula hipotética sometida a este tipo de movimiento.

#### 4.2.1 La ecuación de Langevin

La *ecuación (4.24) de Langevin clásica* está compuesta de un término determinista y un término aleatorio:

$$d\hat{U}_i = \alpha_u \hat{U}_i dt + \beta_u \eta(t) dt \quad (4.24)$$

donde  $\hat{U}_i$  es la *i*-ésima componente de la *velocidad lagrangiana* de una partícula fluida y  $\eta(t)$  es una función que expresa un *ruido blanco gaussiano*, es decir que no presenta correlación alguna de un instante al otro y su media estadística es nula:

$$\begin{cases} \overline{\eta_i(t)} = 0 \\ \overline{\eta_i(t')\eta_j(t'')} = \delta_{ij}\delta(t'-t'') \end{cases} \quad (4.25)$$

Esta función representa bien el término aleatorio.

Estos términos poseen coeficientes ( $\alpha_u$ ,  $\beta_u$ ) que deberán ser determinados a partir de las características de la turbulencia del fluido. Una forma de obtener los coeficientes es utilizando la ecuación de evolución de la densidad de probabilidad (ddP). Pope (1985) desarrolla los métodos ddP para obtener una descripción estadística de la cupla posición-velocidad de las partículas, resolviendo la ecuación de evolución de la ddP o *ecuación de Fokker-Plank*. Esta función de distribución de probabilidad es de tipo condicionada al estado inicial a partir del cual se realiza el seguimiento de la partícula. Además, el término determinista tiene una memoria de un paso de tiempo (*sistema Markoviano*). Con esta hipótesis, es posible encontrar los coeficientes de la ecuación de *Fokker-Plank* y asociarlos a los coeficientes de la cupla posición-velocidad del sistema de ecuaciones que rige el movimiento de las partículas.

#### 4.2.2 La ecuación de Fokker-Plank

La *ecuación de Fokker-Plank* es la ecuación de evolución de la ddP que permite obtener los coeficientes del sistema de ecuaciones *Lagrangiano* para describir la evolución de una partícula libre en el seno de un fluido. Este procedimiento es válido siempre y cuando el sistema sea de tipo *Markoviano*.

Designamos con  $\hat{S}(t)$  la cupla posición-velocidad de una partícula en el seno de un fluido turbulento de manera tal que  $\hat{S}(t) = [\hat{X}_i(t), \hat{U}_i(t)]$ . La probabilidad de encontrar una partícula en el estado  $\hat{S}(t)$  sabiendo que ella estaba en el estado  $\hat{S}(t_0)$  al instante  $t_0$  se puede obtener si se resuelve la ecuación de evolución de la ddP o *ecuación de Fokker-Plank*:

$$\frac{\partial P}{\partial t}(\hat{S}(t), t) = -\frac{\partial}{\partial s_i} [h_i(\hat{S}(t), t)P] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial s_i \partial s_j} [g_{ik}(\hat{S}(t), t)g_{jk}(\hat{S}(t), t)P] \quad (4.26)$$

que está asociada al sistema de ecuaciones lagrangiano siguiente:

$$\begin{cases} \frac{d\hat{S}(t)}{dt} = h_i(\hat{S}(t), t) + g_{ij}(\hat{S}(t), t)\eta_j(t) \\ \overline{\eta_i(t')\eta_j(t'')} = \delta_{ij}\delta(t'-t'') \end{cases} \quad (4.27)$$

En la ecuación (4.26) la función ddP involucra el dominio entero de cálculo y está condicionada a los valores iniciales de la cupla posición-velocidad. Sin embargo, es necesario restringir la ddP al tamaño de una celda de cálculo ya que lo que se pretende es encontrar un sistema de ecuaciones que describa las variables de estado lagrangiano (posición-velocidad) en el seno de dicha celda para describir las trayectorias que tendrán las partículas fluidas en su interior simulando la *turbulencia de sub-malla*. Esto es equivalente a encontrar una expresión para la ddP local ( $P_L$ ). Un segundo condicionante, derivado del que se acaba de exponer, es que la ddP debe estar condicionada a los valores iniciales de posición y velocidad que posean las partículas fluidas al ingresar a la celda de cálculo en vez de hacerlo al iniciar su recorrido en el dominio.

Para lograr expresar la ddP local es necesario filtrar la ecuación (4.26) obteniendo así la *Función de densidad de Probabilidad Filtrada* (FDF) que ha sido propuesta originalmente por Gao and O'Brien (1993) y detallada en profundidad por Colucci et al. (1998) para obtener una descripción de los fenómenos transitorios producidos a la escala sub-malla. Estos autores han desarrollado la ecuación de transporte de la FDF a densidad constante para un flujo reactivo en tanto que Jaber et al. (1999) ha aplicado esta técnica en la simulación de una flama reactiva de

especies no pre-mezcladas utilizando una aproximación LES. Gicquel and Givi (2002) han mostrado la utilización de la FDF aplicada al campo de velocidades de sub-malla, llamando a esta función en particular *Función de Densidad Filtrada del campo de Velocidad* (VFDF).

#### 4.2.3 La Función de Densidad Filtrada del Campo de Velocidad (VFDF)

La Función de densidad de probabilidad del campo de velocidad restringida al seno de una celda de cálculo ( $m$ ) es una función local ( $P_L$ ) obtenida realizando una operación de filtro espacial a la ddP de velocidad. Esta función es llamada *Función de Densidad Filtrada del campo de Velocidad* (VFDF) propuesta por Gicquel and Givi (2002):

$$P_L(\vec{v}, \vec{x}_{(m)}, t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{G}[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G(\vec{x}' - \vec{x}_{(m)}) d\vec{x}' \quad (4.28)$$

donde  $\vec{x}_{(m)}$  es el vector posición del centro de la celda ( $m$ ),  $\vec{x}'$  es la posición relativa de un punto situado al interior de esta celda,  $\vec{v}$  es un valor particular del campo de velocidad  $\vec{u}(\vec{x}, t)$  y  $\mathcal{G}[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}, t)]$  es la función de densidad de probabilidad de *grano fino* según lo definió Pope (1985):

$$\mathcal{G}[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}, t)] = \delta[\vec{v} - \vec{u}(\vec{x}, t)] \equiv \prod_{i=1}^3 \delta[v_i - u_i(\vec{x}, t)] \quad (4.29)$$

como  $\vec{v}$  es un valor particular del campo de velocidad, entonces esta función representa una función de probabilidad condicionada.

#### 4.2.4 El sistema de ecuaciones estocástico lagrangiano

Consideramos ahora la ecuación de transporte de  $P_L$  con el fin de obtener los coeficientes del sistema de ecuaciones lagrangiano al seno de la celda  $m$ . Los detalles de este procedimiento se encuentran en Aguirre (2005). Considerando que la turbulencia puede ser supuesta inhomogénea, isotrópica y no-estacionaria en el seno de una celda de cálculo, como en la mayoría de los flujos en capa límite atmosférica, el sistema de ecuaciones resultante es el siguiente:

$$\begin{cases} d\hat{X}_{i(m,t)} = \hat{U}_{i(m,t)} dt \\ d\hat{U}_{i(m,t)} = \frac{du_{i(m,t)}^\oplus}{dt} dt + \frac{\partial R_{ij(m,t)}}{\partial x_j} dt + \left[ \frac{3}{2E_{(m,t)}^-} \left( \frac{1}{3} \frac{dE_{(m,t)}^-}{dt} - \frac{C_0 \varepsilon_{(m,t)}}{2} \right) (\hat{U}_{j(m,t)} - u_{j(m,t)}^\oplus) \delta_{ij} \right] dt \\ \quad + \sqrt{C_0 \varepsilon_{(m,t)}} \delta_{ij} \eta_j(t) dt \end{cases} \quad (4.30)$$

donde  $C_0$  es la *constante de Kolmogorov*. Puede observarse en este sistema de ecuaciones

que las magnitudes  $u_{i(m,t)}^{\oplus}, R_{ij(m,t)}, E_{(m,t)}^-, \varepsilon_{(m,t)}$  calculadas al centro de la celda  $m$  por LES pueden ser interpoladas a la posición que tenga la partícula fluida al instante  $t$  considerando no sólo los valores propios de la celda  $m$  sino además los valores de las celdas vecinas. Serán presentados los resultados de la validación de este modelo acopado LES-estocástico (LES-STO) de simulación de las trayectorias de partículas fluidas para el caso de las experiencias de Fackrell and Robins (1982) considerando dos métodos de interpolación: el de *Polinomios de Lagrange* y uno más sencillo de tipo *baricéntrico*.

#### 4.2.5 Cálculo de velocidad vertical

Para el cálculo de la velocidad vertical de salida de los gases de la chimenea se utiliza la ecuación (4.31), derivada de aplicar el teorema de “Bernoulli” vertical y horizontalmente para tener en cuenta el “tiro natural” y la depresión que genera el viento a la boca de la chimenea, resultante de la Figura 4.1 (Aguirre et al. 2014).

$$W_2^2 = \frac{U_2^2 \left(\frac{T_g}{T_a}\right) + 2gh \left(\frac{T_g}{T_a} - 1\right)}{1 + 4\frac{hf}{D}} \quad (4.31)$$

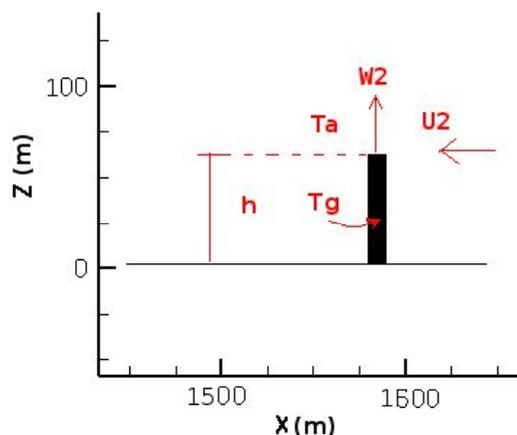


Figura 4.1: Esquema de cálculo de la velocidad de salida de los gases desde la boca de la chimenea. (Aguirre et al. 2014)

donde  $T_g$  y  $T_a$  son las temperaturas de los gases de combustión que desprende la chimenea y del aire exterior a la altura de la boca de la misma respectivamente,  $g$  la aceleración de la gravedad,  $h$  la altura de la chimenea,  $f$  representa las pérdidas primarias debidas a la fricción de los gases con las paredes de la misma y  $D$  es su diámetro.  $U_2$  es la velocidad del viento a la altura de la boca de la chimenea. Para el parámetro  $f$  se utilizó la segunda ecuación de Kármán-

Prandtl con un coeficiente de rugosidad de pared de la chimenea  $k = 10$  mm (chimeneas de cemento).

Para calcular la sobreelevación del penacho se utiliza la fórmula de Brigggs (Aguirre et al. 2014), expresada en la ecuación (4.32)

$$\Delta h = \frac{1,6F^{\frac{1}{3}} X^{\frac{2}{3}}}{u} \quad (4.32)$$

donde  $\Delta h$  es la elevación de la pluma por sobre chimenea,  $u$  es la velocidad promedio del viento,  $x$  la distancia a sotavento de la chimenea/fuente y  $F$  el flujo de flotabilidad definido por la ecuación 4.33:

$$F = \frac{g}{\pi} V \left( \frac{T_s - T_a}{T_s} \right) \quad (4.33)$$

donde  $g$  es la aceleración de la gravedad,  $V$  la tasa volumétrica del flujo del gas de la chimenea,  $T_s$  es la temperatura del gas de la chimenea y  $T_a$  es la temperatura del aire ambiental.

### 4.3 MODELO DE DIFUSIÓN Y REACCIONES QUÍMICAS (LES-STO)

Las ventaja de utilizar el modelo estocástico lagrangiano para el seguimiento de partículas fluidas en la simulación de la dispersión atmosférica de la contaminación, es la posibilidad de introducir de manera sencilla modelos de difusión y reacción química por contacto entre partículas fluidas portadoras de especies que intercambien entre ellas parte de su concentración. Este tipo de modelos de contacto, propuesto por Curl (1963), ha sido utilizado inicialmente para la resolución de problemas de combustión o en la ingeniería de procesos industriales (Dopazo, 1975; Pope, 1976; Janicka et al., 1978 y Dopazo, 1979).

#### 4.3.1 La difusión por contacto

El modelo original de difusión por contacto entre partículas propuesto por Curl (1963) ha sido reformulado por Pope (1985) y mejorado por Michelot (1996) para el caso de la simulación de una mezcla reactiva de  $NO$  y  $O_3$  en régimen de flujo turbulento generado por una grilla en túnel de viento.

Para su implementación es necesario dividir el dominio de cálculo en celdas de mezcla

dentro de las cuales las partículas fluidas portadoras de especies químicas serán seleccionadas de manera aleatoria por pares ( $p, n$ ). Para cada par de partículas y por cada especie que portan las mismas se resuelve el sistema de ecuaciones siguiente:

$$\begin{cases} \frac{dc_p(t)}{dt} = \frac{C_{dif}}{2T_t} (c_n(t) - c_p(t)) \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \frac{C_{dif}}{2T_t} (c_p(t) - c_n(t)) \end{cases} \quad (4.34)$$

donde  $c_p(t)$  y  $c_n(t)$  representan los niveles de concentración de una especie química que poseen las partículas  $p$  y  $n$  respectivamente,  $C_{dif}$  representa la relación entre el tiempo característico de la turbulencia  $T_t$  y el tiempo característico de la difusión molecular.

### 4.3.2 Modelo de reacciones químicas (LES-STO)

Acoplado al modelo de difusión, las concentraciones de las especies evolucionan en el seno de cada partícula fluida según las reacciones químicas que puedan producirse. Si se considera la siguiente reacción química reversible de segundo orden, supuesta como isotérmica:



las variaciones de los niveles de concentración de las especies A, B y C en el seno de cada partícula fluida  $p$  se simula mediante el sistema de ecuaciones (4.35):

$$\begin{cases} \frac{dc_{pA}}{dt} = -K_d c_{pA} c_{pB} + K_i c_{pC} \\ \frac{dc_{pB}}{dt} = -K_d c_{pA} c_{pB} + K_i c_{pC} \\ \frac{dc_{pC}}{dt} = K_d c_{pA} c_{pB} - K_i c_{pC} \end{cases} \quad (4.35)$$

donde  $K_d$  es la constante cinética de la reacción directa y  $K_i$  es la de reacción inversa.

Los modelos acoplados de difusión y reacciones químicas se han incorporado en código de simulación LES-STO para obtener un modelo que permita considerar ambos procesos para cada paso de tiempo. Gracias a ello se pueden obtener los resultados de los niveles de concentración de especies químicas y su distribución espacial en un episodio de contaminación de manera instantánea.

#### 4.4 MODELO MCLM

El modelo de capa límite en mesoescala MCLM fue especialmente desarrollado para estudiar la circulación atmosférica en capas bajas sobre el estuario del Río de La Plata y su zona de influencia (Berri et al., 2010). El modelo es tridimensional y está formulado en ecuaciones primitivas en base a los tres principios físicos que gobiernan el movimiento atmosférico, es decir, conservación del impulso lineal, conservación de la masa y conservación de la energía. El modelo es seco y resuelve el sistema hidrodinámico de ecuaciones compuesto por las dos componentes horizontales de la ecuación de movimiento que permiten obtener las componentes del viento  $u$  y  $v$  -ecuaciones (4.36) y (4.37)-; la ecuación termodinámica que permite obtener la temperatura potencial  $\theta$  y con ella la temperatura ambiente  $T$  -ecuación (4.38)-; la ecuación de conservación de la masa en versión incompresible que permite obtener la componente vertical del movimiento  $w$  -ecuación (4.39)-, y la ecuación hidrostática en versión perturbada que permite obtener la presión atmosférica  $p'$  -ecuación (4.40)-. El sistema se cierra con las ecuaciones de diagnóstico (4.41).

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial u}{\partial y} - w \frac{\partial u}{\partial z} - \alpha_0 \frac{\partial p}{\partial x} + fv + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_{mh} \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{mh} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{mz} \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (4.36)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -u \frac{\partial v}{\partial x} - v \frac{\partial v}{\partial y} - w \frac{\partial v}{\partial z} - \alpha_0 \frac{\partial p}{\partial y} - fu + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_{mh} \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{mh} \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{mz} \frac{\partial v}{\partial z} \right) \quad (4.37)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -u \frac{\partial \theta}{\partial x} - v \frac{\partial \theta}{\partial y} - w \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_{\theta h} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{\theta h} \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{\theta z} \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) \quad (4.38)$$

$$\frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \quad (4.39)$$

$$\frac{\partial p_0}{\partial z} = -\frac{g}{\alpha_0} \quad (4.40)$$

$$\frac{\partial p'}{\partial z} = \frac{g}{\alpha_0} \frac{\theta'}{\theta_0}, \quad p = p_0 + p', \quad \theta' = \theta - \theta_0 \quad (4.41)$$

Las variables  $u$ ,  $v$  y  $\theta$  son las variables de pronóstico y  $w$  y  $p'$  las variables de diagnóstico. El modelo parametriza los flujos turbulentos de calor y cantidad de movimiento mediante una clausura de primer orden. Posee una capa de superficie o flujos constantes en donde se calculan los perfiles verticales adimensionales de cantidad de movimiento y temperatura mediante formulaciones empíricas para condiciones de atmósfera estable e inestable a través de la teoría de la similitud de Monin-Obukhov. Los detalles acerca del modelo se pueden ver en Berri and

Núñez (1993). El modelo se empleó en diferentes estudios, por ejemplo circulación atmosférica en capas bajas sobre el estuario del Río de La Plata (Berri y Sraibman, 2005; Berri, 2006); animaciones gráficas que permiten apreciar la influencia del ciclo diurno de la brisa de mar-tierra sobre el movimiento atmosférico y sus efectos sobre la dispersión de sustancias en la atmósfera (Berri, 2009). También se utilizó en un estudio de la circulación atmosférica asociada a la brisa de mar-tierra y su influencia en la circulación del agua superficial de la bahía de Samborombón, en la provincia de Buenos Aires (Olalde et al., 1991). La versión original del modelo se adaptó para reproducir la climatología del viento en capas bajas en la región de influencia del Río de la Plata. Las modificaciones que se introdujeron en el modelo son fundamentalmente en la inicialización y en las condiciones de borde inferior que constituye el principal forzante del mismo.

Con el objeto de determinar la capacidad del modelo MCLM para simular apropiadamente la circulación atmosférica en capas bajas, se estudió el error con que el modelo calcula la distribución media de frecuencias de dirección y velocidad del viento en la región del Río de La Plata. Para ello se emplearon las observaciones de las estaciones meteorológicas de la región durante el período entre 1959-1984. El error del modelo se definió como la raíz cuadrática media de la diferencia porcentual entre las frecuencias medias calculadas con el modelo y las observadas. Los resultados muestran un muy buen acuerdo general con las observaciones, con un error promedio del orden del 30% para la dirección del viento y del 20% para la velocidad del viento (Berri et al., 2010). Además, el método definido en el modelo para el cálculo de las frecuencias medias, que utiliza un reducido número de pronósticos, se validó con éxito al comparar sus resultados con los obtenidos con el método tradicional que emplea la totalidad de los pronósticos diarios del período considerado (Berri et al., 2012a).

Simultáneamente se realizaron diversos estudios de modificación del modelo MCLM para forzarlo con condiciones de borde tomadas del modelo Eta. El modelo MCLM se anidó al modelo Eta y se realizaron experiencias definiendo las condiciones de borde inferior y borde superior del MCLM, a partir de los pronósticos operativos del modelo Eta. Se utilizó como condición forzante en el borde superior del modelo MCLM el pronóstico de viento para 850 hPa del modelo Eta, y la temperatura de superficie pronosticada por el modelo Eta como forzante del borde inferior. Se comparó el resultado de los pronósticos de viento a 10 metros de altura del modelo MCLM y del modelo Eta con las observaciones de las estaciones Aeroparque, Ezeiza, Don Torcuato, Colonia y Carrasco para el período de verano 2003-2004. Se utilizaron dos medidas de error: el grado de acierto que indica el porcentaje de casos en que la dirección del viento pronosticado coincide con la observada; y el error cuadrático medio de las componentes  $u$  y  $v$  del viento. El modelo MCLM muestra un grado de acierto promedio del 60% mientras que el modelo Eta sólo logra un acierto promedio del 18%. El error cuadrático medio del modelo MCLM es de 3.4 m/s mientras que el

error cuadrático medio del modelo Eta, 6.4 m/s, es prácticamente el doble. Las dos medidas de error utilizadas demuestran que los resultados del MCLM, con una resolución horizontal de 10 km, son sustancialmente mejores que los del modelo Eta en la región del Río de La Plata A pesar de la magnitud del error del modelo Eta para el viento en superficie, sus pronósticos de temperatura en superficie y de viento y temperatura en 850 hPa permiten forzar al modelo MCLM y obtener un pronóstico de viento en superficie más acertado que el del modelo Eta. La conclusión principal del estudio de Sraibman and Berri (2009) es que el pronóstico del viento en capas bajas en la región del Río de La Plata se puede mejorar sustancialmente si se emplea el modelo MCLM forzado por los pronósticos operativos del modelo Eta.

También se realizaron validaciones de los pronósticos del modelo MCLM para la región del río Uruguay en inmediaciones de la ciudad de Gualeguaychú con resultados satisfactorios. Se comparó el resultado de una simulación realizada con el modelo MCLM con otra realizada con el modelo ARPS-STO (Berri et al. 2012b). A pesar que se trata de dos modelos de diferente formulación, sus resultados muestran un acuerdo general en los cambios del campo de viento a lo largo de las 12 horas de pronóstico, como así también coincidencia sobre el río y las zonas sobre tierra próximas a las costas.

#### **4.4.1 Validación del viento calculado con el modelo MCLM**

Con el objeto de validar el viento calculado con el modelo MCLM, que se emplea para forzar al modelo ARPS-STO, se utilizan las observaciones de la torre meteorológica operada por el Servicio Meteorológico Nacional en convenio con la Secretaria de Ambiente y Desarrollo Sustentable de la Nación. La torre está instalada en proximidades del Balneario Ñandubaysal y registra datos de viento a 42 m de altura, los que se comparan con los vientos calculados por el modelo MCLM en su nivel más próximo de 40 m. Dado que las observaciones de viento de la torre meteorológica se registran en forma horaria, cada evento se valida desde la hora anterior al inicio de la simulación hasta la hora siguiente de modo tal que la validación de los 11 eventos totaliza 46 casos. La dirección del viento observado en la torre se registra en la forma de una rosa de vientos de 16 sectores, por ejemplo N, NNE, NE, etc., razón por la cual la dirección del viento calculado con el modelo MCLM en grados se convierte a la categoría correspondiente. El error del modelo se define entonces como la diferencia entre el viento observado y el calculado de manera tal que el desacuerdo de 1 sector representa un error de 22.5 grados, el desacuerdo de 2 sectores representa un error de 45 grados, y así sucesivamente. Por lo tanto, la incertidumbre del cálculo es de 22.5 grados ya que es el valor mínimo de error que es posible establecer. En el caso de la velocidad del viento el error se define como la raíz cuadrática media, en m/s, de la diferencia entre el valor calculado y el observado.

La Tabla 4.1 muestra el promedio de errores para cada día, el día 30 de noviembre de 2009 fue considerado uno solo, ya que el primer evento es muy corto (10:30 to 10:50) y el segundo ocurre en un periodo posterior cercano (14:30 to 20:30). El promedio de error del total de los eventos es de 49 grados para la dirección del viento y 2.2 m/s para la velocidad. El evento del día 10 de septiembre de 2009 tiene el mayor error de 105 grados mientras que en los otros eventos no se alejan del valor promedio y alguno de ellos incluso están por debajo de del nivel de incerteza de 22.5 grados.

Fecha	Error absoluto en la dirección del viento (grados)	Velocidad del viento rcm (m/s)
10 sept 2009	105	2.3
12 oct 2009	31	1.2
3 nov 2009	52	2.4
5 nov 2009	22	2.2
10 nov 2009	39	3.3
29 nov 2009	52	1.4
30 nov 2009	47	2.0
1 dic, 2009	72	0.8
3 dic 2009	29	2.9
15 dic 2009	67	0.8

Tabla 4.1: Promedio de errores en la dirección del viento (grados) y en la velocidad (m/s)

La Figura 4.2 muestra el diagrama de dispersión de los vientos pronosticados y los vientos observados. La pendiente de la línea de regresión indica un buen acuerdo general en el caso de la dirección del viento, mientras que en el caso de la velocidad del viento es evidente que el modelo subestima las observaciones. Estas características de los errores del viento tendrán más efecto en la extensión longitudinal de la pluma que en su extensión geográfica y alcance. Dado que el modelo subestima la velocidad del viento, la pluma modelada viajará menos lejos, pero, básicamente, en la dirección real, porque no hay un sesgo significativo de las previsiones en la dirección del viento.

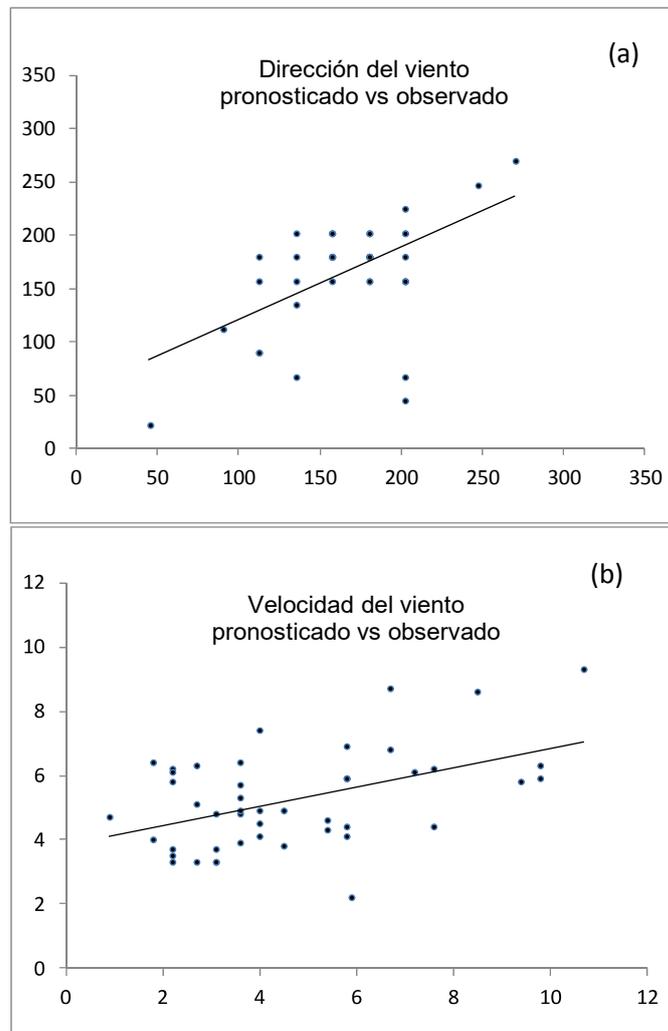


Figura 4.2: Diagrama de dispersión de los vientos pronosticados versus los observados (a) dirección del viento en grados y, (b) velocidad del viento en m/s

#### 4.5 DATOS DE LA MODELACIÓN

En el modelo ARPS-STO pueden utilizarse datos de las características de la superficie del suelo para ser incluidas como condiciones iniciales. El mismo emplea los siguientes datos de entrada: datos meteorológicos (presión, temperatura, viento), datos de superficie (tipo vegetación, índice de vegetación normalizado y rugosidad), tipo de suelo, temperatura de superficie y modelo digital de elevación.

Los datos de superficie se obtuvieron de la imagen satelital Landsat 5, obtenida del Instituto Nacional de Pesquisas Espaciales (INPE) de Brasil, para el día 19 de noviembre de 2009 por ser la más cercana al periodo de estudio. Las bandas del espectro visible e infrarrojo cercano

poseen una resolución espacial de 30 metros, mientras que la banda del infrarrojo térmico tiene una resolución espacial de 120 metros.

Con un programa de procesamiento de imágenes satelitales IDRISI Taiga, desarrollado por la Universidad de Clark en el año 2009 ([www.clarklabs.org](http://www.clarklabs.org)), la resolución espacial fue llevada a 1 km y se obtuvo la información de relevancia para el área específica de estudio y los requerimientos del modelo. Al final de este proceso se obtienen como resultado los archivos en el formato válido para correr las subrutinas del modelo y generar los datos de entrada.

Con las bandas del espectro de energía correspondientes al infrarrojo cercano, rojo y verde se realiza una clasificación a través de la opción cluster analysis del programa IDRISI Taiga, la cual permite identificar los distintos tipos de cobertura a través de los patrones de reflectancia o emisión de energía desde los objetos que se encuentran en la superficie terrestre, agrupando en clases a los píxeles de la imagen mediante el histograma de la misma.

La Figura 4.3 muestra la imagen de la clasificación no supervisada de la cobertura del suelo con resolución espacial de 30 metros.

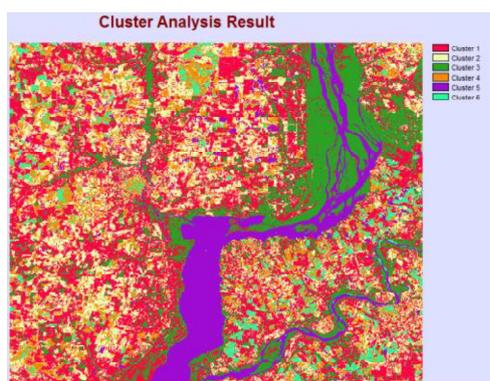


Figura 4.3: Clasificación no supervisada. Resolución espacial de 30 m.

El modelo de elevación de terreno (MDE) del área de estudio fue obtenido del banco de datos de U.S. Geological Survey (<http://srtm.usgs.gov>). La Figura 4.4 presenta el relieve de la zona. A partir de la imagen clasificada (Figura 4.3) se obtuvieron datos de la cobertura del terreno como el tipo de vegetación en zonas rurales, zonas urbanas y zonas cubiertas por agua, llevando la resolución espacial a 1 km, con el objeto de que coincida con los datos del MCLM.

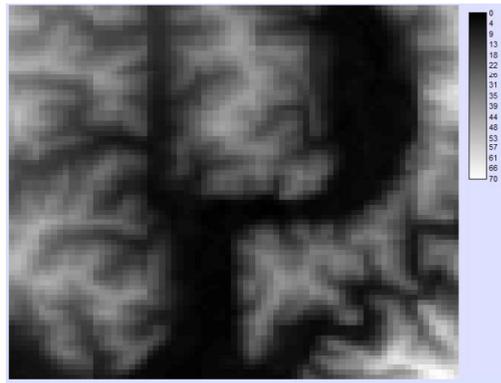


Figura 4.4: Modelo Digital de Elevación (MDE) en metros. Resolución espacial 1 km.

Estos tipos de vegetación fueron llevados a categorías (Figura 4.5a) según la tipología de Olson World Ecosystem Classes (Olson et al. 1985) y a partir de la correspondencia que proponen los autores (Tabla 4.2) se obtuvo el mapa del parámetro de rugosidad del suelo (Figura 4.5b). Para la obtención del Índice de Vegetación Normalizado (NDVI) se utilizaron los datos del sensor Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer (MODIS) montado en el satélite TERRA que se muestran en la Figura 4.6a. Éstos fueron adquiridos del banco de datos de Land Processes Distributed Active Archive Center (LP DAAC) de USGS/Earth Resources Observation and Science (EROS) Center, Sioux Falls, South Dakota ([http://lpdaac.usgs.gov/get\\_data](http://lpdaac.usgs.gov/get_data)). Los valores de energía emitida por los elementos de la superficie de la tierra obtenidos a partir de la imagen de satélite LANDSAT 5 en la banda del infrarrojo térmico fueron llevados a valores de temperatura siguiendo la metodología propuesta por Pérez et al. (2003). La Figura 4.6b representa la temperatura de la superficie.

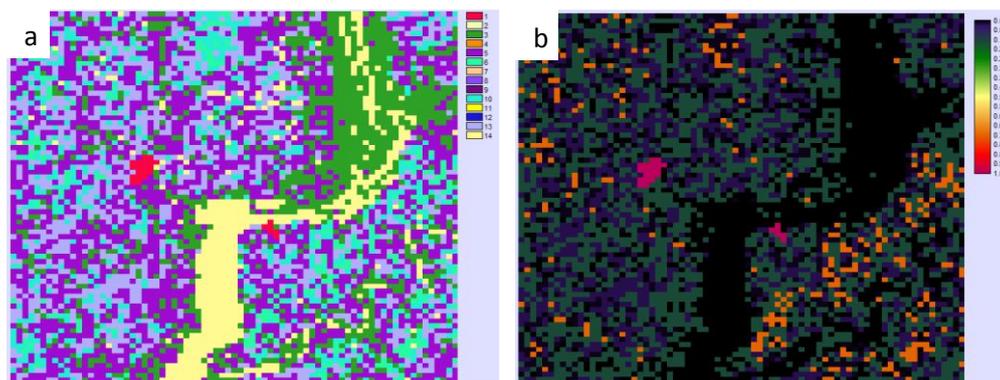


Figura 4.5: a) Tipos de cobertura vegetal. Resolución Espacial 1 km. b) Parámetro de rugosidad de suelo en metros. Resolución espacial 1 km.

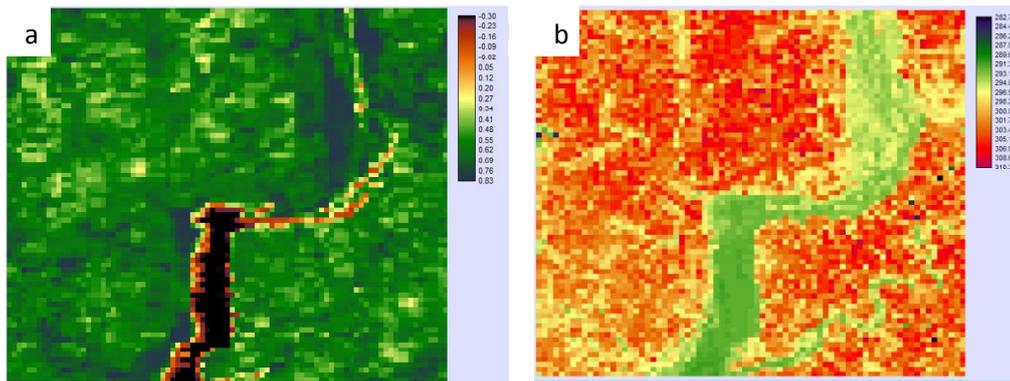


Figura 4.6: a) Índice de Vegetación Normalizado (NDVI). Resolución espacial 1 km. b) Temperatura de superficie en °K. Resolución espacial 1 km.

Tipo de Vegetación	Definición	Olson World Ecosystem Classes	Herbáceo o Arbóreo	Parámetro de rugosidad
01	Desierto	01 08 50 69 71	Herbáceo	0,002
02	Tundra	42 53	Herbáceo	0,020
03	Gramíneas	16 30 37 40 52	Herbáceo	0,010
04	Gramíneas con vegetación arbustiva	02 41 43 49	Árboles	0,100
05	Gramíneas con vegetación arbórea	58	Árboles	0,150
06	Forestación caducifolia	24 25 26 27 29 56 61	Árboles	0,750
07	Forestación perenne	06 20 21 22 23 46 47 48 57 60 62	Árboles	1,000
08	Bosques	32 33 54	Árboles	2,000
09	Hielos permanentes	17 70	Herbáceo	0,005
10	Cultivos	28 31 36 38 39 55	Herbáceo	0,020
11	Manglares o pantanos	44 45	Herbáceo	0,020
12	Arbustos bajos	59 63 64	Herbáceo	0,060
13	Semidesértico	51	Herbáceo	0,040
14	Agua	00 65 66 67 68 72 73	No corresponde	0,001

Tabla 4.2: Tipos de vegetación según Olson World Ecosystem Classes y parámetro de rugosidad (Olson et al.1985).

Para inicializar los perfiles de las variables meteorológicas se utilizaron las salidas del modelo de pronóstico operativo que utiliza el Servicio Meteorológico Nacional (SMN) denominado Modelo de Capa Límite en Mesoescala (MCLM). Este modelo se ejecuta diariamente, forzado a escala regional a partir de los pronósticos operativos diarios del modelo Eta/SMN, para generar pronósticos a 24hs.

Para este fin se utilizan las salidas de los valores de velocidad y dirección del viento del modelo MCLM que están organizados en una grilla espacial de resolución de 1 kilómetro para cada hora a lo largo de un día.

Se realizó la modelación considerando el periodo de tiempo registrado (Ver Tabla 3.1) iniciado la corrida una hora antes, sin lanzar partículas en este lapso de tiempo, con el objeto de estabilizar las variables meteorológicas.

La modelación se efectuó considerando los datos de cada una de las fuentes puntuales (Tabla 2.7) y difusas (Tabla 2.8) por separado, ya que el modelo permite utilizar hasta cinco fuentes simultáneamente.

Las coordenadas de las fuentes fueron obtenidas del Google Earth y transformadas a los valores  $x$  e  $y$  requeridos por el modelo ARPS-STO-MCLM mediante las siguientes ecuaciones:

$$\{x\}=(XG+58.762)*1000/0.0107333$$

$$\{y\}=(YG+33.397)*1000/0.009$$

ARPS-STO no identifica cada uno de los compuestos TRS según su composición química sino que simula la dispersión de una sustancia genérica. Es por esto que en este caso el modelo se aplica para simular la totalidad de los TRS.

La masa total de sustancia emitida por las fuentes está representada por un total de 500 partículas cada 10 segundos, distribuidas en celdas con un área superficial de  $9 \cdot 10^4 \text{ m}^2$  y una altura de 5 m, es decir un volumen total de  $4.5 \cdot 10^5 \text{ m}^3$ .

La cantidad de partículas emitidas fue seleccionada considerando el tiempo de corrida necesario para cada simulación, ya que el mismo es proporcional al incremento del número de partículas lanzadas por paso de tiempo.

Se realizaron intentos lanzando 1500 partículas por paso de tiempo pero el modelo se tornaba obsoleto demorando alrededor de 20 hs en realizar cada modelación e incluso en algunos casos no finalizaba la ejecución satisfactoriamente. Por otro lado se intentó con 100 partículas por paso de tiempo, lo cual disminuye el tiempo de corrida, pero la definición de los resultados gráficos disminuía y se tornaba difícil la separación según el porcentaje de emisión de cada fuente.

El peso de cada partícula se calcula considerando que la masa total emitida por el modelo, representados por las 500 partículas cada 10 segundos, equivale a la masa total emitida por las fuentes durante el mismo periodo.

El número de partículas contenido en cada celda es empleado para el cálculo de la concentración de TRS,  $C$ , según la siguiente ecuación:

$$C = (n \cdot w_p) / V \quad (4.42)$$

donde  $n$  es el número de partículas en cada celda,  $w_p$  es el peso de cada particular en  $\mu\text{g}$  y  $V$  el volumen de cada celda en  $\text{m}^3$ .

El peso de cada partícula es igual a 0.1142 g, valor que resulta de dividir la masa total emitida durante 10 segundos (57.1 g) por el número de partículas emitidas (500) en ese lapso de tiempo. La masa emitida (57.1 g) resulta de multiplicar la suma de las tasas totales de emisión en condiciones normales (5.65 g/s de la Tabla 2.11 más 0.06 g/s de la Tabla 2.12) por el intervalo de tiempo de 10 segundos. Considerando los factores de emisión de cada fuente, detallados en las Tablas 2.11 y 2.12, la emisión total de 500 partículas por segundo se distribuye de la siguiente forma: caldera de recuperación 414 partículas, calderas de gases GOC y GOL 38 partículas, horno de cal 43 partículas y sistema de tratamiento de efluentes líquidos 5 partículas.

Estos datos se programan en el archivo input de ARPS-STO-MCLM donde se incluyen las coordenadas, la altura y el radio de cada fuente, la temperatura de salida de los gases, la rugosidad de la chimenea, y el número de partículas emitidas, según el siguiente detalle:

```

1          ! NUMERO DE LA FUENTE
6577.0    ! coordenada x del centro de la fuente
1242.0    ! coordenada y del centro de la fuente
 120.0    ! altura z del centro de la fuente
   2.3    ! radio x de la fuente
   2.3    ! radio y de la fuente
   2.3    ! radio z de la fuente
   1      ! flag (1/0)= (si/no) Temp. fluidpart.
 160.0    ! Temp. de salida de part. fluidas (°C)
  10.0    ! Rugosidad de la pared de chimene K(mm)
 452.0    ! número de partículas fluidas emitidas
-----
2          ! NUMERO DE LA FUENTE
 6577.0    ! coordenada x del centro de la fuente
31242.0   ! coordenada y del centro de la fuente
  120.0    ! altura z del centro de la fuente
   1.25    ! radio x de la fuente
   1.25    ! radio y de la fuente
   1.25    ! radio z de la fuente
   1      ! flag (1/0)= (si/no) Temp.fluidpart.
 220.0    ! Temp. de salida de part. fluidas (°C)
  10.0    ! Rugosidad de la pared de chimenea K(mm)
  43.0    ! número de partículas fluidas emitidas
-----
3          ! NUMERO DE LA FUENTE
46160.0   ! coordenada x del centro de la fuente
31388.0   ! coordenada y del centro de la fuente
   1.0    ! altura z del centro de la fuente
 150.0    ! radio x de la fuente
 150.0    ! radio y de la fuente
   0.1    ! radio z de la fuente
   0      ! flag (1/0)= (si/no) Temp.fluidpart.
 15.0    ! Temp. de salida de part. fluidas (°C)
   0.0    ! Rugosidad de la pared de chimenea K(mm)

```

La fuente N° 1 corresponde a la chimenea principal de la caldera de recuperación y las calderas de gases GOC y GOD, la fuente N° 2 es la chimenea del horno de cal y la fuente N° 3 es la emisión difusa de los sistemas de tratamiento de efluentes líquidos.

La ejecución de este modelo da como resultado las trayectorias de las partículas en los diferentes instantes considerados, por lo cual resulta necesario correr una subrutina destinada a convertir dichos resultados a valores de concentración de partículas en cada celda. Una vez obtenidos estos valores de concentración se realiza el post-procesamiento a los efectos de graficar el valor promedio del periodo considerado a nivel de respiración.

La concentración  $C_i$  de cada uno de los cuatro componentes de TRS se calcula mediante la siguiente ecuación;

$$C_i[\mu\text{g}/\text{m}^3] = C * P_i \quad (4.43)$$

en donde  $C$  es la concentración total de TRS según la ecuación (4.42) y  $P_i$  es la fracción de partículas que contribuye cada componente al total de 500 partículas de TRS.

Para ello solo se considera una hora de modelado en cada caso a los efectos de que los resultados de concentración obtenidos para el  $\text{H}_2\text{S}$ , sean directamente comparables con los de la versión acoplada al modelo de reacciones químicas LES-STO.

Con la concentración de cada compuesto se calcula el índice de detección de olor mediante la ecuación (4.44):

$$I_o = \frac{C_{\text{H}_2\text{S}}}{UO_{\text{H}_2\text{S}}} + \frac{C_{\text{CH}_3\text{HS}}}{UO_{\text{CH}_3\text{HS}}} + \frac{C_{(\text{CH}_3)_2\text{S}}}{UO_{(\text{CH}_3)_2\text{S}}} + \frac{C_{(\text{CH}_3)_2\text{S}_2}}{UO_{(\text{CH}_3)_2\text{S}_2}} \quad (4.44)$$

dónde:  $I_o$  es índice de detección de olor, el numerador es la concentración de cada compuesto TRS según (4.43) y el denominador es el umbral de detección de olor para cada compuesto TRS.

En aquellos casos en los cuales la pluma resultante de la modelación impactaba alguno de los receptores identificados, se estimó la distribución espacial de los compuestos de azufre total reducido emitidos y se calculó el índice  $I_o$ .

Con el fin de comparar los resultados obtenidos se emplea otro modelo de dispersión con el cual se simulan un total de 10 casos en similares condiciones. Para ello se utilizó el modelo HYSPLIT (Hybrid Single Particle Lagrangian Integrated Trajectory) desarrollado por la National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA) de los Estados Unidos.

El modelo permite el cálculo tanto de simples trayectorias de parcelas de aire, así como también simulaciones complejas de dispersión y deposición de contaminantes. El método de cálculo es una conjunción del método lagrangiano, en el cual las parcelas de aire se mueven dentro de un marco de referencia hacia su posición final para los cálculos de advección y difusión y el método euliano el cual emplea una grilla tridimensional fija como marco de referencia para el cálculo de las concentraciones de contaminantes atmosféricos.

Cabe destacar que este modelo tiene incorporados los datos geográficos y solamente es necesaria la serie de datos meteorológicos (viento, temperatura y presión) la cual se toma de los pronósticos del modelo MCLM.

En primera instancia se empleó la versión off-line del modelo, la cual permite realizar simulaciones por un periodo mínimo de 12 horas, incluyendo las tasas de emisión y la altura de la chimenea.

Las tasas de emisión requeridas por el mismo son horarias, por lo cual para que los resultados sean comparables con los de ARPS-STO-MCLM la tasa de emisión total (5.71 g/s) se convierte a las unidades obteniendo una tasa de emisión  $2.05 \cdot 10^6$  ug/h.

Posteriormente, y a los efectos de comparar los resultados, se simularon una serie de 8 casos empleando la versión on-line del modelo, la cual permite modelar periodos menores a las 12 horas, ajustando dicho periodo al mismo empleado por ARPS-STO-MCLM.

Por otro lado, con el objeto de modelar particularmente la concentración de  $H_2S$ , se incorporó un modelo de reacciones químicas a la versión original de ARPS-STO-MCLM, ya que este último tiene la ventaja de utilizar el modelo estocástico lagrangiano para el seguimiento de partículas en la simulación de la dispersión atmosférica, lo cual permite introducir de manera sencilla modelos de difusión y reacción química por contacto (coalescencia/dispersión) entre partículas portadoras de especies que intercambien entre ellas parte de su concentración (Aguirre et al, 2006).

Se acopla entonces el modelo de reacciones químicas “Large-Eddy Simulation – Lagrangian Stochastic Model (LES-STO) a la versión original de ARPS-STO-MCLM, para obtener una versión más completa que permita simular las transformaciones químicas que tienen lugar durante el proceso de dispersión atmosférica. Gracias a ello, pueden obtenerse los valores instantáneos de los niveles de concentración de especies químicas y su distribución espacial en un episodio de contaminación.

En este caso se modelan los mismos tres eventos (10 de septiembre, 12 de octubre y 30 de noviembre) para los cuales se realizó la distribución espacial de los compuestos TRS con la versión original de ARPS-STO-MCLM, con el objetivo de comparar las concentraciones de H<sub>2</sub>S obtenidas con ambas versiones.

Para el estudio de este caso se adaptó el modelo para la simulación de la siguiente reacción (4.45);



Los valores utilizados son:

- $\text{Ca}_0 = 3.91 \cdot 10^{-3}$  ppm
- $\text{Cb}_0 = 4.06 \cdot 10^{-8}$  ppm
- $\text{K}_{\text{reac}} = 1.30 \cdot 10^2 \text{ ppm}^{-1} \text{ s}^{-1}$

donde  $\text{Ca}_0$  es la concentración de H<sub>2</sub>S en boca de chimenea,  $\text{Cb}_0$  es la concentración atmosférica de OH<sup>-</sup> y  $\text{K}_{\text{reac}}$  es la constante de reacción directa para la ecuación química definida.

Para este caso no se considera la reacción inversa, ya que lo que se propone obtener es la variación directa de la concentración de H<sub>2</sub>S.

La concentración  $\text{Ca}_0$  se obtiene multiplicando el valor de la emisión total de TRS (5.71 g/s) por el porcentaje de emisión de H<sub>2</sub>S (40.33%), lo cual resulta 2.30 g/s (2300 mg/s). Para estimar la concentración en boca de chimenea se debe dividir este valor por el volumen de la celda ( $4.5 \cdot 10^5 \text{ m}^3$ ), dando como resultado  $5.11 \cdot 10^{-3} \text{ mg/m}^3$ , que convertidos a ppm son  $3.91 \cdot 10^{-3}$  ppm.

Las simulaciones realizadas con el modelo ARPS-STO-MCLM acoplado al LES-STO requieren tiempos extremadamente largos para correr cortos periodos de tiempo. Es por esto que se redujo el paso del tiempo a 0.5 segundos, para disminuir las inestabilidades del modelo y

garantizar el tiempo de reacción entre las especies, el número de partículas emitidas se redujo a 5/0.5 segundos y solamente se modeló una hora en cada uno de los casos.

#### **4.6 Conclusión**

Los modelos que se emplean son apropiados para la simulación de los eventos de seleccionados. El modelo ARPS-STO permite simular los fenómenos de transporte y difusión turbulenta de contaminantes, mientras que el modelo MCLM permite simular y pronosticar la circulación en la capa límite atmosférica en ambientes de fuerte contraste térmico horizontal. El modelo MCLM fue especialmente desarrollado para estudiar la circulación atmosférica en capas bajas sobre la región del Río de La Plata y su zona de influencia, en donde se validó exitosamente. Los pronósticos de viento del modelo MCLM se validan con las observaciones de una torre meteorológica situada en las proximidades de la costa del río Uruguay, lográndose un buen acuerdo general. A pesar que el modelo en general subestima a la velocidad del viento, ello no se considera un obstáculo para la simulación ya que si bien las plumas viajarían una distancia menor, lo harían en una dirección próxima a la real.

## CAPITULO V

### RESULTADOS DEL MODELO ARPS-STO-MCLM

#### 5.1 Simulación de los eventos de olor

En este capítulo se presenta el resultado de la simulación realizada con el modelo ARPS-STO acoplado al modelo MCLM, mediante un conjunto de figuras que muestran la distribución espacial de las concentraciones de compuestos TRS. La modelación corresponde a los 10 días seleccionados en los que hubo 11 eventos en los cuales se registraron quejas sociales que fueron objeto de verificación por parte de los funcionarios del PVA.

Para la verificación de las denuncias los oficiales del PVA asistían al lugar y registraban si percibían o no el olor denunciado, sin realizar mediciones ni toma de muestra. Como resultado de este procedimiento registraban la constatación o no de la denuncia. La Tabla 5.1 presenta la lista de los eventos indicando la fecha, hora y la localización de cada punto.

Fecha	Hora	Lugar	Lat - Lon
10 sep 2009	09:45 - 11:45	Puente Internacional	33° 5'56.71"S, 58°14'54.73"O
12 oct 2009	10:30 - 12:30	Puente Internacional	33° 5'56.71"S, 58°14'54.73"O
3 nov 2009	22:00 - 02:20	Gualeguaychú	33° 0'26.66"S, 58°30'42.48"O
5 nov 2009	08:00 - 10:00	Balneario Ñandubaysal	33° 4' 5.80"S, 58°22'34.42"O
10 nov 2009	14:00 - 20:00	Gualeguaychú	33° 0'26.66"S, 58°30'42.48"O
29 nov 2009	21:00 - 22:30	Gualeguaychú	33° 0'26.66"S, 58°30'42.48"O
30 nov 2009	10:30 - 10:50	Gualeguaychú	33° 0'26.66"S, 58°30'42.48"O
30 nov 2009	14:30 - 21:30	Puente Internacional	33° 5'56.71"S, 58°14'54.73"O
1 dic 2009	21:30 - 23:45	Gualeguaychú	33° 0'26.66"S, 58°30'42.48"O
3 dic 2009	05:00 - 06:30	General Belgrano	33° 1'18.64"S, 58°29' 8.63"O
15 dic 2009	10:40 - 12:00	Gualeguaychú	33° 0'26.66"S, 58°30'42.48"O

Tabla 5.1: Fecha, hora y localización de los eventos modelados.

En tres de esos eventos se calculó el índice de detección de olor, mediante la ecuación

(4.42), a partir de la distribución espacial de las concentraciones de los cuatro componentes de TRS (sulfuro de hidrógeno, metil mercaptano, dimetil sulfuro y dimetil disulfuro). Dos de esos eventos corresponden a casos constatados por los funcionarios del PVA (10 de septiembre y 12 de octubre), y el tercero corresponde a una denuncia no constatada aunque la modelación muestra a la pluma sobre el lugar.

## 5.2 Resumen de resultados

En la Tabla 5.2 se resumen los resultados de los 11 casos estudiados indicando, fecha, hora, localización de la denuncia, verificación de la presencia del mal olor por parte del PVA y la coincidencia o no, de la posición de la pluma de TRS modelada con el lugar donde se registró la denuncia. El “sí” en la tercera columna de la tabla indica que los oficiales del PVA verificaron la presencia del mal olor mientras que “no” significa que la verificación fue negativa. En la cuarta columna de la Tabla 5.2, el “sí” indica que la localización de la denuncia está ubicada dentro del área alcanzada por la pluma modelada y el “no” representa el caso contrario (la denuncia está fuera del área alcanzada por la pluma).

Fecha y hora	Lugar denuncia	Verificación del mal olor PVA	Coincidencia especial /localización de la denuncia	Fig. N° 5.1
10 de septiembre de 2009 09:45-10:45	Puente Internacional	si	no	a
12 de octubre de 2009 10:30-12:30	Puente Internacional	si	si	b
03 noviembre de 2009 22:45-02:20	Ciudad de Gualeguaychú	no	no	c
05 noviembre de 2009 08:00-10:00	Balneario Ñandubaysal	no	no	d
10 de noviembre de 2009 14:00-20:00	Ciudad de Gualeguaychú	no	no	e
29 de noviembre de 2009 21:00 a 22:30	Ciudad de Gualeguaychú	no	no	f
30 de noviembre de 2009 10:30 a 10:50	Ciudad de Gualeguaychú	no	no	g
30 de noviembre de 2009 14:30-21:30	Puente Internacional	no	si	h
01 de diciembre de 2009 21:30-23:45	Ciudad de Gualeguaychú	no	no	i
03 de diciembre de 2009 05:00-06:30	Pueblo General Belgrano	no	no	j
15 de diciembre de 2009 10:40-12:00	Ciudad de Gualeguaychú	no	no	k

Tabla 5.2: Resumen de resultados para los 11 casos evaluados.

La Figura 5.1 presenta un panel para cada evento simulado que muestra la distribución espacial de la concentración de TRS en  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , en donde el círculo rojo indica la posición del

lugar de la denuncia. En la Figura 5.1(a) se observa la pluma modelada para el día 10 de septiembre de 2009 cuando se registró una denuncia constatada por el PVA en el Puente Internacional en el periodo de 09:45 a 11:45. La pluma se desarrolla en dirección predominante oeste-sudoeste, pero el área del Puente Internacional no está afectada directamente, aunque la pluma se ubica muy cercana a la misma. El día 12 de octubre de 2009 también se registró una denuncia constatada en el Puente Internacional en el periodo de 10:30 a 12:30. La Figura 5.1(b) muestra que la pluma se orienta en dirección noreste afectando directamente la zona donde se registró la denuncia. En la noche del día 03 de noviembre de 2009, se registraron varias denuncias en el periodo de 22:45 a 02:20 del día siguiente, las cuales no fueron verificadas por los funcionarios del PVA. En la Figura 5.1(c) se puede ver que la pluma viaja hacia el norte y no impacta sobre el área donde se registraron las denuncias. La Figura 5.1(d) presenta el resultado de la modelación para el día 05 de noviembre de 2009, cuando se registró una denuncia en el área del Balneario Ñandubaysal en el horario de 08:00 a 10:00. La denuncia no fue constatada por los funcionarios del PVA, a la vez que la pluma resultante de la modelación, que se extiende en dirección norte-noroeste, no impacta en dicha zona. El día 10 de noviembre de 2009 de 14:00 a 20:00 se registró una denuncia en la ciudad de Gualeguaychú, la cual no fue constatada por los funcionarios del PVA. El resultado de la modelación se muestra en la Figura 5.1(e), en la cual la pluma se extiende hacia el norte y norte-noreste, alejada del lugar donde se registró la denuncia. El 29 de noviembre de 2009, también se registró una denuncia no constatada en la ciudad de Gualeguaychú en el periodo de 21:00 a 22:30. La pluma que se observa en la Figura 5.1(f) se extiende hacia el norte-noreste en una zona alejada de donde se realizó la denuncia. Para el día 30 de noviembre de 2009 se realizaron dos simulaciones, ya que se registraron dos denuncias en diferentes periodos de tiempo y diferentes sitios. Una de ellas se registró en el período de 10:30 a 10:50 en la ciudad de Gualeguaychú, y la otra de 14:30 a 21:30 en el Puente Internacional, pero ninguna de ellas fue constatada por los funcionarios del PVA. La Figura 5.1(g) muestra el resultado de la modelación del período de la primera denuncia y en la misma se puede observar que la pluma se extiende hacia el norte y noroeste de la ciudad de Gualeguaychú. La Figura 5.1(h) corresponde al periodo de la segunda denuncia del día y se puede ver que la pluma viaja hacia el norte y el norte-noreste, extendiéndose sobre el Puente Internacional en coincidencia con el lugar en donde se registró la denuncia. El 01 de diciembre de 2009, desde las 21:30 a las 23:45, se registró una denuncia no constatada en la ciudad de Gualeguaychú. Como podemos apreciar en la Figura 5.1(i), la pluma se dirige hacia el suroeste, alejada completamente de la ciudad de Gualeguaychú. El 03 de diciembre de 2009 se registró una denuncia en Pueblo General Belgrano, desde las 05:00 a las 06:30, la cual no fue constatada por los funcionarios del PVA. La pluma de la Figura 5.1(j) se extiende hacia el norte, alejada de la zona donde se registró la denuncia. Por último, una situación similar ocurre el día 15 de diciembre de 2009, cuando se registró una denuncia en la ciudad de Gualeguaychú, en el periodo de 10:40 a 12:00, la cual no

fue constatada por los funcionarios del PVA. La Figura 5.1(k) muestra que la pluma tiene una orientación noreste, distante de la ciudad de Gualeguaychú.

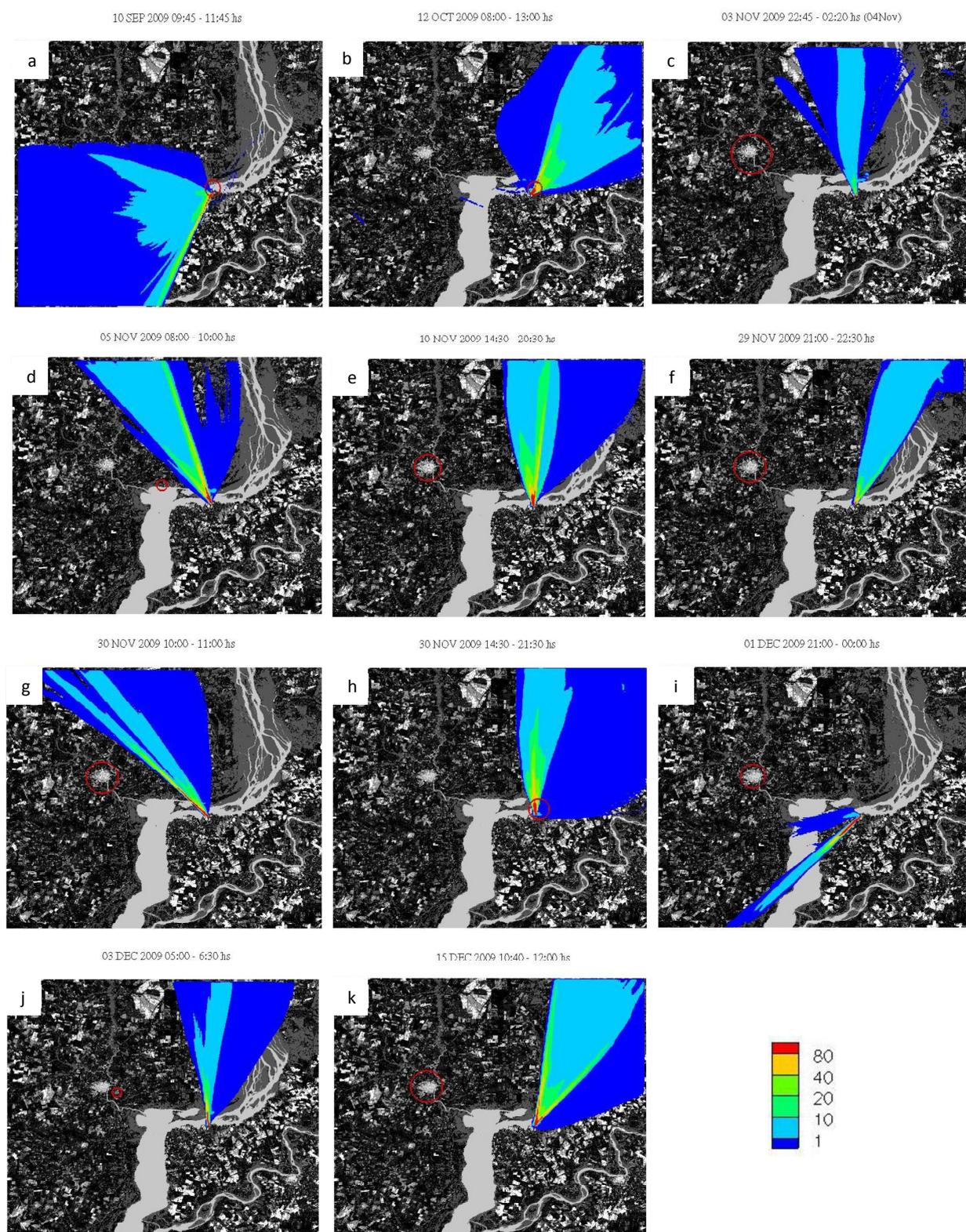


Figura 5.1: Concentración de TRS en  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , correspondientes a los 11 casos modelados. El horario de cada figura indica el periodo de modelado. El círculo rojo indica el área donde se localizó la denuncia.

### 5.3 Casos especiales

Se seleccionaron tres eventos para los cuales se calculó la distribución espacial de las concentraciones de los componentes de TRS (sulfuro de hidrógeno, metil mercaptano, dimetil sulfuro y dimetil disulfuro), y mediante la ecuación (4.42) se calculó el índice de detección de olor. Los casos seleccionados corresponden a dos eventos con denuncias constatadas por los funcionarios del PVA (10 de septiembre y 12 de octubre), mientras que el tercero corresponde al día 30 de noviembre en que la denuncia no fue constatada a pesar que la pluma simulada se ubica sobre el lugar de la denuncia. Solamente se consideró una hora de modelado en cada caso, cuyo horario se destaca al pie de cada figura, a los efectos de poder posteriormente comparar los resultados con los del modelo LES-STO. Los resultados se presentan en el conjunto de Figuras de 5.2 a 5.4:

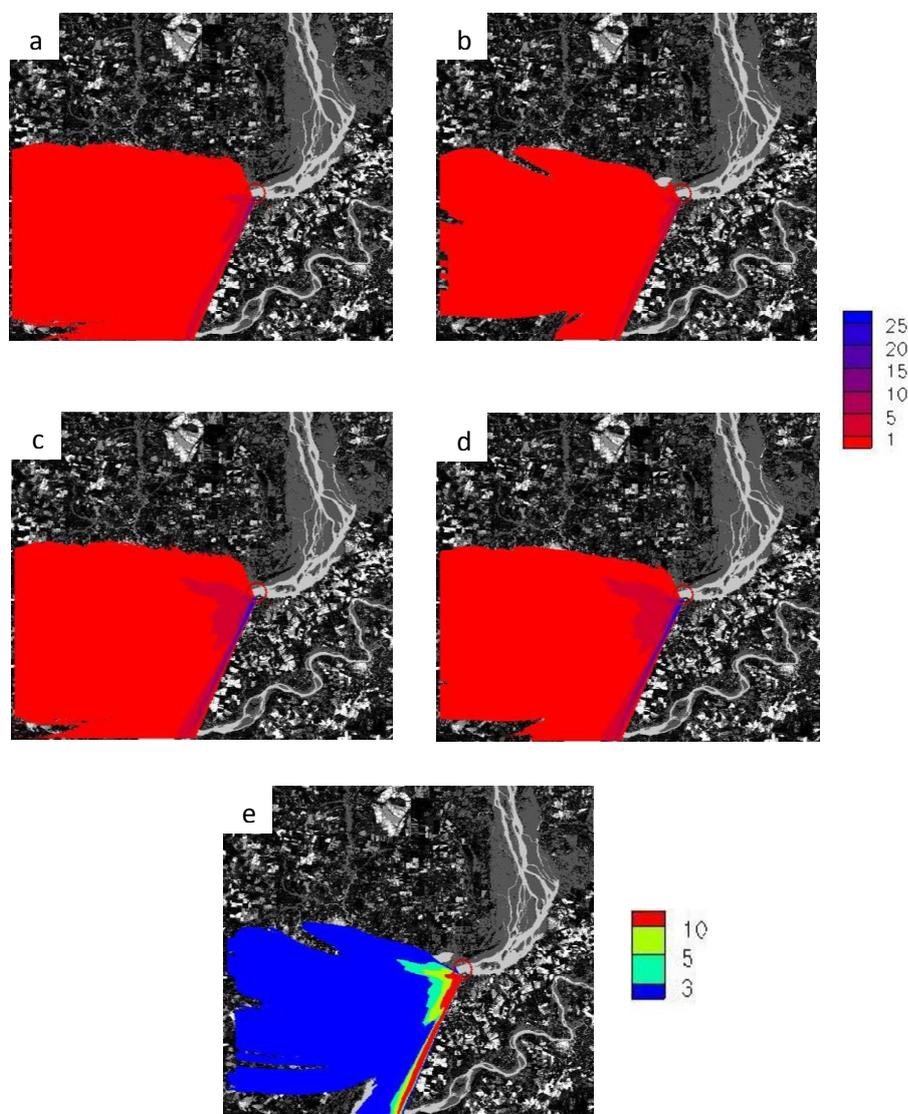


Figura 5.2: 10 de septiembre de 2009, 10:00-11:00 hs. Concentración de: a) dimetil sulfuro, b) dimetil disulfuro, c) metil mercaptano, d) sulfuro de hidrógeno, expresada en  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  y e) índice de detección de olor.

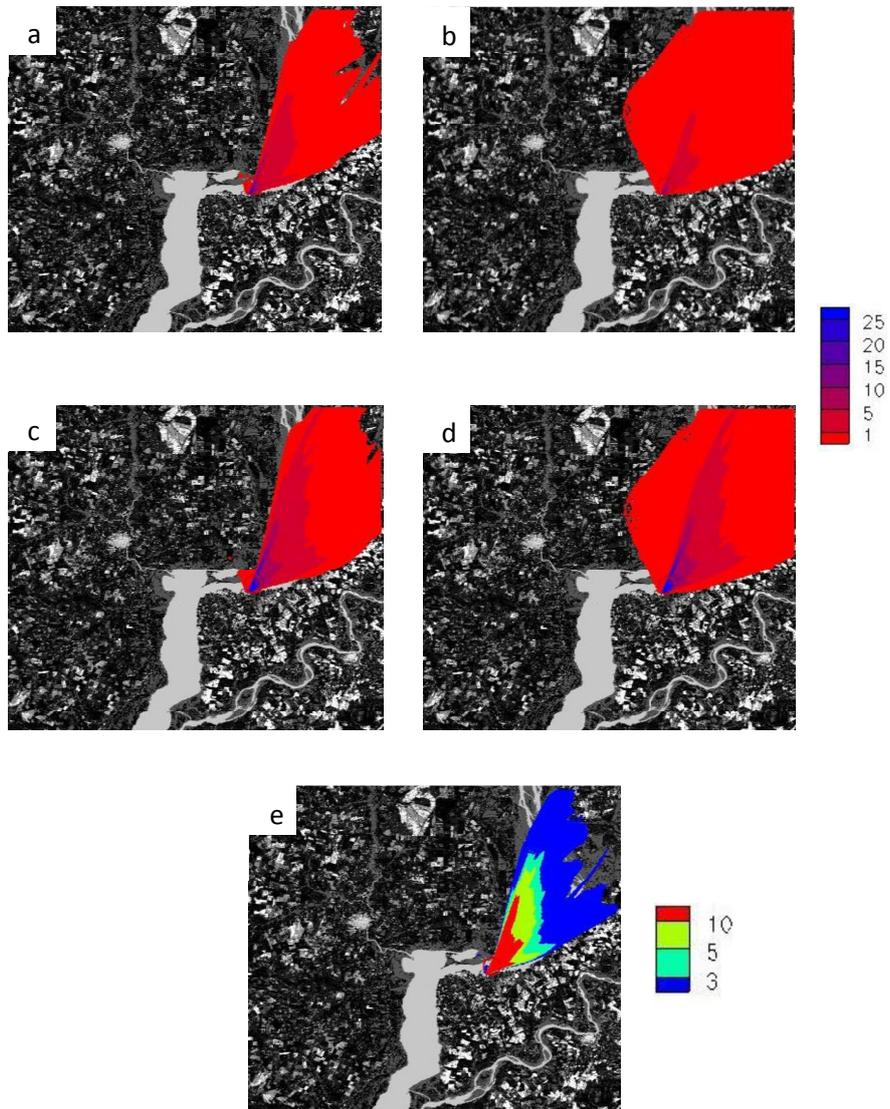


Figura 5.3: 12 de octubre de 2009, 09:00-10:00hs. Concentración de: a) dimetil sulfuro, b) dimetil disulfuro, c) metil mercaptano, d) sulfuro de hidrógeno, expresada en  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  y e) índice de detección de olor.

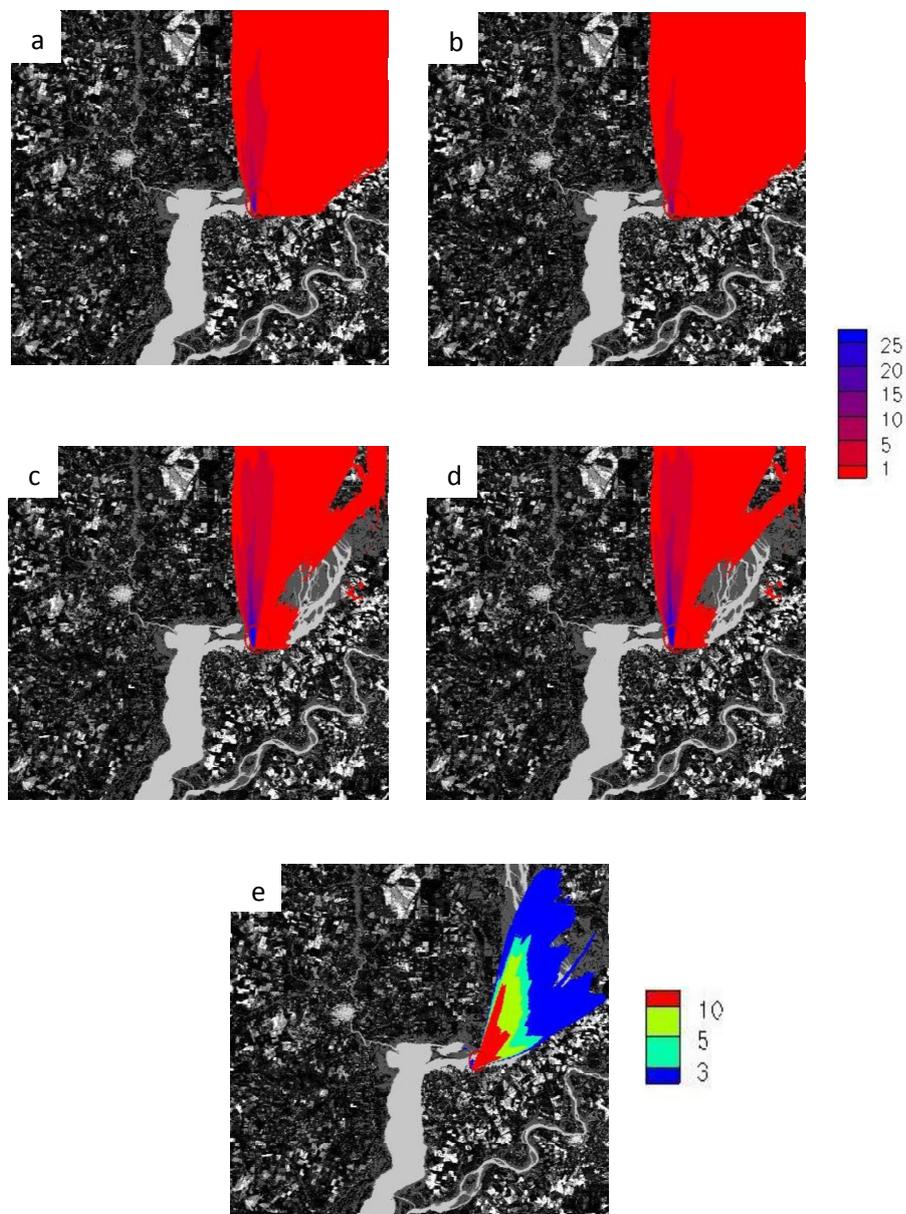


Figura 5.4: 30 de noviembre de 2009, 16:00-17:00 hs. Concentración de: a) dimetil sulfuro, b) dimetil disulfuro, c) metil mercaptano, d) sulfuro de hidrógeno, expresada en  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  y e) índice de detección de olor.

En los 3 casos el índice de detección de olor supera el valor de 10 y de acuerdo a los valores de la Tabla 2.6 de impactos odoríferos, se puede concluir que el olor es reconocible en todos ellos. En el caso particular del día 30 de noviembre de 2009 durante el periodo de 14:30 a 21:30 el valor promedio del índice de detección de olor supera a 10, aunque según consta en el registro de actuaciones esta denuncia no fue constatada por el personal del PVA.

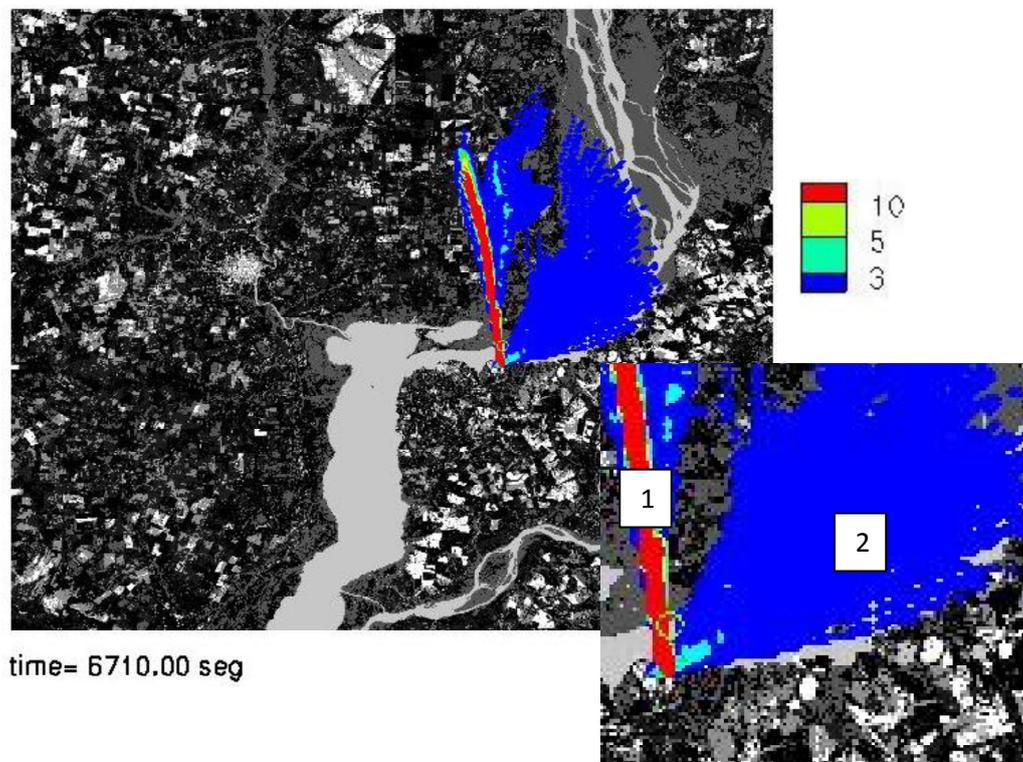


Figura 5.5: Índice de detección de olor para el día 30 de noviembre de 2009, 15:20 hs.  
Pluma (1), fuente puntual. Pluma (2), fuente difusa.

La Figura 5.5 muestra el índice de detección de olor para las 15:20 de ese día. En la misma se puede apreciar que las plumas de las fuentes puntuales (1) y la fuente difusa (2) se separan justo en la zona donde se ubica el Puente Internacional, de modo que si el personal hubiese realizado la constatación alrededor de ese horario podría no haber percibido el olor, lo que explicaría el hecho de no haber sido constatada la denuncia.

#### 5.4 Conclusión

El resultado de la modelación se considera muy bueno ya que en nueve de los once eventos modelados, es decir un 82% de ellos, hay coincidencia entre la posición de la pluma y el resultado de la constatación de la denuncia.

En uno de los dos casos no exitosos, si bien la pluma modelada no impacta directamente en el lugar de la denuncia, la que fue constatada por el personal del PVA, se ubica muy próxima al mismo, por lo cual la discrepancia puede ser atribuida a la incertidumbre propia de la simulación numérica.

En el segundo caso la pluma promedio simulada impacta el lugar de la denuncia, pero la misma no fue constatada por el personal del PVA. El periodo modelado es, en este caso, el más extenso (7 horas) y durante el mismo se observó no sólo una variación importante de la dirección del viento sino también diferentes trayectorias, por momentos, de las plumas de la fuente difusa de superficie y la fuente puntual a 120 metros. Este comportamiento particular, sumado al hecho que se desconoce el momento preciso en que el personal del PVA se hizo presente en el lugar, podría explicar el desacuerdo entre la simulación y el resultado de la verificación de la denuncia.

Las concentraciones de TRS obtenidas con la modelación son variables, aunque en los puntos de las denuncias las concentraciones máximas superan los 80  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ . En tres eventos en particular se calculó la distribución espacial de las concentraciones individuales de los componentes de TRS y el valor del índice de olor resultó superior a 10 en los puntos de las denuncias, lo que significa que el olor es no sólo perceptible, sino además objetable.

## **CAPITULO VI**

### **RESULTADOS DEL MODELO HYSPLIT**

Con el objeto de corroborar los resultados obtenidos con el modelo ARPS-STO-MCLM se emplea el modelo Hysplit para simular los 11 eventos, que como se indicó constituyen 10 casos ya que dos eventos muy próximos en tiempo se simulan como uno. El modelo Hysplit (Hybrid Single Particle Lagrangian Integrated Trajectory) fue desarrollado por la National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA) de los Estados Unidos y permite el cálculo tanto de simples trayectorias de parcelas de aire, como así también simulaciones complejas de dispersión y deposición de contaminantes. El método de cálculo es una conjunción del método lagrangiano, en el cual las parcelas de aire se mueven dentro de un marco de referencia hacia su posición final para los cálculos de advección y difusión, y el método eulero el cual emplea un retículo tridimensional fijo como marco de referencia para el cálculo de las concentraciones de contaminantes atmosféricos.

El modelo Hysplit tiene incorporados los datos geográficos y solamente es necesario proporcionar los datos meteorológicos de viento, temperatura y presión, lo que puede realizarse de dos formas, off-line y on-line. En la versión off-line el modelo permite emplear datos meteorológicos de otra fuente, en este caso el modelo MCLM; mientras que la versión on-line utiliza los datos meteorológicos del Global Forecast System (GFS) de NOAA. En ambos casos se emplean los mismos valores de las tasas de emisión y la hora de inicio que se usaron con el modelo ARPS-STO-MCLM. Es necesario destacar que la versión off-line no permite realizar cálculos por periodos inferiores a 12 horas. En el caso de la versión on-line, en cambio, se pueden simular periodos de tiempo más cortos pero no es posible especificar la altura de emisión, la que el modelo asume como superficie. Por lo tanto, a pesar que los resultados de Hysplit no sean estrictamente confrontables con los de ARPS-STO-MCLM debido a los detalles indicados, igualmente constituyen un buen punto de comparación.

## 6.1 Resultado de la modelación con Hysplit versión off-line

En la Figura 6.1 se presentan los resultados de la modelación realizada con la versión off-line del modelo. La Figura 6.1a) muestra la concentración de TRS calculada para el día 10 de septiembre de 2009 en que la dirección de la pluma coincide con la simulada por ARPS-STO-MCLM, aunque la extensión de la misma en el entorno a la fuente de emisión es mayor y alcanza al Puente Internacional con concentraciones del orden de  $0.01-0.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . Los resultados obtenidos para el día 12 de octubre de 2009 se muestran en la Figura 6.1b), los que coinciden plenamente con los simulados por ARPS-STO-MCLM, con valores de concentración que se encuentran en el rango de  $0.1-1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . La Figura 6.1c) muestra el resultado de la modelación del día 03 de noviembre de 2009, la que también coincide plenamente con lo simulado por ARPS-STO-MCLM, aunque la pluma no impacta en la ciudad de Gualeguaychú pero sí sobre el Puente Internacional con concentraciones del orden de  $0.01-0.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . Comparando los resultados de ambos modelos para el día 05 de noviembre de 2009 (Figura 6.1d) se puede apreciar que en efecto coincide la dirección de propagación de la pluma, aunque la extensión transversal de la misma es mayor que la simulada por ARPS-STO-MCLM, la cual impacta en la zona del balneario Ñandubaysal e incluso la ciudad de Gualeguaychú. Las concentraciones en el punto de la denuncia superan el valor de  $1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . Los resultados del día 10 de noviembre de 2009 se muestran en la Figura 6.1e). En esta simulación la dirección de propagación de la pluma coincide con la de ARPS-STO-MCLM, pero la extensión de la misma es mayor y alcanza a la ciudad de Gualeguaychú con concentraciones del orden de  $0.1-1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . Para el día 29 de noviembre de 2009 (Figura 6.1f) las simulaciones de HYSPLIT y ARPS-STO-MCLM coinciden en dirección y en extensión. En la Figura 6.1g), se pueden observar los resultados para el día 30 de noviembre de 2009. Estos son coincidentes con los de ARPS-STO-MCLM en cuanto a la dirección predominante de la pluma, aunque la extensión de la misma es mayor e impacta sobre la ciudad de Gualeguaychú. Las concentraciones en el punto de la denuncia se encuentran en el rango de  $0.1-1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

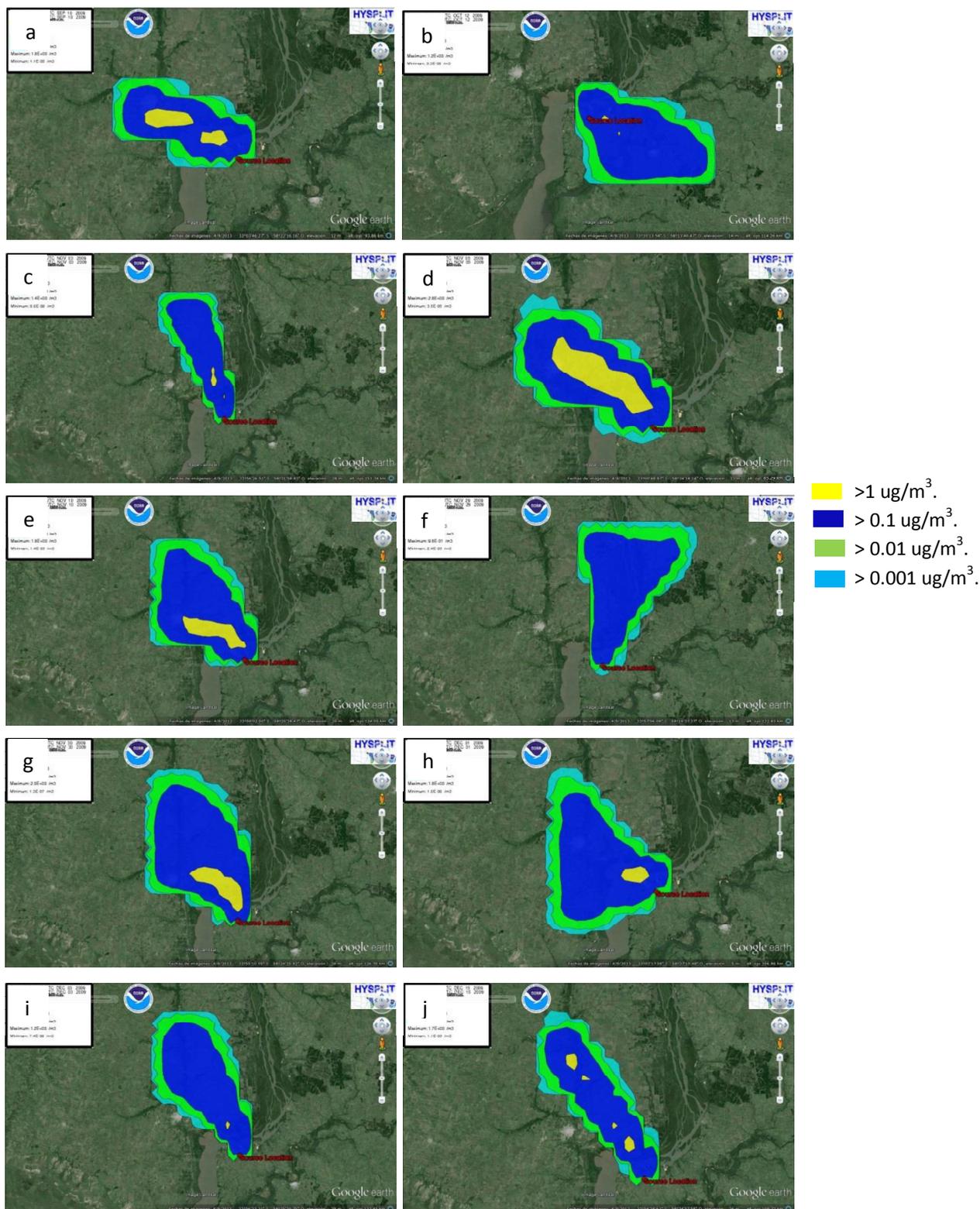


Figura 6.1: Resultados del modelo Hysplit off-line. Concentración de TRS en  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , modelada con la versión off-line de Hysplit para los días: a) 10 de septiembre; b) 12 de octubre, c) 03 de noviembre; d) 05 de noviembre; e) 10 de noviembre; f) 29 de noviembre; g) 30 de noviembre; h) 01 de diciembre; i) 03 de diciembre; j) 15 de diciembre de 2009.

Los resultados para el 01 de diciembre de 2009 (Figura 6.1h) coinciden con los simulados por ARPS-STO-MCLM y las concentraciones obtenidas para la ciudad de Gualeguaychú y el Puente Internacional están en el rango de 0.1-1  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ . La Figura 6.1i) muestra el resultado para el día 03 de diciembre de 2009. La pluma resultante coincide en dirección con la simulada con ARPS-STO-MCLM, sin embargo la extensión de la misma es mayor y alcanza a Pueblo General Belgrano con concentraciones inferiores a 0.01  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ . Los resultados para el día 15 de diciembre de 2009, que se presentan en la Figura 6.1j), no coinciden con los modelados por ARPS-STO-MCLM, tanto en alcance como extensión y la concentración en el punto de la denuncia es del orden de 0.01-0.1  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ .

### 6.1.1 Resumen de resultados con Hysplit versión off-line

Los resultados obtenidos con la versión off-line se resumen en la Tabla 6.1, en la que el “Si” (“No”) de la tercera columna indica que la denuncia “fue” (“no fue”) constatada. De un total de 10 casos simulados, 5 de ellos coinciden con las actuaciones del Plan de Vigilancia.

En la cuarta columna de la Tabla 6.1 el “Si” (“No”) indica que la pluma modelada por Hysplit “coincide” (“no coincide”) con la denuncia registrada por el PVA. En ese caso 5 de las 10 simulaciones son coincidentes.

Fecha	Lugar de denuncia	Denuncia Verificada	Coincidencia pluma/constatación
10/09/2009	Puente Internacional	Si	Si
12/10/2009	Puente Internacional	Si	Si
03/11/2009	Ciudad de Gualeguaychú	No	Si
05/11/2009	Balneario Ñandubaysal	No	No
10/11/2009	Ciudad de Gualeguaychú	No	No
29/11/2009	Ciudad de Gualeguaychú	No	Si
30/11/2009	Ciudad de Gualeguaychú/ Puente Internacional	No	No
01/12/2009	Ciudad de Gualeguaychú	No	No
03/12/2009	Pueblo General Belgrano	No	No
15/12/2009	Ciudad de Gualeguaychú	No	Si

Tabla 6.1: Resumen de los resultados obtenidos con el modelo Hysplit off-line y su comparación con las actuaciones registradas por el Plan de Vigilancia.

En la Tabla 6.2 se comparan los resultados de Hysplit versión off-line con los de ARPS-STO-MCLM. El “Si” de la segunda columna indica que la dirección hacia donde se dirige la pluma coincide en ambos modelos mientras que el “No” indica el caso contrario. El “Si” de la cuarta columna indica que la extensión superficial de la pluma simulada por Hysplit coincide con la simulada por ARPS-STO-MCLM, mientras que el “No” indica el caso contrario.

En el caso de la dirección predominante de propagación de la pluma resulta que 9 de los 10 casos son coincidentes. En cuanto a la extensión de la pluma, en 3 de los 10 casos las mismas coinciden con los resultados de ARPS-STO-MCLM. Dado que la versión off-line de Hysplit no permite calcular concentraciones por períodos menores que 12 horas, como se indicó, no se puede comparar estrictamente sus resultados con los de ARPS-STO-MCLM, el cual se ejecutó por el período específico de cada caso que en la mayoría de los casos es menor que aquel.

Fecha	Coincidencia dirección ARPS-STO-MCLM /HYSPLIT	Coincidencia extensión de la pluma ARPS-STO-MCLM/HYSPLIT
10/09/2009	Si	No
12/10/2009	Si	Si
03/11/2009	Si	No
05/11/2009	Si	No
10/11/2009	Si	No
29/11/2009	Si	Si
30/11/2009	Si	No
01/12/2009	Si	Si
03/12/2009	Si	No
15/12/2009	No	No

Tabla 6.2: Resumen de los resultados obtenidos con el modelo Hysplit off-line y su comparación con los resultados de ARPS-STO-MCLM.

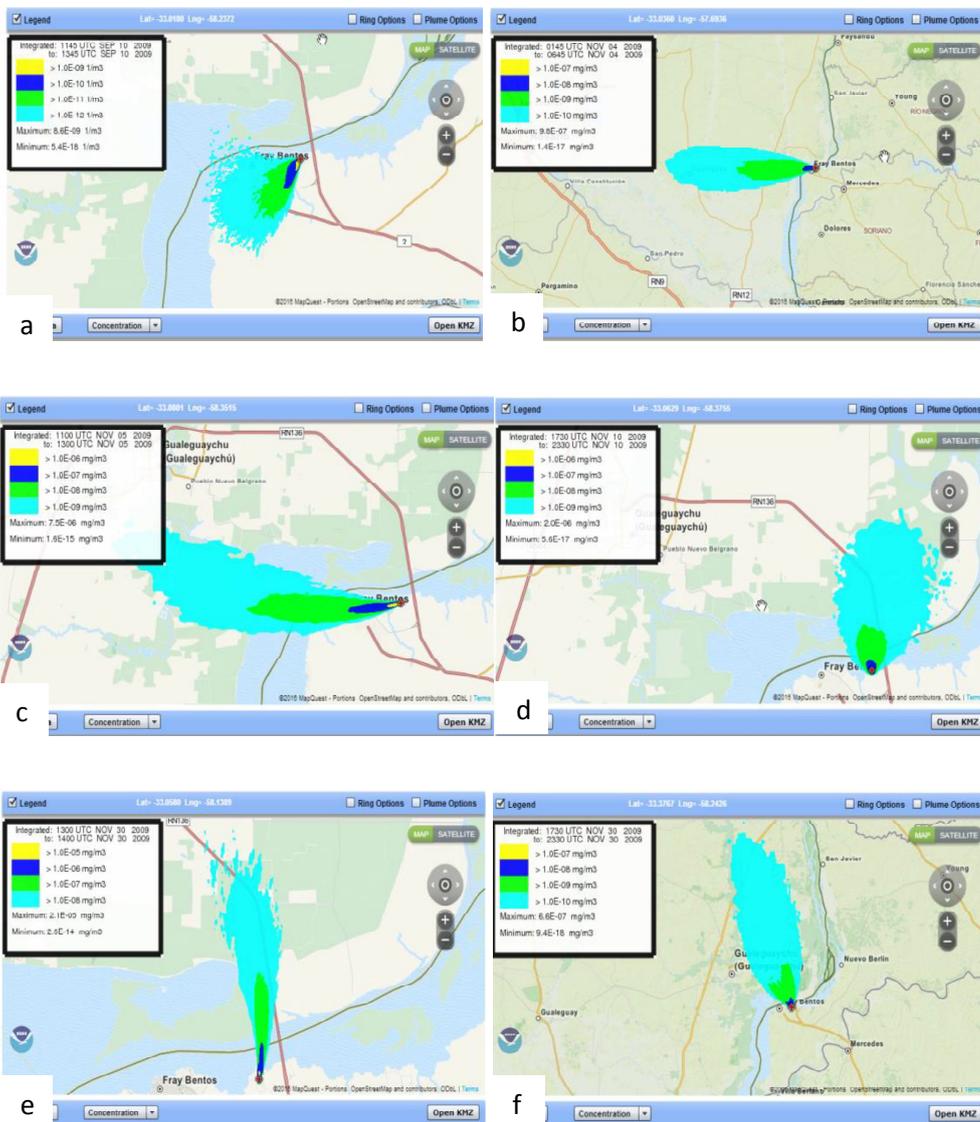
Las concentraciones calculadas con Hysplit son inferiores a las de ARPS-STO-MCLM, a pesar que se emplean las mismas tasas de emisión. Ello es consecuencia de que esta versión de Hysplit calcula la concentración promedio de un período mínimo de 12 horas, que resultará siempre inferior al promedio en períodos menores debido a las variaciones en la dirección e intensidad del viento.

## 6.2 Resultado de la modelación con Hysplit versión on-line

Se realizó entonces la modelación con Hysplit versión on-line de los 7 casos en que los resultados obtenidos con la versión off-line no coincidían con los de ARPS-STO-MCLM, ya que la versión on-line permite modelar periodos de tiempo específicos. Es conveniente recordar que la simulación del día 30 de noviembre de 2009 incluye dos períodos próximos entre sí, uno por la mañana y otro por la tarde, que en el caso de la versión off-line se modelaron como un único caso. Ahora, ambos se modelan por separado de modo que se trata de 8 casos, cuyos resultados se muestran en la Figura 6.2.

La Figura 6.2 (a) muestra para el día 10 de septiembre de 2009 una pluma que viaja en dirección sudoeste y no impacta en el Puente Internacional, en coincidencia con los resultados de ARPS-STO-MCLM. El resultado para el día 03 de noviembre de 2009 se presenta en la Figura 6.2

(b), en la cual se ve que la pluma viaja en dirección oeste, en discrepancia con ARPS-STO-MCLM en que lo hace hacia el norte. En el caso del día 05 de noviembre de 2009 la Figura 6.2 (c) muestra a la pluma hacia el oeste mientras que ARPS-STO-MCLM la ubica hacia el nor-noroeste. En la Figura 6.2 (d) se muestra el resultado del día 10 de noviembre de 2009 en la cual la pluma viaja en dirección norte en coincidencia con ARPS-STO-MCLM. En las Figuras 6.2 (e) y (f) se presentan los resultados del día 30 de noviembre de 2009 por la mañana y por la tarde, respectivamente, los cuales coinciden con los resultados de ARPS-STO-MCLM. En la Figura 6.2 (g) se muestra el resultado del día 03 de diciembre de 2009, y en la Figura 6.2 (h) los del día 15 de diciembre de 2009, y en ambos casos hay coincidencia con los resultados de ARPS-STO-MCLM.



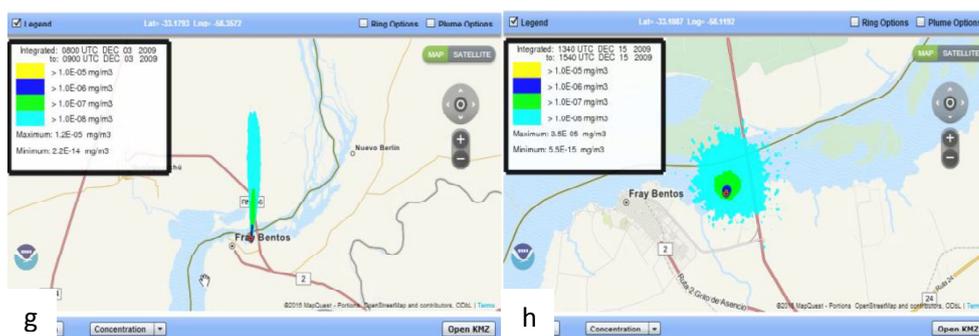


Figura 6.2: Resultados del modelo Hysplit on-line. Concentración de TRS en  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , modelada para los días: a) 10 de septiembre; b) 03 de noviembre; c) 05 de noviembre; d) 10 de noviembre; e) 30 de noviembre (mañana); f) 30 de noviembre (tarde); g) 03 de diciembre; h) 15 de diciembre de 2009.

### 6.2.1 Resumen de resultados con Hysplit versión on-line

En la Tabla 6.3 se resumen los resultados de la modelación con la versión on-line de Hysplit. El “Si” de la segunda columna indica la coincidencia de los resultados de ambas versiones off-line y on-line, mientras que el “No” indica el caso contrario. En la cuarta columna el “Si” (“No”) indica la coincidencia (“o no”) entre los resultados de Hysplit on-line y ARPS-STO-MCLM. Todos los casos la coincidencia se refiere a la dirección de propagación de la pluma.

De un total de 8 simulaciones efectuadas con el modelo Hysplit on-line, en 6 de ellas los resultados coinciden con los obtenidos con ARPS-STO-MCLM. Pero al comparar los resultados de ambas versiones de Hysplit on-line y off-line, de las 8 simulaciones realizadas solamente en 3 de ellas son coincidentes.

Fecha	Coincidencia HYSPLIT off-line / HYSPLIT on-line	Coincidencia ARPS-STO-MCLM / HYSPLIT on-line
10/09/2009	No	Si
03/11/2009	No	No
05/11/2009	No	No
10/11/2009	Si	Si
30/11/2009*	No	Si
30/11/2009**	Si	Si
03/12/2009	Si	Si
15/12/2009	No	Si

Tabla 6.3: Comparación de los resultados obtenidos con el modelo Hysplit on-line con los de la versión off-line y con ARPS-STO-MCLM. (Nota: \*mañana - \*\*tarde)

### **6.3 Conclusión**

Los resultados obtenidos mediante el empleo del modelo HYSPLIT off-line muestran que de un total de 10 eventos, 5 coinciden con la verificación del Plan de Vigilancia, 9 muestran una trayectoria similar a la obtenida con ARPS-STO-MCLM y 3 de ellos son coincidentes en la extensión de la pluma, la cual impacta en el lugar de la denuncia. El resultado de la comparación se considera positivo y los contrastes entre ambos modelos se atribuyen a su diferente formulación física, ya que ARPS-STO-MCLM es un modelo de ecuaciones primitivas y HYSPLIT es un modelo de trayectorias lagrangianas.

Al emplear la versión on-line del modelo Hysplit, de las 8 simulaciones realizadas, 6 de las mismas coinciden en sus resultados con los obtenidos con ARPS-STO-MCLM. Al comparar los resultados obtenidos con el modelo Hysplit en sus versiones on-line y off-line, de las 8 simulaciones realizadas solamente 3 coinciden en ambas versiones. Tal resultado es atribuible al hecho que ambas versiones emplean diferentes fuentes de datos meteorológicos. La versión Hysplit on-line utiliza los pronósticos de NOAA mientras que la versión off-line utiliza los pronósticos del modelo MCLM.

## CAPITULO VII

### RESULTADOS DEL MODELO DE REACCIONES QUIMICAS LES-STO ACOPLADO AL MODELO ARPS-STO-MCLM

En la sección 5.3 se presentó la simulación de tres eventos particulares en los que se calculó la concentración de TRS empleando el modelo ARPS-STO-MCLM (ver Figuras 5.2 a 5.4, respectivamente). Como se indicó en el Capítulo IV, el modelo LES-STO tiene en cuenta a las reacciones químicas que sobrelleva un compuesto durante el proceso de dispersión atmosférica, lo que permite calcular más realísticamente las concentraciones resultantes.

Por lo tanto en este capítulo se emplea el modelo de reacciones químicas LES-STO, acoplado al modelo ARPS-STO-MCLM, para calcular las concentraciones de H<sub>2</sub>S de los mismos 3 eventos (10 de septiembre, 12 de octubre y 30 de noviembre de 2009). El objetivo es comparar resultados con los de la sección 5.3 en que no se tuvo en cuenta a las reacciones químicas. El modelo LES-STO se puede aplicar solamente a sustancias químicas individuales, de modo que no es posible simular al conjunto TRS. Por lo tanto se eligió al H<sub>2</sub>S ya que es el componente mayoritario de TRS (ver sección 2.6.5.1), con el más bajo umbral de detección (ver Tabla 2.5), es decir que contribuye en mayor medida al índice de olor.

Las Figuras 5.2d) a 5.4d) presentan la concentración resultante de H<sub>2</sub>S (modelo ARPS-STO-MCLM, sin reacciones químicas), las que se comparan con los resultados del modelo LES-STO de las Figuras 7.1 a 7.3, respectivamente. Las simulaciones con LES-ST, son de sólo 1 hora de duración. Este acortamiento del periodo de cálculo se debe a que el modelo LES-STO requiere, por su complejidad, mayor tiempo de ejecución y una gran capacidad de almacenamiento de datos del procesador, lo cual atenta contra una modelación por períodos prolongados. De cualquier manera, la simulación de 1 hora resulta suficiente dada la corta distancia entre emisor y receptor.

## 7.1 Resultado de las modelaciones

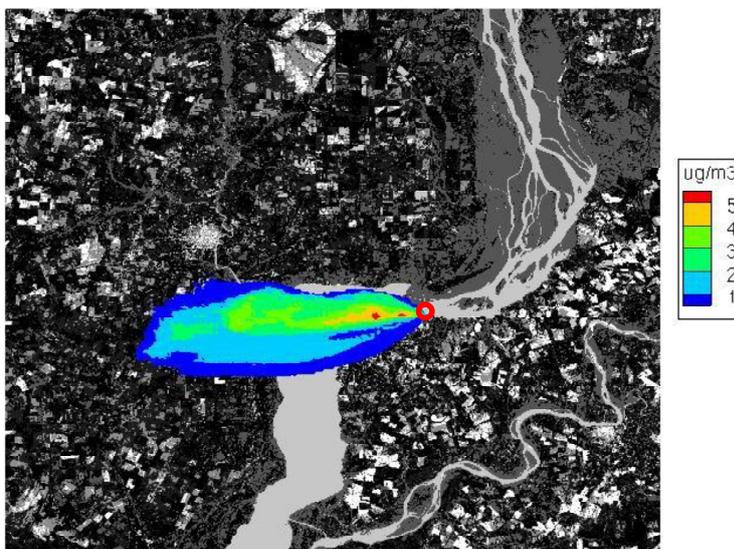


Figura 7.1: Concentración de H<sub>2</sub>S en  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  calculada para el 10 de septiembre de 2009 de 10:00 a 11:00 hs. El círculo rojo indica el lugar donde se registró la actuación.

En la Figura 7.1 se muestran los resultados correspondientes al día 10 de septiembre de 2009 para el periodo de 10:00 a 11:00 hs. La concentración de H<sub>2</sub>S calculada en el punto más cercano al de la denuncia es menor que 1  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , al igual que en la Figura 5.2d) obtenida con ARPS-STO-MCLM. En este caso la pluma modelada no afecta directamente la zona del Puente Internacional, aunque se ubica muy cercana a la misma. (Ver Tabla 7.1)

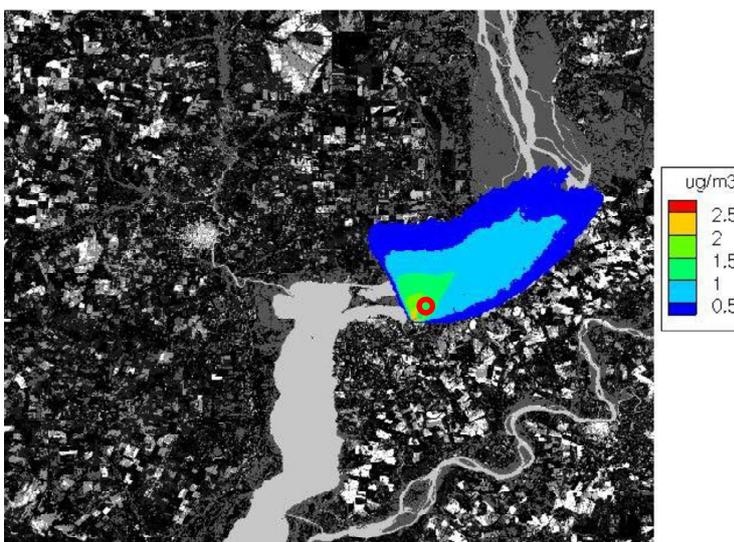


Figura 7.2: Concentración de H<sub>2</sub>S en  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  calculada para el 12 de octubre de 2009 de 09:00 a 10:00 hs. El círculo rojo indica el lugar donde se registró la actuación.

En la Figura 7.2 se muestra el resultado de la modelación para el día 12 de octubre de 2009 en el periodo de 09:00 a 10:00 hs. La concentración de H<sub>2</sub>S calculada para el lugar de la

denuncia (Puente Internacional) está en el rango de 1.5 a 2  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , la cual supera el umbral de detección de olor establecido para esta sustancia (Tabla 2.5). La Figura 5.3d) muestra una concentración entre 20 – 25  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , que es 10 veces mayor que la calculada en este caso. (Ver Tabla 7.1)

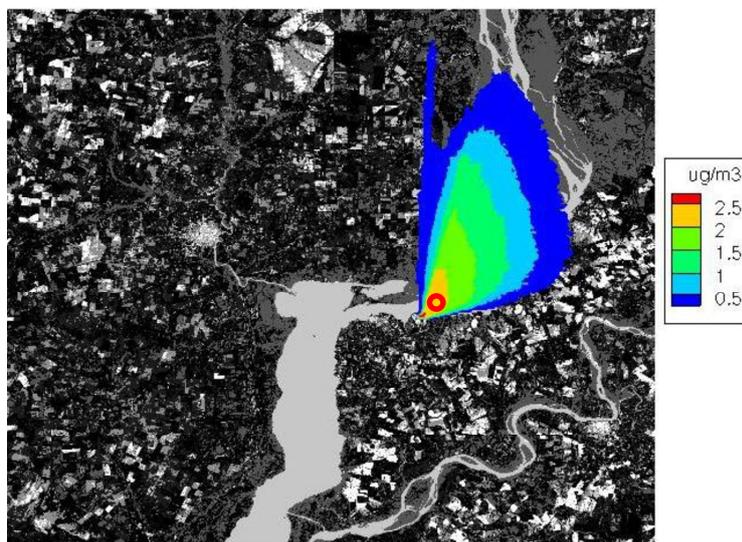


Figura 7.3: Concentración de  $\text{H}_2\text{S}$   $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , calculada para el 30 de noviembre de 2009 de 16:00 a 17:00 hs. El círculo rojo indica el lugar donde se registró la actuación.

La Figura 7.3 muestra los resultados de la modelación realizada para el día 30 de noviembre de 2009 en el periodo de 16:00 a 17:00 hs. La concentración calculada para la zona del Puente Internacional es del orden de 2  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , la cual supera el valor del umbral de detección de olor establecido para el  $\text{H}_2\text{S}$  (Tabla 2.5). Comparando este valor con el de la Figura 5.4d) ( $>20 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), resulta ser 10 veces menor.

Fecha	ARPS-STO-MCLM	LES-STO
10 sep 2009	1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$	$<1 \mu\text{g}/\text{m}^3$
12 oct 2009	20-25 $\mu\text{g}/\text{m}^3$	1.5 - 2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$
30 nov 2009	20-25 $\mu\text{g}/\text{m}^3$	2-2.5 $\mu\text{g}/\text{m}^3$

Tabla 7.1: Comparación de las concentraciones calculadas con el modelo ARPS-STO-MCLM original y su versión acoplada al LES-STO.

En la Tabla 7.1 se comparan las concentraciones obtenidas con el modelo ARPS-STO-MCLM original y el modelo LES-STO. Claramente, las concentraciones de  $\text{H}_2\text{S}$  calculadas con el modelo de reacciones químicas LES-STO son menores que las obtenidas con ARPS-STO-MCLM. Este último simula solamente el transporte y la difusión de una sustancia genérica, mientras que LES-STO tiene en cuenta, además de aquello, la naturaleza química de la especie que se emite, su interacción con los componentes atmosféricos y su consecuente degradación, por lo cual

resulta razonable que el modelo químico calcule concentraciones menores. En consecuencia, los resultados obtenidos con el modelo químico acoplado se consideran más apropiados para el cálculo de la concentración.

## 7.2 Conclusión

El modelo LES-STO, acoplado al modelo ARPS-STO-MCLM que simula el transporte y la difusión atmosférica, permite calcular las concentraciones del compuesto de interés teniendo en cuenta las reacciones químicas que tienen lugar en el seno de la atmósfera una vez que el compuesto entra en contacto con ella. De este modo, las concentraciones calculadas se consideran más representativas de los valores reales, aunque, lamentablemente, no se dispone de mediciones para poder comparar los resultados obtenidos.

A pesar que las concentraciones de H<sub>2</sub>S obtenidas con el modelo LES-STO son menores, los valores obtenidos para los puntos de las denuncias superan el umbral de detección de olor en dos de los tres casos, mientras que en el tercer caso la concentración resulta en un valor marginal a aquel umbral.

La versión LES-STO acoplada a ARPS-STO-MCLM requiere de un prolongado tiempo de ejecución en un procesador común para modelar periodos cortos de tiempo, a fin de eliminar la posibilidad de que modelo desarrolle inestabilidades computacionales que atenten contra la calidad del resultado.

La disponibilidad de un servidor de multiprocesadores permitiría modelar situaciones de varias horas de duración, empleando un mayor número de partículas para representar más realísticamente el proceso de difusión atmosférica, y así lograr el resultado en un tiempo relativamente corto. De este modo, el sistema de modelado desarrollado se podría utilizar en casos de diagnóstico y pronóstico de situaciones reales e incluso emergencias.

## CAPITULO VIII

### DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Se desarrolla una nueva herramienta para el estudio de la dispersión atmosférica de contaminantes en la región del río Uruguay en inmediaciones de la localidad Gualeguaychú, Provincia de Entre Ríos, empleando modelos de circulación atmosférica de capa límite y de dispersión de contaminantes. La herramienta se valida mediante la simulación de una serie de eventos de contaminación regional por los malos olores producidos por las emisiones de compuestos TRS desde la fábrica de pasta de celulosa de la localidad de Fray Bentos, República Oriental del Uruguay, ya que son los únicos casos en que hay información de libre acceso sobre la contaminación de aquel origen. Además, el modelo de circulación atmosférica se valida con datos observados de una torre meteorológica instalada en la zona.

Se adapta para su funcionamiento en la región de estudio el modelo ARPS (Advanced Regional Prediction System de la Universidad de Oklahoma), y se lo acopla al modelo de pronóstico meteorológico operativo MCLM (Modelo de Capa Límite en Mesoescala del Servicio Meteorológico Nacional). Esta herramienta, denominada ARPS-STO-MCLM, utiliza las condiciones iniciales y de contorno que proporciona el modelo de pronóstico MCLM y con ello alimenta al modelo ARPS que es el que realiza los cálculos de transporte y difusión atmosférica de TRS.

Se estudian 11 eventos que tuvieron lugar en 10 días del periodo de septiembre a diciembre 2009, en los cuales se registraron denuncias por mal olor que dieron lugar a la intervención del Plan de Vigilancia Ambiental del municipio local. Se emplea entonces el modelo ARPS-STO-MCLM para simular la dispersión del compuesto TRS emitido desde la fábrica de pasta celulosa durante el período de tiempo correspondiente a cada evento.

Previo a la simulación se realiza la validación del pronóstico de viento del modelo MCLM comparándolo con los datos medidos en una torre meteorológica operativa en el lugar, con

resultado satisfactorio. El error promedio de la velocidad del viento es 2.2 m/s y de la dirección del viento es 49 grados, aunque el error efectivo de este último sería menor ya que la incertidumbre en la medición es de 1 sector (rosa de vientos de 16 sectores), es decir 22.5 grados. A pesar que el modelo en general subestima a la velocidad del viento, ello no se considera un obstáculo ya que si bien las plumas modeladas viajarían una distancia relativamente menor, lo harían en una dirección muy próxima a la real.

Dado que la información disponible sobre la ocurrencia de los eventos se limita a la constatación o no de la presencia del mal olor, el resultado de la simulación consiste en determinar la coincidencia o no de la posición de la pluma contaminante simulada, con el lugar en donde se registró la denuncia.

La Tabla 8.1 resume los resultados obtenidos en la simulación de los 11 eventos de mal olor. Desde el punto de vista de la validación del modelado numérico, los casos exitosos son aquéllos que están en la diagonal principal de la tabla, es decir que la presencia (ausencia) de la pluma en el lugar coincide con la verificación positiva (negativa) de la presencia de la sustancia maloliente.

		Posición pluma en el lugar	
		Si	No
Presencia de mal olor en el lugar	Si	1	1
	No	1	8

Tabla 8.1: Distribución del número de casos según la coincidencia de la posición de la pluma y la constatación de la presencia de las sustancias malolientes.

Nueve de los 11 eventos modelados resultan exitosos, es decir un 82% de los mismos, lo cual constituye un muy buen resultado. En uno de los dos eventos en que la simulación no resulta exitosa (casilla superior derecha), se verificó la presencia del mal olor pero la pluma modelada se ubicó marginalmente distante del lugar. El desacuerdo en este caso se puede atribuir a la incertidumbre propia de los modelos numéricos. En el segundo caso (casilla inferior izquierda), la pluma se ubicó sobre el lugar de la denuncia pero la presencia del mal olor no fue verificada. Este caso fue el más largo modelado ya que se prolongó durante 7 horas y la pluma se comportó en

forma oscilante durante ese período, lo cual puede ser el motivo de la discrepancia ya que se ignora el momento preciso en que se realizó la verificación.

Las concentraciones de TRS calculadas son variables, pero en los puntos de las denuncias las concentraciones máximas superan el valor de  $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . En aquellos casos en que el personal de Plan de Vigilancia efectivamente constató la presencia del mal olor, el valor del índice de olor en esos lugares es mayor que 10 (la sustancia es detectable cuando el índice es mayor que 1), lo que indica que el olor no sólo es perceptible sino que resulta molesto y objetable.

Además, se emplea otro reconocido modelo de cálculo de dispersión atmosférica, HYSPLIT (Hybrid Single Particle Lagrangian Integrated Trajectory Model, desarrollado por la agencia NOAA de Estados Unidos), con el fin de verificar los resultados obtenidos con el modelo ARPS-STO-MCLM, en cuanto a la disposición espacial de las plumas contaminantes. La versión on-line utiliza los pronósticos meteorológicos de la agencia NOAA mientras que la versión off-line permite emplear otra fuente de pronósticos, en este caso del modelo MCLM.

La comparación de resultados obtenidos mediante el empleo del modelo HYSPLIT off-line muestra que de un total de 10 eventos, 5 coinciden con la verificación del Plan de Vigilancia, 9 muestran una trayectoria similar a la obtenida con ARPS-STO-MCLM y en 3 de ellos la pluma modelada impacta en el lugar de la denuncia. De las 8 simulaciones con la versión on-line, 6 coinciden en sus resultados con los de ARPS-STO-MCLM. El resultado de la comparación se considera satisfactorio y las diferencias observadas entre ambos modelos se atribuyen, en parte, a su diferente formulación física ya que ARPS-STO-MCLM es un modelo con ecuaciones primitivas y HYSPLIT es un modelo de trayectorias lagrangianas. Además, en el caso de la versión on-line se agrega como fuente de discrepancia el hecho que utiliza una fuente diferente de pronóstico meteorológico.

Para calcular la concentración de sulfuro de hidrógeno, principal componente de los compuestos TRS, se incorpora el modelo de reacciones químicas LES-STO al modelo ARPS-STO-MCLM. De este modo se consigue modelar realísticamente el transporte y difusión atmosférica de una sustancia, en función de las condiciones meteorológicas del momento en la región, teniendo en cuenta las reacciones químicas que sobrelleva la sustancia durante ese proceso.

Se simulan tres eventos en particular en que la pluma simulada se ubica sobre el lugar de la denuncia (dos de ellas con verificación positiva, la otra negativa, por parte del Plan de Vigilancia).

Las concentraciones de H<sub>2</sub>S obtenidas con el modelo de reacciones químicas son aproximadamente diez veces menores que las obtenidas con ARPS-STO-MCLM en su versión original. Ello se debe a la transformación que sufre la sustancia al reaccionar con los componentes atmosféricos durante el proceso de dispersión. A pesar de la menor concentración, el índice de olor supera el umbral de detección en dos casos y resulta marginal en el tercero.

## **CAPITULO IX**

### **CONCLUSIONES**

Se desarrolla una nueva herramienta de modelado numérico para ser utilizada en estudios de dispersión atmosférica de contaminantes a escala regional sobre zonas rivereñas de fuerte contraste térmico horizontal, la que se adapta exitosamente para su uso en la región del río Uruguay en inmediaciones de la localidad Gualeguaychú, Provincia de Entre Ríos.

La misma combina el empleo de dos reconocidos modelos, uno de pronóstico operativo de capa límite atmosférica y el otro de transporte y difusión de contaminantes, a los que incorpora un modelo de reacciones químicas. De este modo es posible modelar realísticamente la dispersión atmosférica de una sustancia, en función de las condiciones meteorológicas del momento en la región, teniendo en cuenta las reacciones químicas que sobrelleva la sustancia durante ese proceso.

La validación de la herramienta mediante la simulación de once eventos de mal olor en la región atribuidos a las emisiones de la fábrica de pasta celulosa en la zona, resulta exitosa. En primer lugar, la validación del pronóstico de viento del modelo de capa límite con las observaciones de una torre meteorológica en el lugar muestra errores pequeños, lo que da confiabilidad a la modelación de esos eventos. Nueve de los once eventos de mal olor simulados resultan exitosos ya que coincide la posición de la pluma modelada en relación al lugar de la denuncia, con el resultado de la constatación por parte de funcionarios del municipio local.

Se emplea también otro reconocido modelo de dispersión atmosférica para simular los mismos eventos, con el objeto de realizar una validación independiente, y se obtiene coincidencia de resultados en más de la mitad de los casos.

La herramienta de modelado desarrollada se puede utilizar tanto en estudios de diagnóstico de situaciones, empleando información meteorológica histórica, como en la previsión

de situaciones conflictivas e incluso de emergencia, empleando en este caso pronósticos meteorológicos a corto plazo que la misma herramienta puede generar.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Aguirre C. A. 2005 *Dispersión et Mélange Atmosphérique Euléro-lagrangien de Particules Fluides Réactives. Application à des cas simples et complexe.* Tesis de doctorado. Université Claude Bernard Lyon 1, France, 115-2005, 1-323.
- Aguirre C; Brizuela A; Vinkovic, I; Simoëns, S, 2006 “Modelo acoplado eulero-lagrangiano de simulación de la dispersión atmosférica de especies químicamente reactivas en la capa límite. *Revista de Mecánica Computacional Vol XXV*, pp. 185-205.
- Aguirre C.A, Aceñalozza P. G., Brizuela A. B., Sedano C. 2014. Simulación computacional de la dispersión de partículas sólidas en la atmósfera utilizando un modelo acoplado. *Mecánica Computacional Vol XXXIII*, págs. 3431-3453.
- Baulch D. L., Cox R. A., Crutzen P. J., Hampson R. F., Kerr F. A., Troe J. and Watson R. P. 1982. “Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry: Supplement 1”. CODATA Task Group on Chemical Kinetics. *Journal Physics Chemistry Ref. Data*, 11, 327 – 496.
- Berri G.J. and M.N. Nuñez, 1993, Transformed shoreline-following horizontal coordinates in a mesoscale model: a sea-land breeze case study, *Journal of Applied Meteorology*, 5, 918-928.
- Berri, G.J. y L. Sraibman, 2005, Circulación atmosférica en capas bajas obtenida con un modelo de capa límite en mesoescala forzado por condiciones medias regionales. Análisis exploratorio sobre el Río de La Plata, IX Congreso Argentino de Meteorología, Buenos Aires, Octubre de 2005, 8 pág
- Berri, G.J., 2006, La Plata River estuary low-level wind climatology obtained with a mesoscale boundary layer model forced with local observations, XIV Congresso Brasileiro de Meteorologia, Florianópolis, Brasil, Noviembre 2006, 6 pág.
- Berri, G.J., 2009, Improving low-level wind field forecast over coastal regions with a mesoscale boundary layer model forced with local observations and regional operative forecasts, examples of lagrangian trajectories, 30th NATO/SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Application, San Francisco, Estados Unidos, 18 al 22 mayo de 2009, 4 pág.
- Berri G.J., L. Sraibman, R. Tanco and G. Bertossa 2010. Low-level wind field climatology over the La Plata River region obtained with a mesoscale atmospheric boundary layer model forced with local weather observations, *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 49, 6, 1293-1305, doi: 10.1175/2010JAMC2370.1.
- Berri G.J., J. Galli Nuin, L. Sraibman and G. Bertossa, 2012, Verification of a synthesized method for the calculation of low-level climatological wind fields using a mesoscale boundary-layer model, *Boundary Layer Meteorology*, 142, 2, 329-337.
- Berri G., C. Aguirre, A. Brizuela y E. Orcellet, 2012b, Simulación numérica del viento en niveles bajos con dos modelos de diferente formulación. Comparación de resultados de un caso de estudio, 8 pag., XI Congreso Argentino de Meteorología-, 28 de mayo al 1 de junio 2012, Mendoza, Argentina.
- Camillioni I., 2008 “Análisis de impacto ambiental sobre el componente aire de la planta de celulosa de Fray Bentos-Uruguay, en el área de Gualeguaychú – Informe de Medición de Calidad de Aire 04/09/2007-13/01/2008” Departamento de Ciencias de la Atmósfera y los Océanos, Universidad de Buenos Aires. Disponible en: [http://www.estrucplan.com.ar/Boletines/0677/Informe\\_Camilloni\\_UBA.pdf](http://www.estrucplan.com.ar/Boletines/0677/Informe_Camilloni_UBA.pdf).

- Case J.L., Manobianco J., Lane J.E., Immer C.D., and Merceret F.J. (2004) An Objective Technique for Verifying Sea Breezes in High-Resolution Numerical Weather Prediction Models, *Wea. Forecasting*, 19, 690–705 pp.
- Colby F.P. Jr. (2004) Simulation of the New England Sea Breeze: The effect of Grid Spacing, *Wea. Forecasting*, 19, 277–285 pp.
- Colucci P., F. Jaber, P. Givi and S. Pope. Filtered Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent Reacting Flow. *Journal of Physics Fluids*. 10, pp 499. 1998.
- Curl R. Dispersed Phase Mixing: I. Theory and effects in Simple Reactors. *A. I. Ch. E. Journal*. 9 (2), pp 157-181, 1963.
- Deardorff J. W. Stratocumulus-capped mixed layer derived from a three dimensional model. *Journal of Boundary Layer Meteorology*. 18, pp 495-527, 1980.
- Dilsook V., 2004. "The Source of gaseous TRS emission during the effluent irrigation process at Ngodwana mill". Sappi Technology Centre. Report No. M2004/0273E (22/10/2004). Sappi Management Service-Technology Centre. P.O. Box 6, Pretoria, 0087, South Africa.
- Dopazo C. Probability Density Function Approach for a Turbulent Axisymmetric Heated Jet Centerline Evolution. *Journal of Physics Fluids*. 18 (4), pp 397-404, 1975.
- Dopazo C. Relaxation of Initial Probability Density Function in the Turbulent Convection of Scalar Field. *Journal of Physics Fluids*. 22, pp 20-30. 1979.
- Ecometrix 2006 "Estudio de Impacto Acumulativo Plantas de Celulosa en Uruguay" – Anexo C "Evaluación de la Calidad de Aire". <http://www.upm.com/uy/planta/medio-ambiente/estudios/estudios-independientes/Documents/Cumulative%20Impact%20Study%20-%20Uruguay%20Pulp%20Mills%20-%20Oct2006%20-%20UPM%20Fray%20Bentos.pdf>
- Environmental Protection Agency (EPA) 1979. "Kraft Pulp Mill Control of TRS Emission from Existing Mills", EEUU. Disponible en: <http://infohouse.p2ric.org/ref/18/17439.pdf>.
- Environmental Protection Agency (EPA) 1990. Reference Guide to Odor Thresholds for Hazardous Air Pollutants Listed in the Clean Air Act Amendments of 1990.
- Fackrell J. E. and A. G. Robins. Concentration Fluctuation and Fluxes in Plumes from Point Sources in a Turbulent Boundary Layers. *Journal of Fluid Mechanics*. 117, pp 1 – 26, 1982.
- Fernandez Diez P, 2010. Ingeniería Energética, Cap. 26 "Recuperación de productos y calor en la industria papelera" Pag. 759-802. Disponible en: <http://files.pfernandezdiez.es/CentralesTermicas/PDFs/26CT.pdf>.
- Gao F. and E. O'Brien. A Large-Eddy Simulation schema for Trubulent reacting flow. *Journal of Physics Fluids*. A5, pp 1282, 1993.
- Germano M., U. Piomelli, P. Moin and W. H. Cabot. A Dynamic Subgrid-Scale Eddy Viscosity Model. *Journal of Physics Fluids*. A 3, pp 1760-1765, 1991.
- Gicquel L. and P. Givi. Velocity filtered Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent flow. *Journal of Physics Fluids*. 14 (3), pp 1196-1213. 2002.
- Grosjean D. 1984. "Gas-Phase Chemistry of Organo-Sulfur Compounds". Conference on Gas-Liquid Chemistry of Natural Waters, Brookhaven National Laboratory, Upton, NY.

- Haper, F; 1989. "Sulfur release during de pyrolysis of Kraft black liquor", Tesis de Doctorado. The Institute of Paper Science and Technology, Atlanta Georgia,.
- Hoang O., Chen J., Huang L. y Buglass R., 1996. "Sulphate reducing bacteria". –crit. Rev. Environ. Sci. Technol. 26, pp 155-187.
- Jaberi F., P. Colucci, S. James, P. Givi and S. Pope. Filtered Mass Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent Reacting Flow. Journal of Fluid Mechanics. 401, pp 85. 1999.
- Janicka J., W. Kolbe and W. Kollemann. Closure of the Transport Equation for the Probability Density Function of Scalar Fields. Journal of Non-equilib. Thermodyn. 4, pp 47-66, 1978.
- Klemp J. B. and R. B. Wilhelmson. The Simulation of three-dimensional convective storm dynamics. Journal Atmospheric Sciences. 35, pp 78-107, 1978.
- Langevin P. On the Theory of Brownian Motion. C. R. Academie des Sciences de Paris. 146, pp 530-533. 1908.
- Leonard A. Energy Cascade in Large Eddy Simulation of Turbulent Fluid Flow. Adv. Geophysics. 18 A, pp 237-248, 1974.
- Liang V, 2008 "Reduced sulphur compounds in ambient air And in emissions from wastewater clarifiers At a kraft pulp mill" Master of Applied Science, Department of Chemical Engineering and Applied Chemistry, University of Toronto. Disponible en: [https://tspace.library.utoronto.ca/bitstream/1807/10434/1/Liang\\_Chien\\_Chi\\_Victor\\_MASc\\_200803\\_thesis.pdf](https://tspace.library.utoronto.ca/bitstream/1807/10434/1/Liang_Chien_Chi_Victor_MASc_200803_thesis.pdf).
- Lilly D. K. The Representation of Small-Scale Turbulence in Numerical Simulation Experiments. In Proc. IBM Scientific Computing Symposium on Environmental Sciences, IBM Form. N 320-1951, pp 195-210, 1967.
- Michelot C. Développement d'un Modèle Stochastique Lagrangien. Application à la Dispersion et à la Chimie de l'Atmosphère. Thèse de Doctorat. Ecole Centrale de Lyon. France, pp 1-180, 1996.
- Monitoreo Ambiental de la Operación – COMISION DE SEGUIMIENTO de BOTNIA Fray Bentos 2007. Dirección nacional de Medio Ambiente (DINAMA), Uruguay, Disponible en: [http://www.mvotma.gub.uy/images/anex\\_8-2\\_monitoreo-op-botnia\\_071019.pdf](http://www.mvotma.gub.uy/images/anex_8-2_monitoreo-op-botnia_071019.pdf)
- Olalde, A., G. J. Berri y R. Guerrero, 1991, Influencia de la brisa de mar y tierra sobre la circulación del agua superficial de la bahía de Samboronbon, Actas VI Congreso Argentino de Meteorología, Buenos Aires.
- Olson, J. S., J. A. Watts, And L. J. Allison. 1985. Major world ecosystem complexes ranked by carbon in live vegetation: a database. Carbon dioxide Information Center, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, NDP-017: Tennessee.
- Organización Mundial de la Salud. 2000. Informe sobre la salud en el mundo 2000 - Mejorar el desempeño de los sistemas de salud. Disponible en: [http://www.who.int/whr/2000/en/whr00\\_es.pdf?ua=1](http://www.who.int/whr/2000/en/whr00_es.pdf?ua=1)
- Pérez A. M., A. Calle Y J. L. Casanova. 2003. Cálculo de la Temperatura Superficial a partir de Datos Landsat TM. Teledetección y Desarrollo Regional. X Congreso de Teledetección. Cáceres, España, pp: 95-98.
- Pope S. B. The Probability Approach to the Modelling of Turbulent Reacting Flow. Combust Flame. 27, pp 299, 1976.
- Pope S. B. PDF Methods for Turbulent Reactive Flow. Prog. Energy Combustion Science. 11, pp 119-192. 1985.

- Radonjic Z., Telenta D., Chambers J., Kirkaldy J., Janic Z., 2005. "Coupling NMM Mesoscale weather forecasting model with CALMET/CALPUFF, regulatory air dispersion model". A&WMA 98th. Annual Conference and Exhibition. Minneapolis Minnesota.
- Rava E.; 2008 "Management of Hydrogen Sulphide Generation at a Kraft Paper Mill", Master of Science, Faculty of Engineering, Built Environment and Information Technology, University of Pretoria.
- Smagorinsky J. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I. The Basic Experiments. *Mon. Weather Rev.* 91, pp 99-164, 1963.
- Seinfeld, J. H., 1986. "Atmospheric chemistry and physics of air pollution" Jhon Wiley and Sons Editors.
- Schumann U. Subgrid Scale Model for Finite Difference Simulation of Turbulent Flow in Plane Channels and Annuli. *Journal of Computational Physics.* 18, pp 376-404, 1975.
- Sraibman, L. And G.J.Berri, 2009 "Low level wind forecast over La Plata River region with a mesoscale boundary layer model forced by regional operational forecasts", *Boundary Layer Meteorology*, 130, 3, 407-422, doi 10.1007/s10546-009-9350-1.
- Steen, B. 1984. "Hydrogen sulfide formation in a lime kiln at a kraft mill". *Svensk Papperstidning* 3, R14-R17.
- Vanderstraeten P. , Wauters E., Muylle E., Verduyn G., Vanderheyden E., Y Vansant E., 1988. "A Continuous Quantitative Detection Method for Total Mercaptans, Organic Sulphides, H<sub>2</sub>S, and CS<sub>2</sub> for Odouriferous Emissions". *JAPCA*, Volume 38, Issue 10, pp. 1271-1274, DOI: 10.1080/08940630.1988.10466474. <http://dx.doi.org/10.1080/08940630.1988.10466474>.
- Van Driest E. R. 1956. On Turbulent Flow Near Wall. *Journal of Aero Science.* 23, pp 1007-1011.
- Wiener N. 1923. Differential Space. *Journal of Math. Phys.* 58, pp 131-174.
- Xue M., K. Droegemeier And V. Wong 2000. The Advanced Regional Prediction System (ARPS-STO). A Multi-Scale Nonhydrostatic Atmospheric Simulation and Prediction Model. Part I: Model Dynamics and Verification. *Meteorology Atmospheric Physics.* 75, pp 161-193.
- Zhang Y., Chen Y., Schroeder T.H. and Kodama K. (2005) Numerical Simulations of Sea-Breeze Circulations over Northwest Hawaii, *Wea. Forecasting*, 20, 827-846 pp.

## ANEXO 1

Considerando  $k = 5,3 \cdot 10^{-12}$  ( $\text{cm}^3 \cdot \text{molécula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ) según Baulch et al. (1982).

Para expresar estas concentraciones en ppm:

$$[\text{OH}^-] \text{ ppm} = \frac{c_i}{c} \cdot 10^6$$

Dónde  $c_i$  es  $10^6$  ( $\text{molécula} \cdot \text{cm}^{-3}$ ),  $c = \frac{p}{RT}$  ( $\text{mol} \cdot \text{cm}^{-3}$ ) del aire,  $P$  es la presión atmosférica en (Pa),  $R$  es la constante de los gases ideales para aire seco  $8,314$  ( $\text{Pa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ) es la constante de los gases para el aire seco y  $T$  es la temperatura del aire en ( $^{\circ}\text{K}$ ).

Para el caso de una atmósfera con  $T=25$  ( $^{\circ}\text{C}$ ) y  $p=1013,3$  (HPa), se tiene:

$$c = \frac{p}{RT} = \frac{101330}{8,314 \cdot 298} = 40,896 \text{ (mol} \cdot \text{m}^{-3}\text{)}$$

$$c_i = \frac{10^6}{6,02 \cdot 10^{23}} = 1,661 \cdot 10^{-18} \text{ (mol} \cdot \text{cm}^{-3}\text{)} = 1,661 \cdot 10^{-12} \text{ (mol} \cdot \text{m}^{-3}\text{)}.$$

$$\text{Por tanto } [\text{OH}^-] \text{ (ppm)} = \frac{1,661 \cdot 10^{-12}}{40,896} \cdot 10^6 = 4,061 \cdot 10^{-8} \text{ (ppm)}$$

La constante de reacción  $k$  también debe expresarse en ( $\text{ppm} \cdot \text{s}^{-1}$ ). Siguiendo a Seinfeld (1986):

$$k \text{ (ppm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)} = \frac{4,4}{60} \cdot 10^{17} \left( \frac{p}{T} \right) k \text{ (cm}^3 \cdot \text{molécula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$$

con  $p$  en (atm) y  $T$  en ( $^{\circ}\text{K}$ ).

Para nuestro caso con  $p = 101330$  (HPa)  $\equiv 1$  (atm) y  $T = 298$  ( $^{\circ}\text{K}$ ):

$$k = \frac{4,4}{60} \cdot 10^{17} \left( \frac{1}{298} \right) 5,3 \cdot 10^{-12} = 130,425 \text{ (ppm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$$

LISTA DE FIGURAS		PÁG.
<b>CAPITULO 2</b>		
2.1	Esquema simplificado de proceso de producción de pasta celulosa. (Fernández Diez, 2010).	14
2.2	Esquema simplificado de proceso de recuperación. (Fernández Diez, 2010).	15
2.3	Vista general de la zona de influencia.	21
2.4	Vista General de la planta de pasta celulosa. Fuente: Google Earth.	21
2.5	Distancia a los principales puntos de interés. Fuente: Google Earth	22
2.6	Diagrama de la planta, donde se ilustra la ubicación de la chimenea principal. Monitoreo Ambiental de la Operación- Comisión de Seguimiento- Fray Bentos, 19 de octubre de 2007. Botnia.	22
2.7	Imagen de la chimenea principal de la planta. Fuente: Google Earth.	23
2.8	Diagrama de Chimeneas instaladas dentro del envoltente de hormigón. Monitoreo Ambiental de la Operación- Comisión de Seguimiento- Fray Bentos, 19 de octubre de 2007. Botnia.	23
2.9	Vista del sistema de tratamiento de efluentes líquidos de la fábrica de pasta celulosa. Fuente Google Earth.	24
<b>CAPITULO 3</b>		
3.1	Mapa de Olores – Zonificación por ubicación.	30
<b>CAPITULO 4</b>		
4.1	Esquema de cálculo de la velocidad de salida de los gases desde la boca de la chimenea.	42
4.2	Diagrama de dispersión de los vientos pronosticados versus los observados (a) dirección del viento en grados y, (b) velocidad del viento en m/s.	49
4.3	Clasificación no supervisada. Resolución espacial de 30 m.	50
4.4	Modelo Digital de Elevación (MDE) en metros. Resolución espacial 1 km.	51
4.5	a) Tipos de cobertura vegetal. Resolución Espacial 1 km. b) Parámetro de rugosidad de suelo en metros. Resolución espacial 1 km.	51
4.6	a) Índice de Vegetación Normalizado (NDVI). Resolución espacial 1 km. b) Temperatura de -superficie en °K. Resolución espacial 1 km.	52
<b>CAPITULO 5</b>		
5.1	Concentración de TRS en $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , correspondientes a los 11 casos modelados. El horario de cada figura indica el periodo de modelado. El círculo rojo indica el área donde se localizó la denuncia.	62
5.2	10 de septiembre de 2009. Concentración de: a) dimetil sulfuro, b) dimetil disulfuro, c) metil mercaptano, d) sulfuro de hidrógeno, expresada en $\mu\text{g}/\text{m}^3$ y e) índice de detección de olor.	63
5.3	12 de octubre de 2009. Concentración de: a) dimetil sulfuro, b) dimetil disulfuro, c) metil mercaptano, d) sulfuro de hidrógeno, expresada en $\mu\text{g}/\text{m}^3$ y e) índice de detección de olor.	64
5.4	30 de noviembre de 2009. Concentración de: a) dimetil sulfuro, b) dimetil disulfuro, c) metil mercaptano, d) sulfuro de hidrógeno, expresada en $\mu\text{g}/\text{m}^3$ y e) índice de detección de olor.	65
5.5	Índice de detección de olor para el día 30 de noviembre de 2009, 15:20 hs.	66
<b>CAPITULO 6</b>		
6.1	Resultados del modelo Hysplit off-line. Concentración de TRS en $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , modelada para los días: a) 10 de septiembre; b) 12 de octubre, c) 03 de noviembre; d) 05 de noviembre; e) 10 de noviembre; f) 29 de noviembre; g) 30 de noviembre; h) 01 de diciembre; i) 03 de diciembre; j) 15 de diciembre de 2009.	70
6.2	Resultados del modelo Hysplit on-line. Concentración de TRS en $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , modelada para los días: a) 10 de septiembre; b) 03 de noviembre; c) 05 de noviembre; d) 10 de noviembre; e) 30 de noviembre (mañana); f) 30 de noviembre (tarde); g) 03 de diciembre; h) 15 de diciembre de 2009.	73
<b>CAPITULO 7</b>		
7.1	Concentración de H <sub>2</sub> S en $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , modelada para el 10 de septiembre de 2009 de 10:00 a 11:00 hs. El círculo rojo indica el lugar donde se registró la actuación.	77
7.2	Concentración de H <sub>2</sub> S en $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , modelada para el 12 de octubre de 2009 de 09:00 a 10:00 hs. El círculo rojo indica el lugar donde se registró la actuación.	77
7.3	Concentración de H <sub>2</sub> S $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , modelada para el 30 de noviembre de 2009 de 16:00 a 17:00 hs. El círculo rojo indica el lugar donde se registró la actuación.	78

<b>LISTA DE TABLAS</b>		<b>PÁG.</b>
<b>CAPITULO 2</b>		
2.1	Componentes de los TRS y descripción de los olores característicos. (Arellano, 2009).	17
2.2	Efectos de la exposición de los seres humanos al sulfuro de hidrógeno por inhalación. (EPA, 1979).	17
2.3	Umbral de detección, reconocimiento y valor guía de Sulfuro de Hidrógeno. (OMS, 2000).	17
2.4	Umbral de olor para metil mercaptanos, dimetil sulfuro, dimetil disulfuro. (EPA, 1979).	18
2.5	Umbral promedio de detección de olor obtenidos del Informe de Ecometrix, (2006).	18
2.6	Índice de detección de olor según Anexo C del informe Ecometrix, (2006).	19
2.7	Características físicas de las emisiones y propiedades físicas de los gases de salida (según Tabla C2.1-1 del informe Ecometrix, 2006).	23
2.8	Características de la fuente de emisión difusa.	24
2.9	Tasas de emisión en kg/Adt (tonelada de pulpa producida secada al aire) de los diferentes compuestos para las fuentes puntuales, en condiciones de operación normal. (Tabla C2.3-1 de informe Ecometrix, 2006).	25
2.10	Fracción de sustancias componentes de los TRS (Tabla C 2.3-5 del anexo C del informe Ecometrix, 2006).	26
2.11	Tasa de emisión promedio anual (g/s) en condiciones de operación normal calculada en base a la información de las Tablas C2.3-1, A8.7-9 del informe Ecometrix (2006), para las fuentes puntuales.	27
2.12	Tasa de emisión promedio anual (g/s) en condiciones de operación normal, calculada en base a la información de las Tablas C2.3-1, A8.7-9 del informe Ecometrix (2006), para las fuentes difusas.	27
<b>CAPITULO 3</b>		
3.1	Resumen de denuncias registradas en la Localidad de Gualaguaychú por malos olores. Según registro del Plan de Vigilancia del Río Uruguay – Municipalidad de Gualaguaychú.	30
<b>CAPITULO 4</b>		
4.1	Promedio de errores en la dirección del viento (grados) y en la velocidad (m/s)	48
4.2	Tipos de vegetación según Olson World Ecosystem Classes y parámetro de rugosidad (Olson et al.1985).	52
<b>CAPITULO 5</b>		
5.1	Fecha, hora y localización de los eventos modelados.	59
5.2	Resumen de resultados para los 11 casos evaluados.	60
<b>CAPITULO 6</b>		
6.1	Resumen de los resultados obtenidos con el modelo Hysplit off-line y su comparación con las actuaciones registradas por el Plan de Vigilancia.	71
6.2	Resumen de los resultados obtenidos con el modelo Hysplit off-line y su comparación con los resultados de ARPS-STO.	72
6.3	Comparación de los resultados obtenidos con el modelo Hysplit on-line con el modelo off-line y ARPS-STO-MCLM. (Nota: *mañana - **tarde).	74
<b>CAPITULO 7</b>		
7.1	Tabla comparativa de concentraciones entre el modelo LES-STO y ARPS-STO-MCLM.	78
<b>CAPITULO 8</b>		
8.1	Distribución del número de casos según la coincidencia de la posición de la pluma y la constatación de la presencia de las sustancias malolientes	81

## **PUBLICACIONES CON REFERATO**

- ORCELLET Emiliana E., BERRI Guillermo J., AGUIRRE Cesar A., MÜLLER Gabriela V., “Atmospheric dispersion study of TRS compounds emitted from a pulp mill plant in coastal regions of the Uruguay River Argentina”. Aerosol and Air Quality Research. Taiwan: TAIWAN ASSOC AEROSOL RES-TAAR. 2016. ISSN 1680-8584. DOI: 10.4209/aaqr.2015.02.0112. Aceptado. En prensa.
- AGUIRRE Cesar A., BERRI Guillermo J., BRIZUELA Armando, ORCELLET Emiliana E., “External Weather Data Assimilation to Simulate Wind and Temperature Fields in the Region of Gualeguaychú, Argentina. Journal of Mechanic Engineering and Automation. New York: David Publishing Company. 2014 vol.4 n°41. p887 - 899. ISSN 2159- 5275. EISSN 2159-5283.
- AGUIRRE Cesar A., BERRI Guillermo J., BRIZUELA Armando, ORCELLET Emiliana E “Asimilación de datos meteorológicos externos como condiciones de borde para simular el campo de viento y temperatura en capas bajas en la región de Gualeguaychú, Argentina”. Revista de Mecánica Computacional, Asociación de Mecánica Computacional. 2013 vol.32 n°33. p 2707 - 2726. ISSN 1666-6070.
- AGUIRRE Cesar A., BERRI Guillermo J., BRIZUELA Armando, KEMERER Alejandra, TOFFOLI Betiana, ORCELLET Emiliana E “Influencia de las condiciones de borde para modelos de simulación del campo de viento y dispersión aérea de sustancias químicas. Revista Científica Agropecuaria, Facultad de Ciencias Agropecuarias UNER. 2013 vol. n°17. p17 - 28. ISSN 0329-3602.
- NOIR Jorge O., ORCELLET Emiliana E., “Fibra Óptica: su uso para la optimización de sistemas de tratamiento de aguas residuales mediante el principio de reflexión interna total”. Ingeniería Sanitaria y Ambiental, Ed. N° 100 septiembre/diciembre 2008. ISSN 0328.2937.

## **TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS CENTIFICOS**

- NOIR Jorge O., ORCELLET Emiliana E., “Fibra Óptica: su utilización para la optimización en sistemas de tratamiento de aguas residuales mediante el principio de reflexión interna total” XIX Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Asociación de Universidades del Grupo Montevideo, Ciudad del Este, República del Paraguay, octubre de 2011.
- NOIR Jorge O., ORCELLET Emiliana E., “Fibra Óptica: su utilización para la optimización en sistemas de tratamiento de aguas residuales mediante el principio de reflexión interna total” 4° Jornadas de Difusión de Proyectos de Investigación, Extensión y Actividades

Académicas de la Universidad Nacional de Entre Ríos, Oro Verde, noviembre 2011. (1 pág)

- AGUIRRE Cesar A., BRIZUELA Armando, ORCELLET Emiliana E, BERRI Guillermo J., “Un modelo de simulación de dispersión atmosférica aplicado al caso de la relocalización del basurero a cielo abierto de la ciudad de Paraná” XI Congreso Argentino de Meteorología, Mendoza 28 de Mayo al 01 de Junio de 2012 (17 pág).
- BERRI Guillermo J., AGUIRRE Cesar A., BRIZUELA Armando, ORCELLET Emiliana E, “Simulación numérica del viento en niveles bajos con dos modelos de diferente formulación. Comparación de resultados de un caso de estudio”. XI Congreso Argentino de Meteorología, Mendoza 28 de Mayo al 01 de Junio de 2012 (8 pág).
- AGUIRRE Cesar A., BERRI Guillermo J., BRIZUELA Armando, KEMERER Alejandra, TOFFOLI Betiana, ORCELLET Emiliana E “Influencia de las condiciones de borde para modelos de simulación del campo de viento y dispersión aérea de sustancias químicas” VIII Reunión De Comunicaciones Científicas y Técnicas VI Reunión de Extensión Oro Verde, Paraná, Entre Ríos 11 de junio de 2013 (11 pág).
- AGUIRRE Cesar A., BERRI Guillermo J., BRIZUELA Armando, ORCELLET Emiliana E, “Asimilación de datos meteorológicos externos como condiciones de borde para simular el campo de viento y temperatura en capas bajas en la región de Gualeguaychú, Argentina”. Congreso de Mecánica Computacional ENIEF 2013. Mendoza. 19 al 22 de noviembre de 2013 (19 pág).
- ORCELLET Emiliana, BERRI Guillermo J., AGUIRRE Cesar A., MÜLLER Gabriela V. Simulación de plumas de dispersión de sustancias TRS malolientes sobre regiones costeras de geometría compleja empleando un modelo de dispersión atmosférica acoplado a un modelo de pronóstico de capa límite. XII Congreso Argentino de Meteorología, Mar del Plata, 25-29 de mayo 2015 (1 pág).
- ORCELLET Emiliana, MÜLLER Gabriela V., BERRI Guillermo J., AGUIRRE Cesar A. Estudio de dispersión de compuestos de azufre total reducido en las inmediaciones de la ciudad de Gualeguaychú. Jornadas interdisciplinarias de Salud Ambiental. Facultad de Ciencias de la Salud, UNER, Entre Ríos. 26 y 27 de agosto de 2015. (1 pág)
- MÜLLER Gabriela V., ORCELLET Emiliana, BERRI Guillermo J., AGUIRRE Cesar A. Estudio de dispersión atmosférica de sustancias malolientes en zonas ribereñas del Río Uruguay. 1° Feria Regional de Salud, FCS/UNER Concepción del Uruguay, 10-11 de abril de 2015. (1 pág)
- ORCELLET Emiliana, MÜLLER Gabriela V., BERRI Guillermo J., AGUIRRE Cesar A. Estudio de dispersión atmosférica de sustancias malolientes en las inmediaciones de la ciudad de Gualeguaychu. Argentina. SETAC LATIN AMERICA 11th Biennial Meeting,

Society of Environmental and Chemistry Toxicology. Buenos Aires, 7 al 10 de septiembre de 2015. (1 pág)

- MÜLLER Gabriela V., AGUIRRE Cesar A., BERRI Guillermo J., ORCELLET Emiliana, Estudio de dispersión atmosférica de sustancias TRS para el día 12 de octubre de 2009. 6° Jornadas de Difusión de proyectos de investigación, extensión y actividades académicas de la UNER, INEXAS. Concordia, 12 de noviembre de 2015. (1 pág)