

TESIS DOCTORAL

Emisiones difusas:

Medidas experimentales y modelización

aplicadas a instalaciones de tratamiento de

aguas residuales

Héctor Espinós Morató 2015

Director: Dr. Vicente Caselles Miralles

Doctorado en Física del Medio Ambiente Departamento de Física de la Tierra y Termodinámica Facultad de Física D. Vicente Caselles Miralles, Catedrático de Física Aplicada, adscrito al Departamento de Física de la Tierra y Termodinámica de la Facultad de Física de la Universidad de Valencia,

CERTIFICA

Que la Tesis titulada **"Emisiones difusas: medidas** experimentales y modelización aplicadas a instalaciones de tratamiento de aguas residuales" ha sido realizada bajo dirección del Departamento de Física de la Tierra y Termodinámica de la Universidad de Valencia, por Héctor Espinós Morató, y constituye su Tesis Doctoral para optar al grado de Doctor en Física.

Y para que así conste, en cumplimiento de la legislación vigente firmo el presente certificado en Burjassot, a 1 de septiembre de 2015.

Fdo.: Vicente Caselles Miralles

Rosa, eres la razón de que me levante cada día, me esfuerce por el presente y por el mañana, eres mi principal motivación. Como en todos mis logros, en este has estado presente.

Aleix, posiblemente en este momento no entiendas mis palabras, pero para cuando seas capaz, quiero que te des cuenta de lo que significas para mí. Muchas gracias hijo.

A vosotros os dedico esta tesis

"El final de toda exploración será llegar al punto de partida y conocer el lugar por primera vez"

Thomas S. Eliot (1888-1965)

"Las ciencias no tratan de explicar, incluso apenas tratan de interpretar, construyen modelos principalmente. Por modelo, se entiende una construcción matemática que, con la adición de ciertas interpretaciones verbales, describe los fenómenos observados. La justificación de tal construcción matemática es sólo y precisamente que se espera que funcione."

John von Neumann (1903-1957)

Después de varios años, y no menos dificultades, llegado a este punto en el que muchos desearían encontrarse, no puedo más que sentir cierto nerviosismo y vértigo.

Escribir una tesis y convertirme en doctor, es algo que he deseado hacer desde hace mucho tiempo, pero muchas veces, la confianza en uno mismo, y otras, las circunstancias de la vida tanto laborales como personales, han hecho que haya tenido que posponer este momento demasiadas veces.

Parece que al fin lo he conseguido, y llega el momento, no menos importante, de repasar y agradecer a todos los que han facilitado este logro.

En primer lugar quisiera agradecer a todas las instituciones y personas que de algún u otro modo han hecho posible la realización de esta tesis. El trabajo de investigación se ha llevado a cabo bajo convenio con la Entidad Pública de Saneamiento de Aguas Residuales de la Comunidad Valenciana (EPSAR) y la Fundación Centro de Estudios Ambientales del Mediterráneo (CEAM). Sin la financiación de ambas instituciones no hubiera sido posible su elaboración.

Por supuesto, una tesis doctoral no se hace sin un director, y yo me considero muy afortunado de haber tenido al Dr. Vicente Caselles Miralles como director. Creo que Vicente ha sido en todo momento eso, un director de tesis, y creo, aunque parezca raro, que es lo más bonito que se puede decir de un director de tesis. Vicente me ha guiado en este largo proceso, enseñándome todo lo necesario, dándome la suficiente independencia para que abordara el trabajo desde la perspectiva que yo quisiera. En los momentos duros o de desesperación (y he tenido unos cuántos), cuando lo único que quería es dejar el tema de la tesis, él ha sabido hacerme entender que era el comienzo de mi "carrera de fondo personal". Ha soportado mis preguntas más absurdas y mis fallos más tontos con una paciencia encomiable. dedicándome una gran parte de su ocupado tiempo (y eso que ya sabía de qué pie cojeaba).

Mi relación con él, trasciende de la simple relación profesoralumno, la cual agradezco y admiro. Desde estas líneas, muchas gracias Vicente. No sería justo no mencionar a las personas que durante muchos años han estado trabajando conmigo en el CEAM, en el IPL o en POLIBIENESTAR. En este punto, sería casi imposible no extenderse demasiado en nombrarlos a todos, por lo que me veo obligado a dejarme a muchos de ellos sin nombrar. Espero que no me lo tengan en cuenta.

Agradecer a mis exjefes (Enrique Mantilla, Millán Millán, Víctor Reglero y Jordi Garcés) por la confianza que en su día depositaron en mi persona. Ellos han sido los primeros en "darme el primer empujón" de mi carrera de fondo.

A mi compi Tatiana. Muchas dificultades, incluido un ERE, hemos compartido juntos. A Nacho, José Luis, Caterina, Jaime, María Jesús. Tanto en lo personal, como en lo científico, ha sido una gozada poder compartir con vosotros mis dudas, mis desconocimientos y mi trabajo. A ellos intento tomarles como modelo.

Existen 2 compañeros a los que desearía expresarle mi especial agradecimiento, ya no por las jornadas "laborales" que unen parte de mi vida con las suyas, sino por esos numerosos momentos compartidos. El primero de ellos es Javier Navarro, con él he compartido viajes, conferencias e interminables simulaciones y modelizaciones. A Pere Blay, que aunque en estos momentos lo tengo lejos, siempre ha sabido decirme la palabra adecuada en el momento adecuado. Su calma ha sido como una balsa de aceite, teniendo siempre una palabra de aliento para mí.

Por otro lado, querría hacer especial mención a dos personas más. A Mónica, que aunque ahora la tengo un poco "abandonada" sabe que en el fondo sigue siendo una personita muy importante para mí. A mi "amigo lobo". Contigo he aprendido y sigo aprendiendo muchísimo, incluso a aullar. Por todo lo compartido, por las "aventuras" vividas y las que quedan por vivir. Por ese viaje a Bilbao, por esa campaña en Puertollano, por tantas cosas... y sobre todo por tu inestimable ayuda en el trabajo que voy a presentar.

No quiero dejarme a todas aquellas personas queridas e importantes que por circunstancias de la vida, no pueden celebrar este momento conmigo, espero algún día poder compartirlo con ellos.

A mis familiares y amigos cercanos, a los que muchas veces he descuidado, quiero brindarles también este trabajo. Ellos son los que me quieren de verdad, sin condiciones, y se merecen más que el simple recuerdo en esta memoria. Por último no olvido a las personas que más quiero, mis padres José Luis y Mavi, aunque para mi sean siempre "papá" y "mamá", y por supuesto a mi hermano Jorge y mi cuñada Valeria, que seguro que al leer estas líneas se sienten orgullosos de mí. Ellos son en definitiva, los que me han hecho ser la persona que soy, los primeros que aparecieron y los últimos en marchar.

Por último agradecer a mi otra familia, la política, por los ánimos que durante todo el transcurso me han dado.

Y por último, a mi pequeña familia (Rosa, mi mujer, y Aleix, mi hijo), con vosotros tengo lo más bonito que me ha podido regalar la vida. Gracias por sufrir conmigo, por animarme en los malos momentos y por alegraros y vivir mis logros. Por vosotros este esfuerzo ha valido la pena.

RESUMEN

Las emisiones difusas son difíciles de cuantificar y caracterizar. Es precisamente por esta razón, por la que es complicado establecer una legislación donde haya metodologías inequívocas de medida y en donde se estipulen los correspondientes límites de emisión. En la actualidad, hay numerosos tipos de instalaciones cuyas emisiones a la atmósfera se hacen de manera difusa (cementeras, azulejeras, granjas de ganado y purines, EDAR,....).

La actividad rutinaria en una EDAR, conlleva habitualmente la liberación al ambiente de sustancias, en la mayoría de ocasiones, causantes de malos olores y fuente potencial de molestias en caso de existencia de núcleos habitados próximos. La naturaleza de estas sustancias es muy variada, pudiendo actuar en ocasiones en concentraciones muy bajas, con una incidencia no lineal y efectos sinérgicos muy variados.

Dentro de un proyecto financiado por la Entidad Pública de Saneamiento de Aguas Residuales de la Comunidad Valenciana se ha realizado la presente tesis, y cuyos objetivos se han orientado a la caracterización del impacto por olores y la evaluación del nivel de concentraciones en el entorno de varias EDAR. Para ello, se ha contemplado una aproximación metodológica (complementaria a las ya existentes) basada en la realización de medidas experimentales en campo, medidas en laboratorio y modelización numérica. Se eligieron el sulfuro de hidrógeno y el amoniaco como sustancias representantes de aquellas que son origen de malos olores, centrándose el programa experimental sobre estas especies químicas. En las campañas en campo se han combinado variables procedentes de una torre meteorológica, medidas automáticas de concentración y medidas acumuladas mediante dosímetros pasivos distribuidos en varios puntos del entorno. Dichos estudios han dado lugar por un lado, a la evaluación, seguimiento y gestión de niveles de concentración de determinadas sustancias en este tipo de instalaciones. Por otro lado se ha caracterizado la eficacia y rendimiento de ciertas MTD's utilizadas en la actualidad, y finalmente se ha descrito un procedimiento para la estimación de tasas de emisión. Especialmente relevante es este último resultado, puesto que hasta la fecha, no se disponía de valores cuantitativos recogidos de forma sistemática y que pudiesen ser discriminados por especies químicas.

ÍNDICE

CAPÍTULO I: INTRODUCCIÓN

I.1	MOTIVACIÓN	1
I.2	MARCO DE TRABAJO	3
I.3	OBJETIVOS	3
I.4	ESTRUCTURA DE LA MEMORIA	4

CAPÍTULO II: METODOLOGÍA

II.1 INTRODUCCIÓN	7
II.2 MEDIDA DEL H ₂ S Y NH ₃ : ESTADO DEL ARTE	
II.3 DESCRIPCIÓN DE LAS ZONAS DE ESTUDIO	10
II.3 INSTRUMENTACIÓN Y MÉTODO EXPERIMENTAL	
UTILIZADO	13
II.3.1 MEDIDAS METEOROLÓGICAS	13
II.3.2 MEDIDAS EN INMISIÓN	14
Monitor automático	15
Dosímetros pasivos	16
II.3.3 MEDIDAS EN CAPTACIÓN FORZADA	17
II.3.4 MODELO DE DISPERSIÓN	19
II.4 DATOS Y PERIODO ANALIZADOS	20
II.5 RECAPITULACIÓN	22

CAPÍTULO III: MEDIDAS EXPERIMENTALES I: VALIDACIÓN DE LOS DOSÍMETROS DE H₂S Y NH₃ EN LABORATORIO

III.1	PREPA	RACIÓN, TOMA DE MUESTRAS Y ANÁLISIS	.23
	III.1.1	PREPARACIÓN	.23
	III.1.2	MUESTREO	.23
	III.1.3	ANÁLISIS	.24
	III.1.4	CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN	.25
III.2	VALIDA	CIÓN EXPERIMENTAL	.26

	III.2.1 DESCRIPCIÓN DEL ENTORNO EXPERIMENTAL	. 27
	III.2.2 INFLUENCIA DE VARIABLES	28
	Tiempo de exposición	29
	Concentración	29
	Medio de impregnación	30
	Modo de impregnación	30
III.3 III.4	CÁLCULO DEL LÍMITE DE DETECCIÓN DEL MÉTODO EVALUACIÓN DE LOS DOSÍMETROS DE H ₂ S III.4.1 COMPARACIÓN MEDIOS DE COLECCIÓN: MALLAS DE ACERO. VS. FILTROS DE ACETATO DE CELULOSA	30 32 32
	III.4.2 TIEMPOS DE EXPOSICIÓN Y CONCENTRACIONES	32
	III.4.3 TIEMPO DE TOMA DE MUESTRAS	33
	III.4.4 DIFERENTES PROCESOS DE IMPREGNACIÓN DISTINTAS CONCENTRACIONES	A 33
	III.4.5 CÁLCULO DE SOLUBILIDAD	34
	III.4.6 ESTIMACIÓN DE LA INCERTIDUMBRE DE H ₂ S	. 35
III.5 III.6	EVALUACIÓN DE LOS DOSÍMETROS DE NH ₃ RECAPITULACIÓN	39 44

CAPÍTULO IV: MEDIDAS EXPERIMENTALES II: PUESTA A PUNTO DE LOS FILTROS PARA LAS MEDIDAS DE CAMPO MEDIANTE CAPTACIÓN FORZADA

IV.1	INTRO	DUCCIÓN	49
IV.2	VARIA	BLES EXPERIMENTALES	49
	IV.2.1	VARIABLES EXPERIMENTALES ESTUDIADAS	49
		Caudal de muestreo	49
		Tiempo de muestreo	. 50
	IV.2.2	CÁLCULO DEL LDMF	. 50
IV.3	EVALUA	ACIÓN DE LA INCERTIDUMBRE	51
	IV.3.1	ANÁLISIS MULTIVARIANTE	. 54
IV.4	RECAF	PITULACIÓN	. 55

CAPÍTULO V: MODELO DE SIMULACIÓN DE EMISIONES DIFUSAS

57
58
59
59
61
01
61
63
65
67
69
70
70
70
LOS
71
71
72
72
DAD
73
76

CAPÍTULO VI: RESULTADOS R1. MEDIDAS EXPERIMENTALES: EVALUACIÓN Y CONTROL DE LOS NIVELES DE INMISIÓN DE H₂S Y NH₃ EN LA EDAR DE LA CONCA DEL CARRAIXET

83	VI-R1.1 MEDIDAS SISTEMÁTICAS
83	VI-R1.1.1 EDAR DE LA CONCA DEL CARRAIXET
83	Disposición de los puntos de medida

	Medidas de H ₂ S. Evolución Temporal	.85
	Evolución espacial	. 89
	Medidas de NH ₃ . Evolución Temporal	. 90
	Evolución espacial	. 93
VI-R1.2 RECAP	PITULACIÓN	. 94

R2. MEDIDAS CON SISTEMAS DE CAPTACIÓN ACTIVA: EVALUACIÓN DEL RENDIMIENTO Y EFICIENCIA DE LOS SISTEMAS DE DESODORIZACIÓN

VI-R2.1 INTRODUCCIÓN	97
VI-R2.2 MÉTODO DE MEDIDA	98
VI-R2.2.1 PUNTOS DE MUESTREO	98
VI-R2.2.2 CONDICIONES GENERALES	98
VI-R2.3 RESULTADOS DE LA EDAR DE LA VILA JOIOSA	99
VI-R2.4 CONCLUSIONES	. 102
VI-R2.5 RECAPITULACIÓN DE RESULTADOS	. 106

R3. MODELIZACIÓN NUMÉRICA CASO EJEMPLO: ESTIMACIÓN INDIRECTA DE TASAS DE EMISIÓN PROMEDIO DE LA EDAR DE RINCÓN DE LEÓN

VI-R3.1 INTRODUCCIÓN	109
VI-R3.2 ESTIMACIÓN DE EMISIONES PROMEDIO	109
VI-R3.2.1 EDAR DE RINCÓN DE LEÓN	111
VI-R3.3 RECAPITULACIÓN	116

R4. EXPERIENCIAS EN LABORATORIO ESTUDIO DE NUEVAS ESPECIES QUÍMICAS: EXPERIENCIAS PRELIMINARES

VI-R4.1 PLANIFICACIÓN Y ALCANCE DE LOS TRABAJOS	121
VI-R4.2 ANÁLISIS DE AMINAS	122
VI.R4.2.1 DESARROLLO Y VALIDACIÓN DEL	
PROCEDIMIENTO ANALÍTICO	122
VI.R4.2.2 ANÁLISIS DE LAS MUESTRAS	123
VI-R4.3 ANÁLISIS DE TIOLES	124
VI.R4.3.1 DESARROLLO Y VALIDACIÓN DEL	
PROCEDIMIENTO ANALÍTICO	124

VI.R4.3.2 ANÁLISIS DE LAS MUESTRAS	125
VI-R4.4 MEDIDAS EN PLANTA	125
VI-R4.5 ANÁLISIS DE LAS MUESTRAS: RESULTADOS	129
Tioles	129
Aminas	129
VI-R4.6 RECAPITULACIÓN	130

CAPÍTULO VII. ACTUACIONES COMPLEMENTARIAS I: DISEÑO Y CONSTRUCCIÓN DE UN PROTOTIPO DE CAPTADOR ACTIVO

VII.1 ANTECEDENTES	
VII.2 CARACTERÍSTICAS DEL SISTEMA	132
VII.3 DISEÑO DEL CAPTADOR	134
VII.3.1 DISEÑO NEUMÁTICO	135
VII.3.2 DISEÑO ELECTRÓNICO	136
VII.3.3 DISEÑO MECÁNICO	142
VII.4 MODOS DE CAPTACIÓN	142
Modo Aire	142
Modo Purga	144
Modo Muestra	144

CAPÍTULO VIII. ACTUACIONES COMPLEMENTARIAS II: APLICACIÓN DIODISP. UNA NUEVA HERRAMIENTA DE DISPERSIÓN DE EFLUENTES GASEOSOS

VIII.1 ESTADO VIII.1.1	DEL ARTE Y ANTECEDENTES JUSTIFICACIÓN	147 148
VIII.2 ESTIMA	CIÓN DE LAS EMISIONES	
VIII.3 MODELC	OS DE EMISIÓN	154
VIII.4 APLICAC	CIÓN DIODISP	
VIII.4.1	ELECCIÓN DEL SOFTWARE DE	
	PROGRAMACIÓN	161
VIII.4.2	CARACTERÍSTICAS GENERALES	162
VIII.5 RECAPIT	ſULACIÓN	

CAPÍTU	LO IX: CONCLUSIONES GENERALES	169
CAPÍTU	LO X: BIBLIOGRAFÍA	175
GLOSAR	IO Y LISTA DE ACRÓNIMOS	181
ANEXOS	S	191
ANEXO A:	Expresiones utilizadas para el cálculo de estadísticos en los trabajos de modelización.	191
ANEXO B:	Cálculo de las diferentes expresiones para el modelo de emisión propuesto	147
ANEXO C:	Esquemas e imágenes del equipo de	201
		201
ARTÍCU	LOS PUBLICADOS	.207

LISTADO DE FIGURAS Y TABLAS

CAPÍTULO I: INTRODUCCIÓN

Figura I.1	Esquema del proceso de estudio de las emisiones
_	difusas6

CAPÍTULO II: METODOLOGÍA

Figura II.1	Localización de los emplazamientos	11
Figura II.2	Esquema y especificaciones de los sensores	14
Figura II.3	Detalle de los dosímetros	17
Figura II.4	Sistema de captación activa	17
Figura II.5	Foto y esquema del portafiltros de muestreo	18
Figura II.6	Disponibilidad de datos para las torres	
	meteorológicas	21

CAPÍTULO III: MEDIDAS EXPERIMENTALES I

Figura III.1	Cúpula de teflón y montaje de los equipos
	utilizados para realizar los experimentos28
Tabla III.1	Planteamiento experimental de la experiencia para
	la cuantificación de la incertidumbre del método35
Tabla III.2	Resultados de la experiencia para los diferentes
	rangos de concentración y el tiempo de exposición36
Tabla III.3	Resultados de la experiencia para los diferentes
	rangos de concentración y el tiempo de exposición37
Tabla III.4	Resultado del análisis multivariante
Tabla III.5	Detalle de los experimentos realizados en
	el laboratorio correspondientes a la primera
	experiencia41
Tabla III.6	Detalle de los experimentos realizados en el
	laboratorio correspondientes a la segunda
	experiencia42
Tabla III.7	Detalle de los experimentos realizados en el
	laboratorio correspondientes a la tercera
	experiencia43
Tabla III.8	Detalle de los experimentos realizados en el
	laboratorio correspondientes a la séptima
	experiencia44

CAPÍTULO IV: MEDIDAS EXPERIMENTALES II

Figura IV.1	LDM de H ₂ S expresado en función del tiempo y del	
	caudal	51
Figura IV.2	Gráficos de dispersión para concentraciones de 10 y	
	500 ppb	53
Tabla IV.1	Resultados del cálculo del LDM	50

Tabla IV.2	Resultados	de la experiencia	53
Tabla IV.3	Resultados (del análisis multivariante	54

CAPÍTULO V: MODELO DE SIMULACIÓN DE EMISIONES DIFUSAS

Tabla V.1	Promedios de la capa de mezcla para los primeros seis meses del año 2003
Tabla V.2	Criterios de estabilidad según el gradiente térmico
Tabla V.3	Criterios de estabilidad en función de la desviación típica de la dirección horizontal del viento

CAPÍTULO VI: RESULTADOS R1. MEDIDAS EXPERIMENTALES

Figura VI-R1.1 Detalle de los puntos de muestreo	. 84
Figura VI-R1.2 Rosa de vientos de la Conca del Carraixet	. 85
Figura VI-R1.3 Evolución temporal de los niveles de	
concentración promedio para el periodo total	
de H ₂ S	. 86
Figura VI-R1.4 Evolución temporal anual de la concentración	
promedio de H_2S	. 87
Figura VI-R1.5 Evolución espacial de la concentración promedio	
de H_2S en cada punto (periodo 2008-2010)	
para la EDAR de la Conca del Carraixet	. 89
Figura VI-R1.6 Niveles de concentración promedio para el	
periodo total de NH ₃	. 90
Figura VI-R1.7 Niveles de concentración de NH ₃ anuales	. 93
Figura VI-R1.8 Concentración promedio de NH ₃	. 93
Tabla VI-R1.1 Datos brutos de concentración promedio de H ₂ S	88
Tabla VI-R1.2 Datos brutos de concentración promedio de NH ₃	91

R2. MEDIDAS CON SISTEMAS DE CAPTACIÓN ACTIVA

Figura VI-R2.1	Sistema de desodorización y toma de muestra .	100
Figura VI-R2.2	Valores de concentración de H ₂ S y NH ₃ y	
	rendimiento de las torres de lavado	102
Tabla VI-R2.1	Límites de detección para los distintos gases	
	en los diferentes puntos de muestreo	. 99
Tabla VI-R2.2	Concentraciones en los distintos puntos de	
	muestreo de la torre de desodorización	101
Tabla VI-R2.3	Resumen de las concentraciones y rendimientos	
	de H_2S y NH_3	103

R3. MODELIZACIÓN NUMÉRICA

Figura VI-R3.1	Resultados de concentraciones promedios112
Figura VI-R3.2	Rosa de vientos113
Figura VI-R3.3	Resultados de concentraciones máximas113
Figura VI-R3.4	Resultados en función de la distancia para las
	medidas experimentales y los resultados simulados
	de los diferentes modelos de emisión114
Tabla VI-R3.1	Valores promedio, máximo, mínimo y error de
	diversos parámetros ambientales y
	concentración de sulfhídrico114
Tabla VI-R3.2	Resultados obtenidos para los cuatro modelos
	propuestos114
Tabla VI-R3.3	Resultados de diversos estadísticos para la
	medida de la bondad del ajuste medidas-modelo 115
Tabla VI-R3.4	Tasas de emisión promedio115

R4. EXPERIENCIAS EN LABORATORIO

Figura VI-R4.1	Esquema general de la reacción del OPA-NAC	
	con una amina primaria	. 122
Tabla VI.R4.1	Límites de detección para los principales	
	compuestos de la familia de las aminas	123
Tabla VI-R4.2	Límites de detección para los principales	
	compuestos de la familia de los tioles	. 125
Tabla VI-R4.3	Puntos de muestreo de los borboteadores y los	
	filtros	. 126
Tabla VI-R4.4	Tipos de soporte utilizados para el muestreo	. 128
Tabla VI-R4.5	Datos del muestreo en P1: Línea de fangos	. 128

CAPÍTULO VII: ACTUACIONES COMPLEMENTARIAS I

32
35
37
38
39
40
41
41
42
43

Figura VII.11	Detalle del funcionamiento del display una vez se ha activado el ciclo de medida en	
	el modo aire	143
Figura VII.12	Camino neumático recorrido por la muestra	
	en modo purga	144
Figura VII.13	Camino neumático recorrido por la muestra	
	en modo muestra	145

CAPÍTULO VIII: ACTUACIONES COMPLEMENTARIAS II

Figura VIII.1	Distribución espacial del campo de concentraciones
	simuladas para dos focos (circular y puntual) 150
Figura VIII.2	Concentraciones simuladas para dos focos
	superpuestos150
Figura VIII.3	Contribuciones porcentuales a los niveles de
	concentración simuladas para dos focos
	superpuestos 151
Tabla VIII.1	Descripción de los parámetros de las distintas
	ecuaciones 159
Tabla VIII.2	Dimensiones utilizadas en la aplicación DIODISP 163
Tabla VIII.3	Estructura organizativa de la distribución de la
	aplicación en su versión actual 164

Acrónimos

Investigar es ver lo que todo el mundo ha visto, y pensar lo que nadie más ha pensado

Albert Szent-Györgi

(1893-1986)

- **ABL**Atmospheric Boundary Layer
- ANOVA ANalisys Of VAriance
- AVN AViation Model
- **CEAM** Centro de Estudios Ambientales del Mediterráneo
- CBL Convective Boundary Layer
- **DIMEDAR** Modelo de dispersión que trata la EDAR como un foco puntual
- **DIODISP** Modelo de dispersión que discrimina por focos de emisión
- **DMDMETEO** Aplicación utilizada para tratamiento de datos meteorológicos
- **EDAR** Estación Depuradora de Aguas Residuales
- EPA Environmental Protection Agency (USA)
- **EPSAR** Entidad Pública de Saneamiento de Aguas Residuales
- FIM Flow Inyection Analisys Model
- Global Forecast System
- H₂S Sulfuro de hidrógeno
- IGM Isotropic Gaussian Model
- **IPL** Image Processing Laboratory
- ISE Ion Selective Electrode
- LCL Low Cloud Layer
- LDO Límite de Detección Olfativo
- LDM Límite de Detección del Método

LDMF	Límite de Detección del Método calculado a partir de la desviación estándar
NCEP	National Center for Enviromental Prediction
NH₃	Amoniaco
PBL	Planetary Boundary Layer
PNL	Programación No Lineal
RVVCCA	Red Valenciana de Vigilancia y Control de la Contaminación Atmosférica
SBL	Stable Boundary Layer
SPE	Solid Phase Extraction
SR	Razón de estabilidad

CAPÍTULO PRIMERO

Introducción

Ningún científico piensa con fórmulas. Antes de que el físico comience a calcular debe tener en su cerebro el curso de los razonamientos. Estos últimos, en la mayoría de los casos, pueden ser expuestos con palabras sencillas. Los cálculos y fórmulas vienen después

Albert Einstein (1879-1955)

I.1 MOTIVACIÓN

Las emisiones difusas son vertidas a la atmósfera principalmente desde un área o volumen, y no a través de una conducción como es el caso de las emisiones canalizadas, por lo que no es posible aplicar métodos de control estandarizados para este tipo de emisiones.

Por tanto, las principales dificultades que se plantean en el control de este tipo de emisiones, es la cuantificación de las mismas y la evaluación de la efectividad de las medidas correctoras implantadas. Ello es, debido a la dificultad intrínseca que conlleva su medida en instalaciones muchas actividades potencialmente complejas, con generadoras de emisiones y normalmente ubicadas en zonas de elevada concentración industrial.

Esta situación, provoca que no exista una metodología experimental sencilla para su cuantificación, siendo el método más simple, el uso de factores de emisión teóricos o de ecuaciones semiempíricas.

El uso de este tipo de factores, conlleva en ocasiones el establecimiento de escenarios medioambientales basados en información estimada, o en la aplicación de factores de emisión que no son representativos de una muestra determinada, y que pueden dar lugar, al enmascaramiento de necesidades de mejora medioambiental, o a establecer programas de acción basados en información que no representa la situación real de la zona de estudio considerada.

Otro problema asociado es la correcta identificación de los focos emisores. Este hecho se refleja en los inventarios de emisiones que se realizan para modelizar la calidad del aire. En éstos, se observa una subestimación de los niveles obtenidos. Esto es consecuencia directa de no disponer de información real de las fuentes emisoras, basándose normalmente en cálculos teóricos o extrapolados de emisiones canalizadas.

Resolver este tipo de discrepancias entre las cantidades estimadas y las realmente emitidas, es de vital importancia para el diseño, aplicación y evaluación de medidas de control para la disminución del impacto en la calidad del aire asociado a las emisiones difusas.

El desarrollo de una metodología experimental para la medida y el cálculo de las emisiones, permitiría establecer factores de emisión reales, y por tanto, poder cuantificar con mayor grado de detalle éstas, permitiendo de esta manera, determinar el impacto ambiental de este tipo de emisiones sobre los niveles de calidad de aire, así como estimar el rendimiento de mejora alcanzado mediante la implantación de las Mejores Tecnologías Disponibles (MTD's) a escala local, regional y nacional.

En particular, la actividad rutinaria en una planta de depuración de aguas residuales (EDAR), conlleva la emisión (no canalizada) de diversas sustancias químicas y biológicas. La naturaleza de estas sustancias es muy heterogénea, pudiendo actuar en ocasiones en muy bajas concentraciones, con una incidencia no lineal y efectos sinérgicos muy variados, pudiéndose convertir en fuente potencial de molestias en caso de existencia de núcleos habitados próximos.

En los últimos años, la mayor percepción por parte de la población de la molestia por olores que estas instalaciones provocan, unido a la liberación de estas sustancias de manera difusa, muchas veces en concentraciones nada despreciables de sustancias que pudieran acarrear riesgo para la salud, han colocado la problemática de olores, en una cuestión muy actual.

I.2 MARCO DE TRABAJO

Tradicionalmente, los estudios llevados a cabo hasta la fecha, han considerado algunos aspectos relativos a las características del estímulo relacionados con el grado de molestia que comporta, así como ciertos aspectos relacionados con la dependencia temporal.

En este caso, el problema del impacto olfativo, se ha considerado como una cuestión de dispersión atmosférica de compuestos gaseosos. Éstos, se transportan y difunden desde las zonas de emisión, hasta los potenciales receptores, a través de los mecanismos de la dinámica atmosférica.

En este sentido, la trilogía fuente-transporte-receptor (Venkatram, 1988; Hanna *et al.*, 1981) constituye la clave para caracterizar y describir cuantitativamente el problema.

En el caso de los olores derivados de la depuración de aguas residuales, algunos aspectos resultan especialmente complejos. Entre éstos, podemos destacar la gran variedad de compuestos capaces de producir estímulos olfativos, con respuestas sensoriales muy diferentes que no varían linealmente con la concentración, y produciéndose a temperatura ambiente y nivel superficial (Stuetz, 2001).

Es en esta línea de evaluación del impacto, donde nace el presente trabajo. Para ello se ha propuesto una aproximación metodológica utilizando la dosimetría pasiva junto con herramientas numéricas (Mantilla, 2012).

I.3 OBJETIVOS

Esta investigación tuvo su inicio dentro del proyecto "Estudio de la Dispersión de Olores en el Entorno de una Planta de Depuración de Aguas Residuales", financiada por la Entidad Pública de Saneamiento de Aguas Residuales de la Comunidad Valenciana (EPSAR), y en el marco de la Fundación Centro de Estudios Ambientales del Mediterráneo (CEAM), dentro del programa de Dinámica de Contaminantes y Meteorología.

Los objetivos que se ha pretendido desarrollar, se dividen en dos grandes secciones bien diferenciadas.

La primera corresponde a la parte experimental, cuyo principal objetivo es el diagnóstico de los niveles de concentración de diversas sustancias en las EDAR. Este primer objetivo puede concretarse en los siguientes objetivos específicos:

- I. Estimar los niveles de concentración de sulfuro de hidrógeno y amoniaco. Se escogen estos dos compuestos por considerarse buenos trazadores para la caracterización del impacto producido en una EDAR, además de encontrarse en este tipo de instalaciones en cantidades susceptibles de ser estudiadas y gestionadas.
- *II.* Analizar la influencia de diversos factores (entre ellos la meteorología) en los niveles de inmisión obtenidos.
- *III.* Estudiar el impacto de los niveles de concentración de una EDAR en el entorno próximo a la planta.

Y una segunda sección, en dónde el principal objetivo, sería la estimación indirecta de emisiones gaseosas, y cuyos objetivos específicos los podríamos definir de la siguiente manera:

- *IV.* Caracterizar el impacto olfativo mediante productos obtenidos por la modelización.
- *V.* Describir y ajustar un modelo de emisiones variables con el tiempo, con el objetivo de describir de la forma más realista y exacta posible el campo de inmisiones.
- *VI.* Obtener tasas de emisión, proporcionando de esta manera, un intervalo estimativo de emisión total promedio de este tipo de instalaciones hasta ahora desconocido.

I.4 ESTRUCTURA DE LA MEMORIA

Para cumplir los objetivos propuestos, la presente memoria se ha estructurado en los siguientes bloques temáticos.

En el segundo capítulo, se describen las zonas de estudio en dónde se centran los trabajos. Paralelamente se presentan la instrumentación y el método experimental empleado en las diferentes campañas de medida. En el tercer capítulo, se muestra la validación del proceso de medida con su incertidumbre asociada para los dosímetros pasivos de sulfuro de hidrógeno y de amoniaco.

El capítulo cuarto, es una prolongación del anterior, aunque se centra en la puesta a punto de los filtros que se van a usar en la medida con captación forzada de aire.

El capítulo quinto muestra el modelo de dispersión con el que se van a realizar las simulaciones (DIMEDAR), describiendo brevemente sus características y funcionamiento, el proceso de simulación llevado a cabo y el control realizado de los resultados obtenidos con el modelo. Dicho modelo de simulación considera a toda la planta como un único foco emisor puntual.

En el capítulo sexto se presentan los resultados obtenidos. Dicho capítulo es el más extenso, por lo que para una mayor comprensión por parte del lector, se ha dividido en cuatro partes.

La primera parte (R1) se centra en el tratamiento y resultados de los datos experimentales obtenidos con los dosímetros pasivos.

La segunda parte (R2), presenta la evaluación de varios sistemas de desodorización mediante el uso de la captación forzada.

En la tercera parte del capítulo (R3) se describen los trabajos de simulación, enfocados a la evaluación del impacto mediante la presentación de varios productos (valores promedios, máximos, frecuencias de ocurrencia, análisis de series temporales, etc.) y de la estimación de tasas de emisión promedio.

Y la última parte (R4), presenta los trabajos en laboratorio y el estudio de nuevas especies químicas a las estudiadas hasta el momento (sulfuro de hidrógeno y amoniaco).

El capítulo séptimo muestra el diseño y construcción de un prototipo de captador activo mucho más preciso y con más capacidades para el uso de medidas en campo.

En el capítulo octavo se describe otro modelo de dispersión para el cálculo de efluentes gaseosos (DIODISP). A diferencia del modelo presentado en el capítulo quinto, este modelo discrimina por fuentes puntuales, así, cada elemento emisor de la planta se trataría por separado y tendría unos algoritmos de dispersión diferentes según si se tratase de un foco puntual, lineal o extenso. El capítulo noveno resume las principales conclusiones obtenidas y los beneficios que de dicha investigación se derivan, dejando el capítulo décimo para la presentación de la bibliografía utilizada.

A modo de Glosario se presentan todos aquellos términos y/o acrónimos que se han considerado para el lector de difícil interpretación o que podrían constituir una explicación más específica y detallada. Paralelamente, se presentan como anexos, aquellas partes en que se ha considerado oportuno detallar más detenidamente algún punto.

Adicionalmente, se incluye con la tesis un CD de material complementario. Se ha querido poner de esta manera, a disposición de cualquier lector interesado información más específica sobre algunos aspectos concretos, que por la estructura y extensión del trabajo no se ha creído conveniente incluir. Aquellas partes de la tesis en las que se ha suministrado información adicional se han marcado de forma clara en el texto mediante el título Material Complementario. Por último se presenta en modo esquemático el proceso de investigación realizado.



Figura 1.1 Esquema del proceso del estudio de las emisiones difusas en el caso particular de instalaciones de depuración y tratamiento de aguas residuales

CAPÍTULO SEGUNDO

Metodología

La ciencia avanza a pasos, no a saltos

Thomas B. Macaualay (1800-1859)

II.1 INTRODUCCIÓN

La creciente expansión de las ciudades en busca de nuevas zonas urbanizables, está conllevando el acercamiento de la población hacia zonas e instalaciones primitivamente edificadas.

Fruto de esta tendencia, en los últimos años se ha registrado una reducción de los "márgenes de seguridad" entre las EDAR y la población.

Estas instalaciones pueden resultar en algunos casos problemáticas, tanto desde el punto de vista de contaminación por vía atmosférica, como por otras cuestiones relacionadas con otro tipo de contaminación (odorífera, acústica, química, biológica, etc.).

Las emisiones al medio ambiente derivadas de los tratamientos de las aguas residuales, son un problema potencial debido a las molestias que pueden producir tanto al personal que trabaja en su interior, como a los habitantes cercanos a ella.

Para poder caracterizar las emisiones procedentes de este tipo de instalaciones, es imprescindible la identificación y cuantificación de todas las sustancias olorosas presentes en una muestra.

Sin embargo en algunos casos, una sola sustancia olorosa puede ser dominante y proporcionar una indicación de la concentración estimada total del olor.

Este es el caso para la mayoría de tratamientos de agua residual, donde el H_2S y el NH_3 están presentes en concentraciones más elevadas que otras sustancias susceptibles de causar olor (Stuetz, 2001).

Con la medida de estos dos compuestos quedan representadas las dos familias de compuestos más comunes que podemos encontrar en estaciones de depuración de agua residual. Por lo que se decidió elegir el H_2S como trazador de los procesos anaerobios y el NH_3 el trazador para los procesos aerobios.

Antes de comenzar las medidas en campo, los dosímetros pasivos fueron sometidos a un proceso de validación y puesta a punto en laboratorio. Este proceso de evaluación estableció sus rangos y limitaciones, así como la incertidumbre asociada a las medidas (Llavador *et al.*, 2012a).

II.2 MEDIDA DEL H₂S Y NH₃: ESTADO DEL ARTE

Actualmente existe una gran diversidad de métodos disponibles para la medida de sulfuro de hidrógeno atmosférico.

Muchos de estos métodos están diseñados para medidas en el campo de seguridad e higiene, siendo capaces de medir concentraciones de sulfuro de hidrógeno a partir de 1 ppm, como es el caso de algunos tubos colorimétricos (Mürvet *et al.*, 1998) o los medidores portátiles de gases (www.draeger.com, www.odalog.com).

Otros métodos se basan en reacciones calorimétricas o luminiscentes (McKnee, 1986), como la recolección de H₂S con CdS (Kjeld, 1981; Taransankar *et al.*, 1986). Aunque estos métodos detectan concentraciones bajas de H₂S, no son capaces de medir niveles de concentración cercanos al límite de detección olfativo. El mayor inconveniente de este sistema de captación, es la pérdida del sulfuro recolectado y las interferencias de SO₂ en el desarrollo del color. Además, la manipulación del material de vidrio y las soluciones, hacen de este método, una técnica no adecuada para el trabajo de campo.

Las técnicas de separación de gases como la cromatografía de gases (GC), la cromatografía iónica (IC) o cromatografía líquida (HPLC) también se utilizan para cuantificar gases reducidos de azufre, incluyendo el H_2S . Estos sistemas son capaces de medir concentraciones de hasta 0,1 ppt, pero requiere de manera constante la presencia de un operador especializado (Bramante *et al.*, 2006; Lawrence *et al.*, 2000).

Las técnicas de *scrubbing* o de lavado de sustancias, están teniendo mucho auge estos últimos años, pero la especificidad en las especies que reducen y los altos costes en los reactivos utilizados desaconsejan su uso extensivo (Kourtidisa *et al.*, 2008; McIntyre, 2000).

Por otro lado, los monitores automáticos en continuo, son capaces de medir concentraciones cercanas a 0,1 ppb con tiempos bajos de respuesta. Estos sistemas están basados en un monitor de SO_2 con un paso previo de oxidación del H_2S en un horno. Proporcionan una buena representatividad temporal, pero espacialmente, están limitados a un solo punto de muestreo con condiciones específicas (conexión eléctrica, incapacidad de estar a la intemperie,...).

Otra metodología usada extensamente se basa en la dosimetría pasiva (filtros tratados químicamente). La técnica se basa en la difusión molecular del aire a través de un tubo, al final del cual, se encuentra un medio absorbente capaz de fijar la sustancia de interés. Por otra parte, es una técnica relativamente fácil de adaptar. Las sustancias comúnmente utilizadas para impregnar los filtros, son sales de mercurio o de plata, como AgNO₃, HgCl₂, Ag(CN)₂ y Pb(OAc)₂ entre otras.

De todas estas sustancias, la más utilizada es el nitrato de plata (AgNO₃) por ser muy sensitiva y específica para el H₂S, lográndose un límite de detección de 50 ppt con volúmenes de aire no muy elevados (Natush *et al.*, 1975; Shooter *et al.*, 1995).

En los trabajos de campo debe tenerse cuidado con los filtros impregnados con esta sustancia puesto que presenta cierta sensibilidad a la luz (Slatt, 1977; Spedding, 1984; Jaeschike, 1977; Servant, 1981). En este caso, el análisis de los filtros se realiza por fluorimetría.

De todo el extenso abanico de posibilidades analíticas para la medida del H_2S , se optó por la dosimetría pasiva. Dicha elección se basó, por una parte, en criterios de bajo coste y adaptabilidad para trabajo en campo, y por otra en criterios puramente químicos (se buscaba la elección de una sustancia de captación específica y un método de análisis lo suficientemente flexible).

En lo que respecta al amoniaco, los métodos de referencia están basados en electrodos selectivos y en la espectrofotometría de absorción con el reactivo de Nessler y el método del indofenol (Cobos, 1999; J. Li *et al.*, 1999) conocida como la reacción de Berthelot. Otros métodos usados habitualmente para la medida del amoniaco son, el empleo de electrodo selectivo, métodos FIA (Flow Inyection Analysis) con detección fluorimétrica o amperométrica (biosensores), quimioluminiscencia y cromatografía iónica. A pesar de los métodos alternativos a los métodos de referencia, la reacción con los reactivos de tipo indofenol es todavía la más empleada y la elegida como método en el presente trabajo.

Un factor muy importante que se ha tenido en cuenta en la elección de un método u otro de recolección del gas, es la manera de fijarlo y la forma de poder cuantificarlo posteriormente.

Siguiendo este criterio se ha elegido la metodología que se basa en la captación de NH_3 como ión amonio con ácido sulfúrico. El método de análisis empleado ha sido la espectrofotometría de absorción UV-Visible con el método del indofenol.

II.3 DESCRIPCIÓN DE LAS ZONAS DE ESTUDIO

Los emplazamientos objeto de estudio se distribuyen a lo largo de la geografía de la Comunidad Valenciana (ver Figura II.1). En la mayoría de casos, dichos emplazamientos se escogieron por las necesidades propias del proyecto en el cual estaban enmarcados.



Figura II.1 Localización de todos los emplazamientos objeto de estudio

Es por esta razón, que las campañas experimentales para los distintos emplazamientos no coinciden en el tiempo, aunque si en el mismo periodo.

Así pues, podemos dividir los emplazamientos de estudio en tres grandes bloques.

El objetivo del primer bloque ha sido la realización de un diagnóstico, evaluación y seguimiento para una posterior gestión de las concentraciones, y paralelamente del impacto que dichas instalaciones provocan en su entorno. Dentro de este primer grupo se incluirían las estaciones de depuración de la Conca de Carraixet (Alboraya), La Vila Joiosa, Denia-Ondara-Pedreguer, Rincón de León (Alicante) y el Grao de Castellón, a las que posteriormente se unió Quart-Benager.

El segundo bloque de emplazamientos, estuvo más enfocado al análisis (de la mejora o no) de los niveles de concentración después de la realización de obras en dichas plantas. En este grupo estarían los emplazamientos de Gandía-La Safor y Camp de Turia II (Ribarroja).

Por último, podríamos incluir en el tercer bloque, aquellos emplazamientos que han sido objeto de un estudio puntual

para solucionar problemas más concretos, y que por tanto, las campañas realizadas en dichos emplazamientos no han tenido una continuidad. Éste sería el caso de la EDAR de Algorós (Elche), cuyo objetivo era la solución de los problemas de corrosión que sufría la planta y las empresas aledañas a ella, o el caso de Villena, cuyo objetivo fue discernir si el problema de malos olores y quejas de la población, era del vertedero cercano a la planta o era de la misma planta.

Aunque como se ha mencionado anteriormente, la elección de los emplazamientos objeto de estudio se debió principalmente a las necesidades del proyecto, se trabajó junto con la EPSAR, para que éstos fueran lo más representativos posible.

De esta manera se escogieron emplazamientos que tratan diferentes tipos de aguas.

Por una parte, las de perfil más industrial (Grao de Castellón, Camp de Turia II, Conca del Carraixet, Quart-Benager, Rincón de León y Algorós). Dentro de este grupo, destacarían por un lado, la planta de la Conca de Carraixet, que aun teniendo un perfil de tratamiento de aguas industriales, gran parte de su caudal proviene también de aguas de uso agrícola, y, por otro lado, Rincón de León y Algorós. Estas dos últimas, están ubicadas cerca de dos grandes polígonos, cuyas aguas industriales vienen muy marcadas por el tipo de empresas allí alojadas.

Por la otra parte, estarían aquellas con un perfil más rural, como la Vila Joiosa, Denia-Ondara-Pedreguer, Gandía-La Safor y Villena. Dentro de este grupo, habría que destacar el carácter estacional de las tres primeras, cuyo caudal aumenta prácticamente el doble en los meses de verano, debido principalmente al turismo de playa que se produce en esas fechas.

Para finalizar, destacar que uno de los principales objetivos, ha sido conocer la influencia de las condiciones meteorológicas en el nivel de concentraciones de estas instalaciones. Por esta razón, prácticamente la totalidad de los emplazamientos objeto de estudio, se sitúan muy cercanos a la costa y en lugares de suave orografía, en donde el régimen de brisas, cómo veremos más adelante, va a tener especial importancia en los niveles de concentración.

En el CD de material complementario adjunto se muestra una descripción detallada de los emplazamientos (*Material Complementario A: Emplazamientos*).

II.3 INSTRUMENTACIÓN Y MÉTODO EXPERIMENTAL UTILIZADO

La aproximación realizada que se expone, combina mediciones experimentales realizadas en el entorno de varias EDAR, con los resultados de simulaciones numéricas ejecutadas con un modelo dispersivo de diagnóstico (Espinos, 2008).

De forma adicional, estos modelos permiten estimar de forma indirecta, tasas de emisión promedio asociadas a la actividad rutinaria de dichas instalaciones, con objeto de poner de manifiesto algunos aspectos relevantes que caracterizan el impacto olfativo (Llavador et al., 2012b).

Complementariamente, se dispuso de medidas de ciertos parámetros meteorológicos, junto a medidas de concentración en aire ambiente de sulfuro de hidrógeno y amoniaco, especies directamente relacionadas con la ocurrencia de molestias olfativas (Stuetz, 2001).

II.3.1 MEDIDAS METEOROLÓGICAS

Todas las EDAR estudiadas han contado con información meteorológica procedente de una torre instalada en la propia planta (excepto en las plantas de Algorós y el Grao de Castellón, donde se utilizaron las cabinas de contaminación atmosférica de la Generalidad Valenciana, red RVVCCA, ambas situadas a menos de dos kilómetros de cada planta).

La infraestructura ha consistido en un mástil de 15 metros, con medidas de viento (velocidad y dirección) en el nivel más alto, y de temperatura a dos alturas (3 y 15 metros, que aportan una medida directa del gradiente térmico superficial).

Adicionalmente han contado con un pluviómetro y un radiómetro (Figura II.2). Las torres han operado de manera continua y promediada sobre intervalos diezminutales.

La revisión de la información meteorológica para cada emplazamiento se ha apoyado fundamentalmente en el análisis de las correspondientes rosas de viento y en las gráficas de distribuciones de las distintas magnitudes analizadas, que ha permitido evaluar la dinámica atmosférica de la zona.

En todos los casos se ha trabajado sobre las medidas de mayor resolución disponible. Para un análisis pormenorizado

del banco de datos meteorológico ver *Material Complementario B: Meteorología*.

Respecto al tratamiento de las medidas procedentes de las torres meteorológicas, éstas efectuaron mediante la aplicación DMDMETEO que fue desarrollada bajo el proyecto "Explotación de las medidas meteorológicas en el Entorno de Depuradoras de Aguas en la Comunidad Valenciana" DIOD-I (Ref. DIMEDAR/ 09-00 de 09/04/2001).



Figura 11.2 Esquema y especificaciones de los distintos sensores colocados en las torres meteorológicas de la red de datos meteorológicos del CEAM (torre tipo). Fuente: Red de Torres Meteorológicas de la Fundación CEAM, David Corell-Custardoy et al. II Jornades de la Meteorologia i Climatologia de la Mediterrànea Occidental - JMCMO. Póster

II.3.2 MEDIDAS EN INMISIÓN

La caracterización de las medidas experimentales durante las campañas de campo se realizó mediante dos equipamientos complementarios.

Por una parte, un monitor automático para la obtención de series temporales de concentración en un punto del interior de las instalaciones, y por otra parte, una red de captadores pasivos dispuestos en diferentes puntos, tanto dentro del recinto de la planta, como en sus alrededores. Para un mayor detalle consultar *Material Complementario C: Captadores*.

El monitor automático proporciona una buena resolución temporal, mientras que con los captadores pasivos se obtiene mayores coberturas espaciales.

Monitor automático

El monitor de sulfhídrico utilizado, está formado por un equipo comercial para la medición de SO₂, modelo Dasibi S-5000 (de acuerdo al estándar EN-14212:2005).

Tiene un intervalo de medida de 2 ppm, al que se le incorporó una etapa previa fabricada y validada en el propio CEAM, constituida por un filtro de dióxido de azufre y un horno catalítico a 850°C, montados en serie. Antes de la entrada del aire en el horno, éste es filtrado, eliminándose de esta forma todos los SO_x presentes.

El monitor de amoniaco es un equipo comercial TELEDYNE API modelo 201A, con un intervalo de medida también de 2 ppm.

Ambos equipos fueron calibrados en los laboratorios de la Fundación CEAM inmediatamente antes de su colocación en cada planta, y donde periódicamente, eran mandados a la casa fabricante para tener otra calibración de referencia.

A la hora de la adquisición de datos por los equipos, se optó por adquirir y almacenar las medidas como promedios diezminutales, para facilitar su posterior análisis y de esta forma poder compararlos con los datos meteorológicos.

Los monitores se situaron en el edificio de control de las respectivas plantas, localizado en el propio recinto de las instalaciones. Asimismo el equipo de monitorización en continuo estuvo operativo en cada planta durante varios meses anteriores a las campañas experimentales a fin de evaluar el nivel de concentraciones promedio. Por la misma razón se dejaba alrededor de otro mes después de cada campaña.

La toma de muestras fue siempre colocada en la parte superior del edificio de control, a cierta altura, garantizando así una buena ventilación del punto de medida, y una separación mínima de cualquier foco de emisión directa.

Dosímetros pasivos

Para la medida del H_2S^1 , se utilizaron dosímetros tipo tubo o Palmes (Shooter, 1995). Estos dosímetros consisten en tubos de plástico acrílico, de 7 centímetros de longitud y 10 milímetros de diámetro interno, cerrado por ambos lados con tapones de polipropileno (Figura II.3).

En uno de los tapones se colocaron dos mallas de acero inoxidable impregnadas con una disolución de nitrato de plata, que constituye el medio absorbente (Taransakar *et al.*, 1986).

Para el caso del NH_3 , los dosímetros empleados fueron de tipo caja o Ferm (Schojoerring, 1992). Éstos consisten en una carcasa circular de polietileno de 10 milímetros de altura, 25 milímetros de diámetro interno y 35 milímetros de diámetro externo (Figura II.3).

Los dosímetros, están cerrados por una parte, donde se ha colocado un filtro de acetato de celulosa impregnado de ácido sulfúrico.

Para la estimación de la concentración promedio del contaminante en la atmósfera se supone un proceso de transporte molecular estacionario, sujeto a la segunda ley de Fick.

Como norma general de trabajo (capítulo 3), en las medidas en campo, se utilizaron tres captadores en cada uno de los emplazamientos, con un tiempo de exposición promedio de cinco días, analizándose dos de ellos y asignando el valor medio como estimador de la concentración. Sólo en el caso de discrepancia entre ambos se utilizó el tercero.

¹ El tipo de dosímetro utilizado en cada caso, queda para el capítulo siguiente, donde se justifica su elección, basándose en los resultados de las experiencias realizadas en el laboratorio.


Figura 11.3 Detalle de los dosímetros tipo caja o Ferm (imagen izquierda), y tipo tubo o Palmes (imagen derecha).

Finalmente, todas las concentraciones de los dosímetros fueron corregidas por la temperatura, normalizadas a 20°C, utilizado para ello las medidas de las estaciones meteorológicas.

II.3.3 MEDIDAS EN EMISIÓN: CAPTACIÓN FORZADA

Para las medidas en emisión de los dos compuestos estudiados, se siguió con la opción inicial de un procedimiento basado en filtros impregnados químicamente.

Se construyó un equipo de muestreo diseñado para la captación forzada. La limitación de caudal dentro de la línea, se realizó mediante una válvula de regulación, que permitía ajustar el caudal con la suficiente sensibilidad (Figura II.4).



Figura II.4 Sistema de captación activa

Al final de la línea se puso un medidor de volumen. Éste marca el volumen total que pasa por la línea de muestreo. El volumen registrado por el medidor se tomó como valor de referencia en el cálculo de las distintas concentraciones.

La entrada de muestra se protegió de posibles factores externos que pudieran afectar a la línea de muestreo. Todas las conexiones que se utilizaron en el equipo correspondían a una métrica de ¼" (6 mm) de acero inoxidable o de teflón.

En el caso del amoniaco, se prefirieron líneas de acero inoxidable, habiéndose comprobado que el teflón puede provocar efectos indeseados debido a fenómenos de adsorción en las paredes.

Se construyó un portafiltros de teflón para el H_2S y uno de acero inoxidable en el caso del NH_3 (Figura II.5). El portafiltros, estaba constituido por un cilindro de unos seis centímetros de diámetro que se subdividía a su vez, en varias piezas apiladas. Cada una de estas piezas, presenta un diámetro interno de 47 milímetros.



Figura 11.5 Foto y esquema del portafiltros de muestreo para el H_2S (fuente: Informe DIOD-1)

La bomba utilizada en la línea fue una bomba de membrana con un caudal máximo de 28 l/min. Esta bomba es específica para el muestreo de aire, siendo sus piezas internas de teflón para obtener una mayor resistencia de la misma a los ambientes corrosivos a los que tuvo que ser expuesta.

Todos los elementos del sistema se encajaron en un rack diseñado especialmente para poder trasladar y/o transportar la línea de muestreo más fácil y cómodamente. En la línea de muestreo se tuvo en cuenta las siguientes precauciones y recomendaciones para asegurar al máximo el perfecto funcionamiento de la misma:

• Los tubos tuvieron el mínimo recorrido posible, evitándose en lo posible, codos y restricciones donde pudiera acumularse material particulado.

• Se eliminaron las partículas que pudiesen llegar tanto a ensuciar y estropear el sistema como a contaminar la muestra.

• Se utilizaron materiales inertes en la entrada de la muestra, en las tuberías y en las conexiones para que no se alterara el contaminante de interés.

• Dado que uno de los principales problemas en las líneas de muestreo eran las fugas, éstas fueron recubiertas con cinta de teflón. Además se revisó una por una todas las conexiones de la línea comprobando con un líquido marcador de fugas si existía algún tipo de escape y eliminándolo en el caso de existir. Así mismo, se realizaron inspecciones regulares de chequeo de fugas.

• Se revisó la línea de muestreo y cada uno de los componentes antes del inicio de cada toma de muestra, reemplazando las partes que presentaban signos de un posible envejecimiento o contaminación.

• Un problema que se encontró, ajeno a nuestro control, fue que la mayoría de instalaciones presentaban sistemas de desodorización en los cuáles no se había tenido en cuenta ningún tipo de orificio en el que realizar medidas directas. Para ello se envió a las instalaciones en las que se iban a realizar los trabajos de medida un pequeño manual con una serie de recomendaciones de cómo y dónde realizar dicha toma (ver en el CD adjunto *Material complementario D: Recomendaciones*).

II.3.4 MODELO DE DISPERSIÓN

El modelo utilizado se basa en una adaptación e integración de dos códigos independientes: un modelo meteorológico de diagnóstico no divergente, más un modelo de difusión de tipo bocanada acoplado al anterior.

El módulo meteorológico incorpora la base del modelo MATHEW (Lawrence Livermore Laboratory) de la Agencia de Energía Nuclear (Walker, 1995; UCWMA-103581, 1997).

Se trata de un modelo de campo de vientos regional, tridimensional, que utiliza una técnica variacional para estimar las tres componentes del campo de vientos, no divergente sobre una malla cúbica y consistente con las medidas empíricas de partida.

Considera topografía compleja de forma explícita. Es independiente del emplazamiento, utiliza medidas meteorológicas habitualmente disponibles tanto en superficie como en altura y es computacionalmente estable.

El módulo meteorológico proporciona campos de viento que advectan las emisiones, cuyo motor de transporte y difusión se realiza mediante un código adicional que es una adaptación del modelo INPUFF (Integrated PUFF) de la EPA² (Petersen, 1986).

Se trata de un modelo gaussiano, de tipo bocanada, lo que permite la simulación de emisiones instantáneas o bien continuas procedentes de focos puntuales. Incorpora la formulación de Pasquill-Gifford para describir la dispersión y los algoritmos de Briggs (Briggs, 1975) para estimar la sobreelevación. Esta sobreelevación se calcula definitivamente para cada bocanada o "*puff*" en el momento de la emisión, siendo las componentes verticales del campo de vientos, las responsables del movimiento vertical de los mismos durante el resto del proceso de dispersión.

En la elección de los códigos, se valoró el compromiso entre una complejidad suficiente para la simulación de los procesos dispersivos a escala local (microescala) y la simplicidad de alimentación a partir de información experimental local disponible.

Las ejecuciones numéricas se realizaron sobre periodos de tiempo variables, coincidentes con los intervalos de exposición de los dosímetros y con una resolución temporal horaria. Las salidas del modelo, consistieron en valores de inmisión a nivel del suelo sobre una malla coincidente con la topográfica para cada una de las horas de simulación.

II.4. DATOS Y PERIODO ANALIZADOS

Los trabajos tuvieron lugar desde enero del 2002 hasta diciembre del 2011 (para ver fechas concretas ver *Material Complementario E: Fechas*).

² EPA: Environmental Protection Agency

Se muestra en la Figura II.6, la correspondiente cobertura temporal del banco meteorológico completo para todos los emplazamientos (no se muestran ni el Grao de Castellón ni la planta de Algorós por no pertenecer a nuestra red de medidas meteorológicas).



Figura II.6 Disponibilidad de datos para las distintas torres meteorológicas

Por otro lado, en cuanto a la cobertura respecto a las campañas experimentales:

- Se dispone de 66 campañas para la EDAR de la Conca de Carraixet, de las cuales seis de ellas tienen muestreos interiores y exteriores (desde el 2002 al 2004), y las demás sólo interiores (desde el 2005 al 2011, menos en el año 2007 debido a unas obras acontecidas en la planta).
- 32 campañas (de las cuáles 8 de ellas poseen tanto muestreo interior como exterior) en las EDAR de Denia-Ondara-Pedreguer, Rincón de León y la Vila Joiosa (del 2002 al 2006).
- 33 campañas con muestreo interior en la EDAR de Quart-Benager en el periodo 2008-2011.
- 2 campañas intensivas en la EDAR de Castellón, 13 en la de Gandía- La Safor y 12 en la de Camp de Turia II.
- Una campaña puntual (con muestreo tanto interior como exterior) en las EDAR de Algorós y Villena.

En cuanto a los trabajos de simulación numérica desarrollados, se dispone de un total de 88 campañas simuladas en cinco localizaciones objeto de estudio.

Para finalizar, en cuanto a trabajos realizados en sistemas de desodorización, se dispone de varias campañas en siete EDAR.

II.5 RECAPITULACIÓN

Para concluir el capítulo, se presenta a modo de resumen, los aspectos más destacables:

- Se presenta un procedimiento experimental que combina mediciones experimentales (captadores pasivos, medidas con un analizador automático medidas meteorológicas), y simulaciones numéricas ejecutadas con un modelo dispersivo de diagnóstico, con objeto de poner de manifiesto algunos aspectos relevantes que caracterizan el impacto olfativo.
- Destacar el volumen de datos meteorológicos recogidos a lo largo de los años de estudio, lo que ha supuesto el despliegue de gran cantidad de instrumentación en los diversos desplazamientos. Se dispone de una gran cobertura temporal, teniendo para algunos de ellos casi una década de datos disponibles.
- Por otra parte, se ha de tener en cuenta el intenso trabajo de campo y campañas experimentales realizado (desde el 2002 al 2011), en el que se han llevado a cabo un total de 224 campañas de medidas dosimétricas, 88 campañas de simulación numérica y 7 campañas de captación forzada.

CAPÍTULO TERCERO

Medidas experimentales I: Validación de los dosímetros de H₂S y NH₃ en laboratorio

El científico no tiene por objeto un resultado inmediato. Él no espera que sus ideas avanzadas sean fácilmente aceptadas. Su deber es sentar las bases para aquellos que están por venir, y señalar el camino

Nikola Tesla (1856-1943)

III.1 PREPARACIÓN, TOMA DE MUESTRAS Y ANÁLISIS

III.1.1 PREPARACIÓN

La preparación de los dosímetros pasivos consistió en la impregnación de dos mallas de acero inoxidable (4 mallas/milímetro) con 50 microlitros de una disolución acuosa de nitrato de plata para el H_2S , mientras que para el NH_3 , la impregnación consistió en una disolución de 50 microlitros de una disolución de ácido sulfúrico en un filtro de acetato de celulosa.

Tanto el proceso de preparación, como el proceso de extracción, se realizó bajo aire purificado (cámara de aire cero) y protegido de la luz solar. La humedad relativa durante todo el proceso se mantuvo por debajo del 2%.

III.1.2 MUESTREO

Para la realización de los muestreos, los dosímetros pasivos se dispusieron en una carcasa que les protegía de las condiciones meteorológicas y de la acción directa de la luz solar (puesto que el reactivo utilizado para los dosímetros de H_2S es fotosensible).

El muestreo del contaminante empieza cuando se quita el tapón inferior del dosímetro permitiendo al aire ser transportado por difusión molecular al interior del tubo.

Se dejaron algunos dosímetros sin abrir con intención de obtener el valor del blanco. Después de la toma de muestra se guardaron otra vez en la oscuridad hasta que fueron analizados.

III.1.3 ANÁLISIS

El análisis del sulfuro recogido en las mallas se realizó por fluorimetría. El fluorímetro se ajustó a 499 nanómetros de longitud de onda de excitación y a 519 nanómetros de longitud de emisión.

Para el análisis de las muestras, se extrajo el sulfuro de plata formado en las mallas con una disolución de cianuro de sodio. Éste, se encarga, a un pH elevado, de romper la molécula de sulfuro de plata, dejando el sulfuro en forma iónica. Este sulfuro es el encargado de realizar el "quenching" al FMA, pudiendo determinarse de esta manera la cantidad de sulfuro de hidrógeno existente en cada muestra.

En lo que respecta al análisis de NH₃, éste se realizó por espectroscopía UV-VIS por el método del indofenol.

En el primer paso del proceso de derivatización, el amonio reacciona con el hipoclorito para formar la monoamina y esta reacciona con el fenol obteniéndose la imina.

En el segundo paso la imina reacciona con otra molécula de fenol dando el indofenol, cuyo máximo de absorción en disolución se encuentra a 653 nanómetros. La cuantificación se realiza por medida de la absorbancia de la disolución resultante.

Para la extracción del amonio fijado, se depositó el filtro en un tubo de ensayo de propileno que contenía 2,6 mililitros de agua MilliQ y donde posteriormente se introdujo 15 minutos en el baño ultrasónico. Para finalizar el proceso se colocó el volumen de extracción en un baño termostatado a 40°C durante 30 minutos.

III.1.4 CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN

La concentración del contaminante se calculó a partir de la primera ley de Fick (Ecuación III.1)

$$m = J_A \pi r^2 t = \frac{-D_{AB}(C_1 - C_2)\pi r^2 t}{z_a}$$
 (Ecuación III.2)

Dónde:

m = masa de sulfuro de hidrógeno (mol)

 J_A = flujo del gas A (mol/(cm²s))

 D_{AB} = coeficiente de difusión molecular del gas A en el gas B (cm²/s)

 C_1 = concentración en la boca del dosímetro (mol/cm³)

 C_2 = concentración en el fondo del dosímetro (mol/cm³)

- t = tiempo de toma de muestra (s)
- z = longitud de difusión (cm)
- r = radio del dosímetro (cm)

Si se supone que C_2 se mantiene cerca de cero por la eliminación del gas con un absorbente eficiente, esta expresión (ecuación III.1) podemos simplificarla a:

$$m = \frac{-D_{AB}C_1\pi r^2 t}{z}$$
 (Ecuación III.3)

El rendimiento de captación del dosímetro, dependerá por tanto de sus dimensiones (r y z) las cuales conocemos, y del coeficiente de difusión del contaminante en el aire, siendo este 0,160 cm²/s para el H_2S y 0,406 para el NH₃ (Gudzhedzhiani, 1978).

Despejando C_1 de la anterior ecuación se puede calcular la concentración promedio del contaminante en el aire.

III.2 VALIDACIÓN EXPERIMENTAL

Tanto para la puesta a punto, como para la evaluación, se realizaron una serie de experiencias en las que se intentó medir las variables físicas, químicas, o de cualquier otro tipo que pudieran afectar a la correcta medida del mismo.

Con esta finalidad, se evaluó la influencia de determinadas variables sobre la concentración medida por los dosímetros pasivos, comparándola con la concentración registrada por un método de referencia. Como método de referencia se escogieron las concentraciones medidas por los analizadores en continuo.

La comparación de los valores obtenidos con los dosímetros pasivos respecto de las medidas registradas por los analizadores, nos indican la validez de las medidas realizadas por los mismos.

Así pues, una vez que se conoció la influencia de cada una de las variables, su incertidumbre, y las limitaciones del propio método, éste estuvo listo para la realización de las medidas de inmisión en campo.

Los principales objetivos de las experiencias de validación, fue por un lado, poder establecer un rango de tiempos y concentraciones en los cuales se pudiera asegurar una correcta medida, y por otro, el cálculo del límite de detección del método y la incertidumbre asociada a ese rango de tiempos y concentraciones.

También se ha pretendido valorar la influencia de variables como el tipo o medio de impregnación, con la finalidad de aumentar la eficiencia de colección.

Otro punto importante, fue la coherencia en la expresión de las medidas y de las concentraciones. Para ello, se tomó la masa de contaminante por unidad de volumen o bien la relación de volumen ocupado por el contaminante respecto al volumen total.

En este caso particular, y ajustándose a los rangos de concentración de inmisión de dichos contaminantes en la atmósfera, se utilizó preferentemente como unidad de concentración el ppb (asumiendo que se refiere a volumen en ppbv). Así pues, el factor de conversión que se ha utilizado para el paso entre unidades de µg/m³ a ppb, ha sido:

1 ppb = 1,4 μ g/m³ para el H₂S 1 ppb = 0,7 μ g/m³ para el NH₃ Entendiendo que las condiciones finales de expresión de los resultados se refieren siempre a condiciones de 293 K y 1013 hPa corregidas por el factor correspondiente.

III.2.1 DESCRIPCIÓN DEL ENTORNO EXPERIMENTAL

La realización de las distintas experiencias fue llevada a cabo en los laboratorios de la Fundación CEAM.

Para ello se utilizó una cúpula de teflón³ y una caja de acero inoxidable donde se crearon distintas atmósferas de concentración conocida (Figura III.1).

Estas concentraciones se lograron con la ayuda de una calibradora DASIBI con un rango de caudales de 10 dm³ y 100 cm³ para el diluyente y el gas muestra respectivamente.

La concentración durante la realización de los experimentos, fue controlada en todo momento gracias a un monitor en continuo, siendo registrada en un datalogger y en un registrador de papel.

Las concentraciones medidas por el monitor en continuo fueron tomadas como medida de referencia durante el desarrollo de las experiencias (EPA nº EQSA-1086-061).

La base de la cúpula y la tapa de la caja permiten la introducción de diferentes tipos de sondas o sistemas de muestreo, disponiendo además de una apertura suficiente que permite introducir elementos de cierto volumen.

El volumen de gas contenido en la cúpula es de 1 m³ de aire aproximadamente y un poco menor en la caja. En ambos sistemas, el volumen se encuentra perfectamente mezclado gracias a un pequeño ventilador.

 $^{^3}$ Se utilizó la cúpula de teflón para el H₂S, y la caja de acero inoxidable para las experiencias del NH₃. Se vio después de las primeras experiencias realizadas con el amoniaco, que la cúpula de teflón no aseguraba la suficiente inerticidad por efecto de adsorción del NH₃ con las paredes.



Figura 111.1 Cúpula de teflón (imagen izquierda). Montaje de los equipos utilizados para realizar los experimentos (imagen de la derecha), el rack de la izquierda contiene una calibradora (DASIBI) y el de la derecha un monitor de H_2S (DASIBI serie 4108A)

En cada experiencia se crearon distintas concentraciones de contaminante partiendo de distintas botellas del compuesto.

La generación de la concentración deseada, se realizó en todo momento respetando los límites de correcto funcionamiento del sistema de dilución, que recomienda trabajar al 10% del límite superior e inferior de generación de caudal de aire y de gas.

Tanto la introducción de la mezcla de gas a través de la calibradora, como la toma de muestra realizada por el monitor en continuo, se realizaron a través de las distintas aperturas existentes en la base. Durante los experimentos los dosímetros pasivos fueron introducidos y retirados por las aberturas existentes.

III.2.2 INFLUENCIA DE VARIABLES EXPERIMENTALES

A la hora de plantear las diferentes experiencias de validación de los dosímetros pasivos, se tuvo en cuenta los posibles parámetros que a priori pudieran influir en el funcionamiento de los captadores pasivos como son: el tiempo de exposición, la concentración ambiente, el tipo y/o el modo de impregnación.

Estos parámetros se han tomado como variables independientes en las experiencias de validación.

En todo momento se trabajó a una cierta sobrepresión para asegurar que los intercambios de gases entre interior y exterior, a través de posibles fugas o porosidades del material, fueran siempre de dentro hacia fuera.

Tiempo de exposición

Una de las principales variables independientes a tener en cuenta en la utilización de la dosimetría pasiva, es el tiempo mínimo de exposición en el cual el dosímetro es capaz de medir concentraciones de sulfuro de hidrógeno con un bajo error relativo respecto al método de referencia.

En el caso de los dosímetros pasivos de sulfuro de hidrógeno, se necesita captar una cantidad ligeramente mayor de 2 ng de sulfuro de hidrógeno para poder ser evaluada por el método.

A partir de este valor, y aplicando la ley de Fick, puede calcularse el tiempo mínimo de exposición requerido para recoger 2 ng de H_2S , en función de distintas concentraciones ambientes de sulfuro de hidrógeno. Teóricamente, concentraciones mayores de 1 ppb de sulfuro de hidrógeno, son detectadas tras un día de exposición del dosímetro en la atmósfera. Esto en la práctica no suele ser así. Varios trabajos recomiendan tiempos de exposición de los dosímetros en la atmósfera mayores que los teóricos (Heal *et al.*, 1999, Glasius *et al.*, 1999).

Por tanto, es importante conocer el periodo mínimo necesario en el cuál los dosímetros son capaces de medir correctamente la concentración. Este periodo de muestreo debe hallarse experimentalmente (para ver los resultados de las experiencias realizadas consultar apartado III.4.2: *Tiempos de exposición y concentraciones*).

Concentración

Conocer el rango de concentraciones para el que puede utilizarse una metodología es fundamental para conocer las limitaciones de la misma.

En principio, el rango de medidas viene determinado por el límite de detección del método en la parte más baja y por la máxima cantidad estequiométrica de gas capaz de reaccionar con la sustancia de captación en la parte alta. Para ello se definieron uno o varios puntos de concentración (que abarcasen el rango de aplicabilidad), con el objetivo de comprobar si los dosímetros eran capaces de medirlos correctamente (para ver los resultados de las experiencias realizadas consultar apartado III.4.2: *Tiempos de exposición y concentraciones*).

Medio de impregnación

El medio se refiere al tipo de material que se utiliza como soporte de la sustancia de impregnación, es decir, el tipo de filtro o malla donde se deposita la solución encargada de captar el contaminante y dónde se produce la reacción química.

Existen dos tipos de medios de impregnación que se utilizan normalmente en este tipo de dosímetros: las mallas de acero inoxidable y los filtros de acetato de celulosa. Su eficiencia de captación fue evaluada experimentalmente para los dos tipos de medio de impregnación (se puede ver dicha evaluación en el apartado III.4.1: *Comparación medios de colección*).

Modo de impregnación

Con modo de impregnación nos referimos a cómo debe ser impregnado el medio de colección y de qué manera debe definirse el proceso que ha de seguirse para impregnar el medio de captación. Este tipo de procesos involucran la evaluación de cosas como si es necesario o no secar los filtros antes de introducirlos en el tapón del dosímetro o si al introducir glicerina en la solución de impregnación se obtiene una mejor colección o no (ver apartado III.4.3: *Diferentes procesos de impregnación a distintas concentraciones*).

III.3 CÁLCULO DEL LÍMITE DE DETECCIÓN DEL MÉTODO (LDM)

El límite de detección de un método (LDM) es la mínima masa o concentración de analito que proporciona una señal significativamente distinta de la media de las señales del blanco. Dicho de otra forma, es la masa mínima recogida en la malla de un dosímetro pasivo, que presenta una cantidad significativamente distinta a la media de las masas recogidas por varios dosímetros blancos.

Un dosímetro blanco es un dosímetro que se prepara junto a los que van a ser expuestos a una determinada atmósfera, pero que no se expone a la misma. Durante el tiempo de exposición de los dosímetros, éste permanece cerrado con la finalidad de evaluar las distintas contaminaciones que puedan sufrir los mismos durante su preparación, transporte y almacenaje. Finalmente el valor registrado por el dosímetro blanco le es restado a los dosímetros de medida.

Se han considerado para los presentes trabajos dos tipos de blancos:

- Blancos de preparación: son los blancos que cuantifican la contaminación durante el proceso de preparación, transporte y almacenamiento de los dosímetros. Este tipo de blancos acompañan a los dosímetros durante su preparación, almacenamiento y transporte.
- Blancos de exposición: este tipo de blanco cuantifica además de la contaminación que se pueda producir durante el proceso de preparación, transporte y almacenamiento, la posible contaminación por procesos de degradación de la sustancia de impregnación o por algún tipo de perturbación debida a su exposición a condiciones ambientales durante el tiempo de muestreo. Este tipo de blancos, además de acompañar a los dosímetros durante su preparación, almacenamiento y transporte, también se exponen, sin abrir, durante el periodo de muestreo.

Se define el límite de detección de un método experimental de medida, como tres veces la desviación estándar de los blancos (IUPAC, 1978), aunque actualmente se utiliza un criterio más conservativo el "criterio $\alpha = \beta = 5\%$ " (Ramis, 2001) que establece 3,29 veces la desviación estándar de los blancos (ecuación III.3):

 $LDM = 3,29 \cdot s_b$ (Ecuación III.3)

Quedando un valor de 2,2 ng para el LDM del H_2S y de 25 ng para el del NH_3 .

III.4 EVALUACIÓN DE LOS DOSÍMETROS DE H₂S

A continuación se exponen las conclusiones que se extraen de las experiencias realizadas. Para un mayor detalle y descripción de las experiencias realizadas, ver *Material Complementario F: Experiencias*.

III.4.1 COMPARACIÓN MEDIOS DE COLECCIÓN: MALLAS DE ACERO. VS. FILTROS DE ACETATO DE CELULOSA

Los resultados obtenidos mostraron que los dosímetros que utilizan mallas de acero inoxidable, poseen un menor error relativo (1%) que los que utilizan filtros de acetato de celulosa (13%).

Tras la realización de un análisis estadístico de comparación de medias (análisis-t), se observó la existencia de diferencias significativas entre los valores registrados por cada medio de impregnación, indicando la influencia del medio de colección en las medidas tomadas por el dosímetro y la conveniencia de tomar la serie que más se aproximase al valor de referencia.

Por otra parte, la medida con mallas de acero, aunque presenta un mayor coeficiente de variación (13% las mallas frente el 4% de los filtros), proporciona un menor error relativo respecto a la concentración registrada por el monitor y una mayor eficiencia en la colección del contaminante que los filtros de acetato de celulosa.

Basándose en los resultados de la experiencia, se eligió como medio de colección las mallas de acero.

III.4.2 TIEMPOS DE EXPOSICIÓN Y CONCENTRACIONES

Este experimento fue concebido con un diseño factorial, con el objeto de estimar la incertidumbre del método y comprobar la influencia de las variables tiempo y concentración, así como la interacción entre ellas para rangos altos y bajos.

Se llevaron a cabo dos series de experiencias (10 y 500 ppb) para dos y ocho días de exposición.

De los resultados obtenidos para ambas concentraciones obtenemos un error relativo significativamente mayor para

las series de dos días (alrededor del 30% frente un rango de 6-15% para el periodo de ocho días), indicando de esta forma una clara influencia del tiempo de exposición.

Esta influencia es avalada por un resultado positivo de los análisis de comparación de medias (análisis-t) entre las series de tiempos para cada concentración (Llavador *et al.*, 2012a).

III.4.3 TIEMPO DE TOMA DE MUESTRAS

Se sometieron varias series de dosímetros a una atmósfera conocida de sulfuro de hidrógeno (10 ppb) durante distintos periodos de tiempo (2, 4, 8 y 16 días respectivamente).

Según los resultados obtenidos, la serie de dosímetros con un tiempo de exposición de dos días, presenta un mayor error relativo que las otras series (33% frente al 7%, 17% y 6% respectivamente).

Adicionalmente se realizó un análisis de varianzas (ANOVA) entre las cuatro series, en la que se observó la existencia de una diferencia significativa entre las diferentes series temporales. El resultado del ensayo de Tukey para factores no aleatorios (Fowler, 1992), mostró la existencia de estas diferencias significativas entre la media de la serie de 2 días y las otras series.

De los resultados se desprende que, un tiempo de medida de los dosímetros de un par de días no era suficiente para obtener una buena medida, viéndose, que a partir de cuatro días de exposición, disminuía el error relativo obteniéndose medidas aceptables y disminuyendo su error relativo.

Finalmente, se optó por ser un poco más conservativo y se estableció el tiempo de muestreo promedio para las medidas de campo en 5-6 días.

III.4.4 DIFERENTES PROCESOS DE IMPREGNACIÓN A DISTINTAS CONCENTRACIONES

Para observar la influencia de los diferentes procesos de impregnación, se evaluó la medida registrada por los dosímetros con distintos niveles de concentración (15 y 500 ppb) para un periodo de cuatro días de exposición, buscando el mejor proceso de impregnación para las mallas y los filtros.

Para ello se compararon tres procesos de impregnación diferentes (a los que denominó A, B y C, y que se describen detalladamente en el *Material Complementario F: Experiencias*).

Los errores relativos presentados por todas las series fueron muy similares, registrando la serie impregnada del modo A, un error ligeramente inferior a las demás. El coeficiente de variación también presentó valores menores en las series impregnadas del modo A.

Tras realizar un análisis de varianza, se comprobó que tanto para la serie de 15 ppb como para la de 500 ppb, las concentraciones promedio registradas por los tres tipos de impregnación no presentaban diferencias estadísticamente significativas.

Por tanto, la elección del método de impregnación se realizó basándose fundamentalmente en razones prácticas al no existir diferencias significativas entre ellos.

Se seleccionó el modo A por ser el método más rápido y cómodo de impregnación, frente a los otros dos, que requieren un secado de los filtros y mallas.

Además, el método A presentaba (como anteriormente se ha comentado) un error relativo respecto del método de referencia ligeramente inferior a los métodos de impregnación B y C.

III.4.5 CÁLCULO DE SOLUBILIDAD DE LAS MUESTRAS

Los resultados obtenidos en las experiencias realizadas anteriormente, mostraron en todos los casos, una ligera tendencia a la infravaloración de la concentración de NH₃ y de H₂S, que iba en aumento según lo hacía la masa presente en el medio de absorción.

Tras el cálculo de las curvas de solubilidad, se comprobó que, en el caso particular del H_2S , para masas relativamente elevadas de sulfuro de plata, la cantidad de cianuro de sodio contenido en 3 ml de disolución 0,1 M no era suficiente para disolver todo el compuesto. Después de distintas comprobaciones, se decidió aumentar la molaridad de cianuro de sodio de la disolución de extracción a 0,2 M asegurando la extracción, disolución y análisis de todo el sulfuro de plata fijado en la malla.

III.4.6 ESTIMACIÓN DE LA INCERTIDUMBRE DE H₂S

Se define la incertidumbre del método, como un parámetro que describe un intervalo dentro del cual, se espera encontrar la cantidad medida, teniendo en cuenta todas las fuentes de error. Dicha magnitud muestra un intervalo alrededor del valor estimado dentro del rango en el que se encuentra el valor considerado verdadero, por tanto, su cuantificación nos proporciona una idea de la calidad de los resultados.

Para estimar la incertidumbre del método de medida, se realizaron una serie de experimentos de tipo factorial (Tabla III.1).

Este tipo de experimentos permiten cambiar todos los factores o variables simultáneamente, obteniendo de esta manera la información buscada con un número reducido de experimentos (Miller, 2000).

En el diseño, se tomaron dos de las variables independientes más influyentes en el funcionamiento de los dosímetros pasivos: el tiempo de muestreo y la concentración ambiente.

Experiment		Ma	trix	Plan of experimentation		Response	
		\mathbf{X}_1	X_2	Conc. (ppb)	Days	recovery (%)	
I	1	-1	-1	2	2	57	
	2	-1	+1	2	8	75	
	3	+1	-1	10	2	74	
	4	+1	+1	10	8	94	
	5, 6, 7	0	0	6	5	92	
Π	1	-1	-1	50	2	73	
	2	-1	+1	50	8	90	
	3	+1	-1	500	2	92	
	4	+1	+1	500	8	95	
	5, 6, 7	0	0	275	5	94	

Tabla III.1Planteamiento experimental de la experiencia para lacuantificación de la incertidumbre del método y la respuesta de recoleccióndel H_2S por pare de los dosímetros

Para este objetivo, se dividió la experiencia en varios ensayos, en los que se varió el tiempo y la concentración a la que fueron expuestos los dosímetros. Se eligieron tres tiempos de exposición. Uno correspondiente a un periodo de exposición elevado (8 días), uno medio (5 días) y otro a una exposición baja (2 días).

En el caso de la concentración, se decidió trabajar con dos series de concentraciones, una correspondiente a un rango de concentraciones bajas (2, 6 y 10 ppb) y otra a un rango de concentraciones más elevadas (50, 275 y 500 ppb).

Los experimentos de concentraciones de 2, 10, 50 y 500 ppb con un tiempo de exposición de 2 y 8 días se realizaron en un periodo total de 8 días, coincidiendo en el interior de la cámara las dos series de dosímetros con distintos tiempos de exposición.

Los dosímetros con dos días de exposición, se introdujeron en la cámara el sexto día del experimento, sacándolos todos al octavo día de exposición. Finalmente, las dos series de dosímetros se analizaron juntas.

Para cada serie se expusieron un total de 6 dosímetros pasivos y un dosímetro blanco que fue expuesto en la cúpula sin abrir. La masa obtenida por el dosímetro blanco les fue restada a la serie de dosímetros expuestos.

En las Tabla III.2 y Tabla III.3 se resumen los resultados obtenidos para todas las series. En ellas, se muestra la concentración promedio (c_d) obtenida por cada dosímetro, acompañado por el error estándar (σ) y el coeficiente de variación (CV_d).

Serie	Tiempo (días)	C_d ± σ (ppb) (x 10)	CV_d (%)
Rango de	concentr	aciones bajas	5
Serie 2 ppb	2	8 ± 6	37
Serie 2 ppb	8	15 ± 6	19
Serie 6 ppb	5	60 ± 6	11
Serie 10 ppb	2	80 ± 6	10
Serie 10 ppb	8	110 ± 8	4
Rango de	concenti	raciones altas	5
Serie 50 ppb	2	400 ± 20	7
Serie 50 ppb	8	500 ± 30	6
Serie 275 ppb	5	2900 ± 50	8
Serie 500 ppb	2	4500 ± 320	15
Serie 500 ppb	8	4700 ± 330	7

Tabla III.2 Resultados de la experiencia para los diferentes rangos de concentración y el tiempo de exposición

Serie	Tiempo (días)	c_r ± σ (ppb) (x 10)	E _r (%)	C_r - C_d (ppb) (x 10)				
F	Rango de concentraciones bajas							
Serie 2 ppb	2	10 ± 6	46	2				
Serie 2 ppb	8	20 ± 6	25	5				
Serie 6 ppb	5	60 ± 6	8	0				
Serie 10 ppb	2	110 ± 8	27	30				
Serie 10 ppb	8	120 ± 8	6	10				
Rango de concentraciones altas								
Serie 50 ppb	2	510 ± 30	27	110				
Serie 50 ppb	8	510 ± 30	10	10				
Serie 275 ppb	5	3100 ± 300	6	200				
Serie 500 ppb	2	4900 ± 500	8	400				
Serie 500 ppb	8	4900 ± 500	5	200				

Tabla 111.3 Resultados de la experiencia para los diferentes rangos de concentración y el tiempo de exposición (continuación)

Como en casos anteriores, antes de la realización de cálculos de parámetros estadísticos, se realizó un test de anómalos a los datos, rechazándose tras la aplicación del ensayo de Dixon, un valor de la serie de datos de 275 ppb.

Los resultados mostraron que sistemáticamente, tanto para las series de dosímetros con altas y bajas concentraciones, el mayor error relativo y la mayor diferencia, son presentadas por las series con dos días de exposición.

En el caso de las series con bajas concentraciones, los errores relativos son, en general, mayores que para la series con altas concentraciones, pasando justamente lo contrario con el error absoluto. Fijándose en las series con periodos de 5 y 8 días de exposición se observó, dentro de cada rango de concentraciones, una tendencia decreciente del error relativo y una tendencia creciente del absoluto.

Para comprobar el efecto de cada variable estudiada y la interacción entre ellas, se realizó un análisis multivariante. La variable dependiente tomada como respuesta del sistema, fue en todos los casos, el error relativo. Se realizaron un total de dos análisis multivariantes, uno para cada rango de concentraciones (Tabla III.4).

Efectos	P-valor (sig. Bilateral)			
Rangos bajos de c	oncentración			
Concentración (C)	0			
Tiempo (T)	0			
C x T	0,702			
Rangos altos de concentración				
Concentración (C)	0,067			
Tiempo (T)	0,003			
C x T	0,117			

te
t

De los resultados del análisis multivariante, se desprende que, para ambos rangos de concentraciones, existe una diferencia estadísticamente significativa entre el tiempo de exposición de los dosímetros respecto del error relativo. Asimismo, también se observa que no existen interacciones entre los dos efectos o variables (p-valor>0,05).

Tomando como referencia los valores obtenidos en las series de concentración con periodos de 5 y 8 días de exposición, se decidió estimar la incertidumbre como una combinación de los dos anteriores parámetros estadísticos.

Para concentraciones menores de 10 ppb de sulfuro de hidrógeno, se estima la incertidumbre en $\pm 0,5$ ppb de sulfuro de hidrógeno, mientras que para concentraciones mayores o iguales a 10 ppb y hasta 500 ppb de sulfuro de hidrógeno se define una incertidumbre del $\pm 7\%$.

Basándose en los resultados anteriores, la diferencia de concentraciones, es un estimador más realista para concentraciones bajas de sulfuro de hidrógeno, mientras que el error relativo, define mejor la exactitud del método para concentraciones altas y medias.

El coeficiente de variación (CV) de las series con tiempos de exposición de 5 y 8 días, puede definirse entre el $\pm 10-20\%$ para concentraciones bajas de sulfuro de hidrógeno (0-6 ppb). Para valores mayores de 6 ppb y hasta 500 ppb de sulfuro de hidrógeno toma un valor promedio del $\pm 6\%$ respecto del valor registrado.

III.5 EVALUACIÓN DE LOS DOSÍMETROS DE NH₃

Análogamente a como se hizo en el caso del H_2S , se realizaron distintas experiencias que tuvieron por objetivo el cálculo, a veces cualitativamente y otras cuantitativamente, de la influencia de algunas variables para el NH_3 .

Para una mayor comprensión para lector, se ha optado por crear una notación propia para el seguimiento de las distintas variables estudiadas. Dicha notación consiste en la letra "V" seguida de un carácter numérico que indica la variable a estudiar en dicha experiencia.

Así pues las variables a estudiar fueron:

- TIPO DE DOSÍMETRO (V1) Para ello se utilizaron dosímetros tipo tubo (L = 35 mm, $\phi = 10 \text{ mm})^4$ y dosímetros tipo caja (L = 10 mm, $\phi = 25 \text{ mm}$).
- REACTIVO DE IMPREGNACIÓN (V2)

En este caso, después de una revisión bibliográfica exhaustiva y la experiencia adquirida como equipo de investigación en la medida de diversos contaminantes atmosféricos, se decidió utilizar dos tipos de reactivos de impregnación.

El primero una disolución acuosa de ácido sulfúrico $(0,57 \text{ mililitros} \text{ de } \text{H}_2\text{SO}_4 \text{ en } 100 \text{ mililitros})$ y el segundo una disolución de ácido cítrico (consistente en 1 mililitro de glicerol, 1 gramo de ácido cítrico y 98 mililitros de metanol en 100 mililitros).

SOPORTE DE IMPREGNACIÓN (V3) En base a trabajos científicos existentes, se decidió utilizar tres tipos de soporte de impregnación distintos (2 mallas de acero inoxidable, un filtro de acetato de celulosa y un filtro de acetato de celulosa con resina ligante).

 MODO DE IMPREGNACIÓN (V4) Al igual que en los casos anteriores, se decidió realizar dos tipos de impregnación, una directa mediante pipeta (impregnación con 30/50 μL de reactivo) y otra mediante la inmersión del filtro o malla en la disolución.

⁴ L: longitud del dosímetro empleado; ϕ : Grosor del dosímetro empleado

- PROTECCIÓN DEL DOSÍMETROS (V5) Se quiso comprobar la influencia que ejercía el tipo de protección que se coloca al dosímetro expuesto al ambiente.
- TIEMPO DE EXPOSICIÓN CONCENTRACIÓN CAPTADA POR EL DOSÍMETRO (V6)

Las experiencias que se realizaron en el laboratorio fueron las siguientes:

Experiencia 1. Evaluación del funcionamiento de los dosímetros tipo caja con distintos reactivos de impregnación (V2), impregnados en distintos soportes de impregnación (V3) e impregnados de distintos modos (V4).

Para ello se realizaron 12 series: 2 serie correspondientes al tipo de reactivo utilizado (ácido cítrico o sulfúrico); 3 correspondientes a los distintos soportes de impregnación (mallas de acero, acetato de celulosa o acetato de celulosa con resina ligante) y 2 más relativas al modo de impregnación (directo o por inmersión).

En cada serie de colocaron 7 dosímetros. Así se expusieron un total de 84 dosímetros (12*7) en esta primera experiencia (Tabla III.5).

Con los resultados de la primera experiencia, se eligió el reactivo, el soporte y el modo de impregnación a utilizar en la medida dosimétrica del amoniaco. Las tres series que dieron los mejores resultados fueron las elegidas para la realización de la segunda experiencia.

Esta experiencia mostró, que los dosímetros que obtuvieron mejores resultados fueron los impregnados de forma directa (30 μ L) con ácido sulfúrico en dos mallas de acero inoxidable.

Para el otro reactivo (ácido cítrico), se obtuvieron resultados bastante mejores en los dosímetros impregnados de forma directa tanto en mallas como en filtro de acetato de celulosa con resina ligante. Los resultados brutos obtenidos para los filtros de acetato de celulosa presentaron mucha mayor dispersión.

V2	V3	V4	SERIE ⁵
	2 Mallas acero	30 μL	S1-E1
H ₂ SO ₄	2 Mallas acero	Inmersión+Secado	S2-E1
	AC ⁶	30 μL	S3-E1
	AC	Inmersión+Secado	S4-E1
	AC con resina ligante	30 μL	S5-E1
	AC con resina ligante	Inmersión+Secado	S6-E1
	2 Malla acero	30 μL	S7-E1
	2 Malla acero	Inmersión+Secado	S8-E1
Ácido	Acetato de celulosa	30 μL	S9-E1
Cítrico	AC	Inmersión+Secado	S10-E1
	AC con resina ligante	30 μL	S11-E1
	AC con resina ligante	Inmersión+Secado	S12-E1

Tabla 111.5 Detalle de las experiencias realizadas en el laboratorio correspondientes a la primera experiencia

Experiencia 2. Evaluación de los dosímetros tipo caja resultantes de la experiencia 1, para distintos tipos de protección a la entrada (V5).

En esta segunda experiencia (Tabla III.6) se realizaron 9 series de dosímetros (las 3 mejores series para cada variable correspondientes a la experiencia 1).

Cada serie dispuso de 7 dosímetros, por lo que el número de dosímetros analizados en esta segunda experiencia fue de 63 dosímetros (9*7).

Como en el caso anterior, se eligieron las tres mejores series de dosímetros tipo tubo para la realización de experiencias de comparación con los dosímetros tipo caja (E7).

 ⁵ S corresponde al número de serie. E corresponde a la experiencia realizada
⁶ AC: Acetato de celulosa

Los resultados de esta experiencia no fueron significativos y se optó desde el punto de vista experimental en no colocar protección de entrada de los dosímetros tipo tubo y por tanto la realización de la experiencia E7 se hizo con las series S1-E1, S7-E1 y S11-E1.

	V5	SERIE
	sin protección	S1-E2
S1-E1	Malla de acero	S2-E2
	Membrana de teflón	S3-E2
	sin protección	S4-E2
S7-E1	Malla de acero	S5-E2
	Membrana de teflón	S6-E2
	sin protección	S7-E2
S11-E1	Malla de acero	S8-E2
	Membrana de teflón	S9-E2

Tabla	111.6	Detalle	de	las	experiencias	realizadas	en	el	laboratorio
corresp	ondiente	e a la seg	jund	a ex	periencia				

Experiencia 3. Evaluación del funcionamiento de los dosímetros tipo caja con distintos reactivos de impregnación (V2), impregnados en distintos soportes de impregnación (V3) e impregnados de distintos modos (V4).

Para esta tercera experiencia se siguió un diseño experimental parejo a la primera experiencia, pero esta vez con los dosímetros tipo caja.

Para ello se realizaron 12 series: 2 serie correspondientes al tipo de reactivo utilizado; 3 correspondientes a los distintos soportes de impregnación y 2 más relativas al modo de impregnación. En cada serie de colocaron 7 dosímetros. Así se expusieron un total de 84 dosímetros (12*7) (Tabla III.7).

Las dos mejores series fueron las elegidas para la realización de la última experiencia (experiencia 4).

V2	V3	V4	SERIE
	Malla acero	50 μL	S1-E3
H₂SO₄	Malla acero	Inmersión +Secado	S2-E3
	AC	50 μL	S3-E3
112004	AC	Inmersión +Secado	S4-E3
	AC con resina ligante	50 μL	S5-E3
	AC con resina ligante	Inmersión +Secado	S6-E3
	2 Malla acero	50 μL	S7-E3
٨٥	2 Malla acero	Inmersión +Secado	S8-E3
Cítrico	AC	50 μL	S9-E3
	AC	Inmersión +Secado	S10-E3
	AC con resina ligante	50 μL	S11-E3
	AC con resina ligante	Inmersión +Secado	S12-E3

Tabla 111.7 Detalle de las experiencias realizadas en el laboratorio correspondiente a la tercera experiencia

Los mejores resultados se obtuvieron en las series S5 y S11 correspondientes a los dosímetros impregnados directamente con 50 μ L (tanto de ácido cítrico o ácido sulfúrico) con filtros de acetato de celulosa con resina ligante.

Experiencia 4. Evaluación del funcionamiento de los dosímetros tipo caja y tipo tubo.

En este caso, se eligieron las series de dosímetros tipo tubo (3 series) y tipo caja (2 series) que mejores resultados presentaron en las experiencias E1 y E3.

En este apartado y para diferenciar las series se ha utilizado la nomenclatura "Sc" para los dosímetros tipo caja.

SERIE ESCOGIDAS ⁷	REACTIVO DE IMPREGNACIÓN	SOPORTE	SERIE FINALES
S1-E1	H ₂ SO ₄ (30 μL)	2 mallas acero	S1-E4
S7-E1	Ac. Cítrico (30 μL)	2 mallas acero	S7-E4
S11-E1	Ac. Cítrico (30 μL)	AC con resina ligante	S11-E4
Sc5-E3	H ₂ SO ₄ (50 μL)	AC con resina ligante	Sc5-E4
Sc11-E3	Ac. Cítrico (50 μL)	AC con resina ligante	Sc11-E4

Tabla 111.8 Detalle de las experiencias realizadas en el laboratorio correspondiente a la séptima experiencia

En la experiencia, se evaluó el comportamiento de los dosímetros a distintos tiempos (5 y 8 días) y a concentraciones altas y bajas (25 ppb, 50 ppb y 100 ppb).

El resultado recoge que los dosímetros tipo caja recolectan mejor el amoniaco ambiental.

En cuanto al reactivo de impregnación, la experiencia no mostró una diferencia significativa, por lo que se optó por el ácido sulfúrico por la comodidad en la preparación del reactivo.

Sobre los resultados obtenidos por el soporte de impregnación, tampoco hubieron diferencias significativas, por lo que se escogió el acetato de celulosa con resina ligante que presentó una menor (aunque muy ligera) dispersión en cuanto a los resultados.

III.6 RECAPITULACIÓN

A continuación, a modo de resumen, se enumeran las valoraciones fundamentales que derivan de los resultados obtenidos en las experiencias de validación de los dosímetros pasivos tanto para el sulfuro de hidrógeno como para el amoniaco.

⁷ Las series escogidas corresponden a las series que a lo largo de las distintas experiencias han resultado dar los mejores resultados

En cuanto al sulfuro de hidrógeno:

- El límite de detección del método se fija en 2,2 ng. Una vez conocida la masa mínima que marca el LDM, y aplicando la ley de Fick, se observa que el tiempo de medida de los dosímetros en la atmósfera limita la concentración mínima que estos son capaces de medir. Cuanto mayor es el tiempo de muestreo, el dosímetro es capaz de medir concentraciones más bajas disminuyendo, por tanto, el límite de detección.
- Existe una diferencia significativa entre las dos series de blancos. La serie de blancos de exposición registra valores más elevados que los de preparación. Esto puede ser debido a algún tipo de alteración producida durante la exposición de los dosímetros, que solo es evaluada con los blancos de exposición.
- La variable independiente que más influye en la medida del dosímetro es el tiempo de exposición. Un período de muestreo corto (2 días) conlleva un elevado error relativo del dosímetro respecto del método de referencia, mientras que, periodos de tiempo mayor o iguales a cuatro días, disminuyen el error relativo hasta límites aceptables para una medida indicativa del contaminante.
- La incertidumbre se estima en $\pm 0,5$ ppb para concentraciones menores de 10 ppb de sulfuro de hidrógeno, y del $\pm 7\%$ para concentraciones mayores o iguales a 10 ppb y hasta 500 ppb de sulfuro de hidrógeno.
- El coeficiente de variación (CV) varía entre un 10 y un 20% para concentraciones hasta 6 ppb de sulfuro de hidrógeno, mientras que para concentraciones hasta 500 ppb toma un valor del ±6% respecto del valor registrado.
- La evaluación del comportamiento del dosímetro en el rango de concentraciones estudiadas ha sido satisfactoria, registrándose en todo momento, errores aceptables respecto del método de referencia. Como consecuencia de la definición de la incertidumbre del método, puede afirmarse que la dosimetría pasiva queda evaluada para la medida indicativa de concentraciones de sulfuro de hidrógeno hasta 500 ppb. Este rango de concentraciones, coincide con el rango útil de aplicación del método pudiendo medir con los dosímetros desde ambientes prácticamente

limpios, hasta ambientes de inmisión altamente contaminados.

- Tras evaluar los procesos de impregnación, y comprobar que no existen diferencias estadísticamente significativas entre ellos, se ha escogido el método de impregnación "A" como el más idóneo para la impregnación de las mallas. La elección del método, se ha basado fundamentalmente en razones prácticas de preparación del dosímetro, y en el error relativo ligeramente inferior al registrado por las series impregnadas con los otros dos métodos.
- El medio de impregnación que ha presentado una mejor recolección de la masa de H₂S son las mallas de acero inoxidable, proporcionando un menor error relativo respecto al método de referencia que los filtros de acetato de celulosa. Por esta razón se consideran las mallas como el mejor medio de impregnación para la captación del sulfuro de hidrógeno.
- Una concentración 0,1 M de cianuro de sodio no es suficiente para la disolución y extracción de todo el sulfuro de plata formado en la malla. Tras el cálculo de las curvas de solubilidad del compuesto en cianuro de sodio, se ha decidido utilizar concentraciones 0,2 M de cianuro de sodio para la extracción de las muestras.

En cuanto al amoniaco:

- Se evaluó el tipo de dosímetro mejor para la captación de amoniaco ambiental. Se estudiaron dos tipos de dosímetros (los de Palmes o tipo tubo y los de Ferm o tipo caja). Tras realizar diversas experiencias, se escogió el dosímetro tipo caja, puesto que, aunque presentaron resultados parecidos, los de caja mostraron mayor estabilidad y homogeneidad en cuanto a los valores de captación.
- En cuanto al medio de impregnación para una mejor recolección de la masa de NH₃, se eligió el ácido sulfúrico, si bien, el ácido cítrico mostró resultados similares. Al no haber una diferencia demasiado significativa, la elección estuvo basada en términos puramente prácticos. La preparación del reactivo elegido resulta más fácil que la del ácido cítrico.

- Como medio de soporte, se evaluaron tres tipos, las mallas de acero inoxidable y los filtros de acetato de celulosa con y sin resina ligante. Finalmente, se decidió la utilización de los filtros de acetato de celulosa con resina ligante por presentar resultados un poco mejores que los impregnados en las mallas de acero inoxidable. Los impregnados en acetato de celulosa sin resina, dieron resultados relativamente "malos", con que ante la duda de la reactividad de los filtros con la sustancia de impregnación, se decidió no considerarlos.
- El límite de detección del método para el amoniaco se establece en 1,6 ppb. En cuanto al número de días para una óptima recolección del NH₃ se llegó a la conclusión que estaba en un rango entre 4-8 días, por lo que finalmente se decidió exponerlos en las distintas campañas experimentales el mismo tiempo que los dosímetros de sulfuro de hidrógeno.

CAPÍTULO CUARTO

Medidas experimentales II: Puesta a punto de los filtros para medidas de campo mediante captación forzada

Es más importante que una ecuación sea hermosa que el que encaje con la experimentación

Paul Dirac (1902-1984)

IV.1 INTRODUCCIÓN

Las medidas de captación mediante flujo forzado, se enfocaron principalmente a la caracterización de focos dentro de la planta de depuración, aunque posteriormente dichos trabajos, se encaminaron al estudio de la eficiencia de los sistemas de desodorización de las respectivas plantas de depuración de aguas residuales.

En los apartados que prosiguen, se presenta la puesta a punto de los filtros para su uso en captación forzada, de forma análoga a la que se ha realizado para los captadores pasivos en el capítulo anterior.

Los filtros utilizados para las medidas fueron de acetato de celulosa de 47 milímetros. Dichos filtros se sumergieron en una disolución de AgNO₃ en el caso del H₂S durante dos minutos y en H₃PO₄ en el caso del NH₃ (Slatt et al., 1977; Jaeschike, 1977).

IV.2 VARIABLES EXPERIMENTALES

IV.2.1 VARIABLES EXPERIMENTALES ESTUDIADAS

Caudal de muestreo

Un caudal de muestreo excesivamente elevado puede hacer que disminuya la eficiencia de colección del contaminante en el filtro, en cambio, un bajo caudal de aumenta el tiempo de colección del contaminante.

Se recomienda un caudal de muestreo aproximado de 6,6 l/min (Servant, 1981; Spedding, 1984). El máximo caudal de muestreo recomendado es de 9 l/min. Estos caudales fueron evaluados experimentalmente, adaptándolos a las condiciones de muestreo.

Tiempo de muestreo

Al contrario que con los dosímetros pasivos, el muestreo con filtros activos no necesita de grandes periodos de muestreo. Normalmente se emplean tiempos de muestreo de 30 minutos. En ambientes con elevadas concentraciones, es conveniente trabajar con bajos tiempos de muestreo para recolectar una cantidad no excesivamente elevada del compuesto que dificultaría el análisis de las muestras. Esto hace necesario evaluar el comportamiento del método ante distintos periodos de muestreo.

IV.2.2 CÁLCULO DEL LDMF

Para el cálculo del LDMF se desarrolló una experiencia análoga a las anteriores para la evaluación de los sistemas de captación pasiva.

Se prepararon una serie de diez filtros impregnados. Los resultados obtenidos muestran el promedio de las masas registradas por N filtros (mF), acompañado por la desviación estándar (σ). La última columna muestra el LDMF, calculado a partir de la desviación estándar (3,29 σ de los blancos).

Serie	N	$\mathbf{mF} \pm \mathbf{\sigma}$ (ng)	LDMF (ng)
Blanco	10	8 ± 1	2,9

Tabla IV.1 A	Resultados del	cálculo	del	LDM
--------------	----------------	---------	-----	-----

Una vez conocido el LDMF, expresado como nanogramos de sulfuro de hidrógeno, puede calcularse la concentración del contaminante que es capaz de detectar el método, en función del tiempo y caudal de muestreo. La Figura IV.1 muestra el tiempo necesario para registrar una determinada concentración en función del caudal de muestreo.



Figura IV.1 LDM expresado en concentración de H2S (ppb) expresado en función del tiempo y del caudal de muestreo de los filtros activos

La combinación del tiempo y caudal de muestreo, definirán la concentración capaz de ser detectada por el método. Según aumente el valor de estas variables, menores concentraciones de sulfuro de hidrógeno será capaz de detectar el método (dentro del margen de incertidumbre de la medida).

IV.3 EVALUACIÓN DE LA INCERTIDUMBRE

Como en los casos anteriores, se optó por un experimento de tipo factorial para evaluar los efectos de determinadas variables, así como su interacción.

Para el diseño de estos experimentos se tomaron las variables anteriores (caudal, tiempo de muestreo y concentración).

El proceso de extracción de los filtros, tras un estudio de la curva de solubilidad, se realizó con 20 mililitros de una disolución de cianuro de sodio 0,3M, cantidad más que suficiente para disolver todo en sulfuro de plata fijado en los filtros.

La experiencia factorial se dividió en varios ensayos en los que se variaron el caudal, tiempo y concentración de muestreo. Los valores tomados por las distintas variables fueron: **<u>Tiempo</u>**: Se escogieron dos tiempos de toma de muestra, un periodo bajo (10 minutos) y otro periodo de tiempo más elevado (30 minutos).

<u>Concentración</u>: Se decidió trabajar con dos concentraciones, una en el rango bajo-medio (10 ppb) y otra en el rango alto (500 ppb).

<u>Caudal</u>: Los caudales variaron entre 6 l/min y 9 l/min.

En total se llevaron a cabo un total de ocho ensayos. Para cada serie se realizaron seis extracciones, incluyéndose en cada serie de concentraciones un filtro como blanco.

Los resultados obtenidos en esta experiencia, para las series de 10 y 500 ppb, se resumen en la Tabla IV.2.

Para cada serie se observa la concentración promedio de las N muestras ($\overline{c_F}$) acompañada por el error estándar (σ), el coeficiente de variación de los filtros (CV) y el error relativo (E_r) entre la concentración promedio de la muestra y el método de referencia (c_r).

La concentración de referencia ha sido calculada a partir de los N valores registrados por el monitor en continuo para cada una de las tomas de muestra.

Los resultados obtenidos para las distintas series muestran que el error relativo es menor al 10% en todos los casos, presentando la mayor parte de las series, un error menor al 5%. Existe una aleatoriedad en los valores de los errores relativos, que parece indicar que no existe una tendencia de las variables, observable a primera vista.

En las concentraciones registradas por las series se observa cierta tendencia a la infravaloración en las series expuestas a 10 ppb de sulfuro de hidrógeno, y a la sobrevaloración en las expuestas a 500 ppb (Figura IV.2).

El coeficiente de variación es en todos los casos, menor al 10%, exceptuando la serie C500Q9T10 dónde toma un valor del 11%. Los errores estándar obtenidos con los filtros para concentraciones de 10 ppb poseen el mismo orden de magnitud que el error para el método de referencia.

Serie ⁸	$\overline{c_F} \pm \sigma$	C_r±σ (ppb)	CV (%)	Er (%)
C10Q6T10	$10,1 \pm 0,7$	10,5 ± 0,7	7	4
C10Q6T30	8,8 ± 0,6	9,7 ± 0,6	7	9
C10Q9T10	9,2 ± 0,6	9,6 ± 0,6	5	4
C10Q9T30	11,1 ± 0,6	10,7 ± 0,6	6	3
C500Q6T10	620 ± 50	600 ± 40	6	4
C500Q6T30	580 ± 40	590 ± 40	8	2
C500Q9T10	600 ± 40	560 ± 40	11	8
C500Q9T30	630 ± 50	580 ± 40	4	8

Tabla IV.2 Resultados de la experiencia

La eficiencia de colección en el primer filtro para concentraciones bajas es del 100%, no siendo necesario en estos casos la incorporación de un segundo filtro en el muestreo. Esta eficiencia, va disminuyendo según aumenta la masa recolectada en el filtro, siendo necesario, cuando se trabaja con elevadas concentraciones, colocar un segundo filtro en serie.



Figura IV.2 Gráficos de dispersión para concentraciones de 10 y 500 ppb

⁸ El código de las series ha seguido la siguiente nomenclatura. Las letras C, Q y T, indican concentración, caudal y tiempo de muestreo respectivamente. Los caracteres numéricos que acompañan a dichas letras corresponden al valor de esas tres magnitudes. Así, por ejemplo, la serie C10Q6T10, es la serie que corresponde con la experiencia en las condiciones de 10 ppb de concentración (C), con un caudal de 6 l/min (Q) y un tiempo de muestreo (T) de 10 minutos.
IV.3.1 ANÁLISIS MULTIVARIANTE

El análisis multivariante, indicó que no existen diferencias estadísticamente significativas (p-valor>0,05), entre los distintos valores de concentración, caudal y tiempo de muestreo evaluados. Asimismo tampoco existe una interacción estadísticamente significativa entre las variables Tabla IV.3.

El análisis estadístico corroboró de esta forma la aleatoriedad observada en el valor de los errores relativos, e indicó que la metodología puede ser utilizada sin restricciones para los valores de concentración, caudal y tiempos de muestreo dentro del rango evaluado en esta experiencia.

Efectos	P-valor (sig. Bilateral)		
Efectos principales			
Concentración (C) 0,8			
Tiempo (T)	0,6		
Caudal (Q)	0,5		
Interacción de factores			
C x T	0,3		
СхQ	0,1		
CxTxQ	0,9		

Tabla IV.3 Resultados del análisis multivariante

La estimación de la incertidumbre para los captadores activos se realizó por tanto tomando el valor promedio del error relativo obtenido por todas las series estudiadas. Limitando estos valores de concentración a la masa recolectada durante un tiempo de 10-30 minutos y un caudal de muestreo entre 6-9 l/min, la incertidumbre del método queda dada por \pm 5% (dentro del rango 0 ppb \leq [H₂S] \leq 500 ppb).

El coeficiente de variación (CV) del método (el cuál se definió como el promedio de los coeficientes de variación de las series) resultó ser del \pm 7% del valor registrado.

IV.4 RECAPITULACIÓN

Las valoraciones fundamentales que derivan de los resultados obtenidos en las anteriores experiencias con los captadores activos se pueden resumir en:

- Se establece el LDMF tanto para el NH $_3$ como para el H $_2$ S en 2,9 ng.
- La evaluación del comportamiento de los filtros impregnados ante distintos rangos de caudal, tiempo y concentraciones de muestreo ha sido satisfactoria, no existiendo diferencias significativas entre el uso de los parámetros de muestreo dentro del rango de valores estudiados. Los captadores han sido validados para su uso en el rango de concentraciones de 0-500 ppb, caudales de 6-9 l/min y tiempos de muestreo de 10-30 minutos. Estos valores coinciden con el rango útil de aplicación del método.
- La estimación de la incertidumbre, expresado como error relativo promedio, se fija en el \pm 5% del valor de la concentración obtenida por los captadores activos para concentraciones hasta 500 ppb con las condiciones de caudal y tiempo tomadas para los ensayos.
- El coeficiente de variación del método, definido como promedio de los coeficientes de variación de las series es del ± 7% del valor registrado.
- La eficiencia de colección del filtro es buena para bajas concentraciones. Cuando aumenta la cantidad de masa recolectada, en muestreos con altas concentraciones ambientes y/o altos tiempos y caudales de muestreo, se hace necesario un segundo filtro.
- Igual que en el capítulo anterior, en el caso particular del H₂S, na concentración 0,1M de cianuro de sodio en la disolución de extracción no es suficiente para la extracción y disolución del sulfuro de plata formado en el filtro impregnado. Tras el cálculo de la curva de solubilidad del compuesto en cianuro de sodio, se decidió utilizar una concentración 0,3M para la extracción de las muestras.

CAPÍTULO QUINTO

Modelo de simulación de emisiones difusas

Después de todo, cuando estás enamorado, quieres contarlo a todo el mundo. Por eso, la idea de que los científicos no hablen al público de la ciencia me parece aberrante.

Carl Sagan (1934-1996)

V.1 INTRODUCCIÓN

Los modelos de dispersión en la actualidad se emplean en multitud de problemas de la más variada índole. En la presente tesis, se han empleado en dos líneas de trabajo diferentes.

Por una parte, como forma de evaluación y control de los olores producidos por fuentes tan variadas, complejas y extensas como son las emisiones fugitivas generadas en las EDAR, y que dan como resultado la caracterización del impacto olfativo sobre una zona determinada.

Por otra parte, como proceso en la estimación, de forma indirecta, de tasas de emisión promedio. Dicha estimación tiene verdadera relevancia al no existir hasta la fecha demasiados estudios que midan tasas de emisiones difusas, y menos, en el campo de aplicación que nos concierne.

Esto ha permitido a gestores y directores de planta, poder aplicar estrategias y medidas correctoras para la reducción de dichas emisiones, basándose en medidas sistemáticas y no puntuales y al comportamiento "climático" en el entorno en el que se ubican.

A la hora de realizar las distintas simulaciones, se ha tenido especial cuidado en la incorporación de factores que pueden ser identificados en relación al impacto por olor y que deberían ser tenidos en cuenta a la hora de aplicar un modelo de dispersión. Entre otros, podríamos destacar:

- *Frecuencia* (referida al número de veces, consecutivas o no, en que el olor se detecta en un determinado periodo).
- Intensidad (cuantifica el olor mediante cálculos del promedio y del máximo, o de otros parámetros, para determinados escenarios meteorológicos y de funcionamiento de la planta).
- *Duración* (referido a la persistencia de concentración en distintos puntos topográficos para intervalos de concentración consecutivos).
- Molestias a la población con relación a la calidad de vida (desde el punto de vista hedonista). Se trata de buscar las distintas características de concentración existentes entre día y noche, como resultado de las diferentes condiciones turbulentas (a partir de la medidas de cada torre meteorológica), y de operación de cada planta.

Se pretende, de esta manera, la utilización de la modelización numérica, como una herramienta que pueda ser aplicada para caracterizar el impacto por olor en las EDAR, dando solución a los distintos criterios que se han comentado anteriormente. Entre ello se destacan:

- 1. Niveles de concentración promedio y máximo
- 2. Estimación indirecta de las tasas de emisión
- 3. Evolución temporal del modelo
- 4. Frecuencias no consecutivas del contaminante
- 5. Patrones dispersivos y el establecimiento de impactos
- 6. Percentiles
- 7. Quejas

V.2 DESCRIPCIÓN DEL MODELO: CARACTERÍSTICAS TÉCNICAS

Las simulaciones numéricas, se realizaron con la aplicación DIMEDAR (para más detalles ver *Material Complementario G: Dimedar*).

Esta aplicación constituye un desarrollo interno realizado por la fundación CEAM para la EPSAR (contrato 03/11/99, ref.

salida 8732), a partir de códigos preexistentes. El modelo resuelve el problema de la dispersión atmosférica en un emplazamiento con topografía compleja, procedente de emisiones puntuales/superficiales a partir de información meteorológica relativamente simple y asequible.

Incorpora dos módulos, los cuales constituyen el grueso de la funcionalidad del sistema:

• Módulo climático

Contempla el problema de la dispersión a largo plazo. Se basa en una adaptación del modelo VALLEY de la EPA (Burt, 1977), que incorpora un algoritmo univariante de dispersión de pluma gaussiana de estado estacionario.

Permite estimar concentraciones promedio anuales (modo climático) o de 24 horas (modo rango corto) a partir de la matriz de estabilidades característica del emplazamiento. Por otro lado, tiene en cuenta la topografía del entorno en el cálculo de los valores de inmisión.

Como aspectos principales, utiliza los esquemas de dispersión de Pasquill-Guifford y uno de los modelos de sobreelevación de Briggs (Briggs, 1975), con limitación de mezcla vertical.

Da la opción de seleccionar esquemas de dispersión representativos de entornos urbanos o rurales. Genera valores de inmisión promedios sobre una retícula rectangular (coincidente con el modelo del terreno utilizado), pudiendo elegirse entre los diversos modos de salida (valores medios, percentiles o porcentajes de ocurrencias).

• Módulo mesoescalar

Trata el problema de la dispersión de corto rango, en la que juega un papel fundamental la variación del campo meteorológico (ciclos de brisa, etc.).

Se basa en una adaptación e integración de dos códigos independientes. El primero es un modelo meteorológico de diagnóstico, no divergente, al que se añade un modelo de difusión de tipo bocanada ("puff").

Incorpora también la formulación de Pasquill-Guifford para describir la dispersión y los algoritmos de Briggs para estimar la sobreelevación. Esta sobreelevación se calcula definitivamente para cada "puff" en el momento de la emisión, siendo las componentes verticales del campo de vientos, las responsables del movimiento vertical de los mismos durante el resto del proceso dispersivo.

Las simulaciones se realizan sobre periodos de tiempo variables, tomando una base horaria como promedio de trabajo (no modificable). El modelo considera las magnitudes como representativas de intervalos horarios, admitiéndose únicamente una variación gradual entre periodos consecutivos.

Incluye topografía compleja y trabaja sobre una matriz tridimensional fija de $50 \times 50 \times 15$ nodos, en la que se debe incluir todo el escenario de interés.

El modelo proporciona valores de inmisión a nivel del suelo, sobre una malla coincidente con la topográfica para cada una de las horas de simulación.

Como información complementaria se obtiene también para cada hora valores de vientos sobre la misma matriz (a un nivel seleccionable por el usuario) y las posiciones y características principales de los "puffs" activos al final del intervalo de referencia.

No se han abordado en una primera aproximación, las simulaciones climáticas en emplazamientos como los estudiados, ya que en la mayoría de los casos, se trata de zonas con topografía relativamente plana en su entorno y sometida a circulaciones típicas de brisa, con un marcado ciclo diurno, por lo que estas zonas no quedan bien representadas por los esquemas de dispersión climáticos.

Las simulaciones de corto rango se caracterizan por una gran resolución temporal, proporcionando estimaciones de los niveles de inmisión mucho más ajustadas a la realidad al incorporar una representación más adecuada de los procesos físicos que condicionan la dispersión de los efluentes gaseosos.

Como contrapartida, carecen de la representatividad estadística que requieren ciertos estudios, al realizarse necesariamente en un intervalo concreto de tiempo (frecuentemente no puede ser muy largo por limitaciones de cálculo), y no son fácilmente comparables con los parámetros normativos, que habitualmente se formulan sobre una base de revisión anual.

Una manera por tanto de aproximarse a la utilización de códigos de alta resolución temporal para propósitos

climáticos consiste en identificar escenarios meteorológicos repetitivos (patrones), y hacer recaer sobre los mismos, la cuestión de la representatividad.

Esta forma de trabajar, permite realizar un número limitado de ejecuciones sobre los representantes más característicos de las condiciones de transporte y difusión en la zona de estudio, extrapolando los resultados, al conjunto de condiciones climáticas a partir de la frecuencia de ocurrencia de los mismos.

Este planteamiento precisa una intensa labor de información meteorológica preprocesado de la para caracterizar dichos patrones, actividad que normalmente, exige una aproximación manual, ya que, aunque existen herramientas matemáticas teóricamente adaptadas a esta finalidad (análisis clúster, componentes principales, etc.), la productividad en este campo no ofrece aún resultados óptimos para realizar una automatización sin control de un observador experimentado, puesto que en ocasiones pudieran darse resultados matemáticamente posibles pero que en la realidad no tienen una interpretación física.

V.3 AJUSTE DEL MODELO

Para la puesta a punto del modelo DIMEDAR, hubo que realizar primeramente, un estudio de validación del modelo en profundidad. Dicha validación consistió en la búsqueda de las adecuadas parametrizaciones para cada caso concreto, además de un riguroso estudio de "chequeo" cada vez que se le incorporaron al modelo nuevos desarrollos y capacidades.

Para dicho propósito se realizaron los ajustes de los parámetros necesarios en las tres fases de la modelización (preprocesamiento, procesamiento y post-procesamiento).

V.3.1 PREPROCESAMIENTO: AJUSTE DE PARÁMETROS DISPERSIVOS

Capa límite

Variaciones espaciales de la profundidad de la PBL y su estructura, ocurren como resultado de los cambios en los usos del suelo y la topografía.

Así mismo, variaciones espaciales de variables meteorológicas influenciadas por sistemas mesoescalares y a gran escala también provocan variaciones.

Para superficies aproximadamente planas y homogéneas, la PBL se puede considerar horizontal y homogénea. Esta aproximación, se considera en concreto en la aplicación del modelo (Pal Arya, 2009).

Hay básicamente tres pasos en la construcción que el modelo efectúa del campo tridimensional de vientos (modelo Mathew/5.0):

- Se extrapolan los datos de entrada superficiales al nivel de referencia. La velocidad sigue una ley potencial (γ_{sl} , exponente para la capa superficial), mientras que la dirección no cambia respecto a los datos de entrada. A continuación se interpola horizontalmente para construir la malla de vientos en 2D en el nivel de referencia.
- El método del perfil se extiende, si es necesario, por encima de la capa intermedia según una velocidad y dirección constantes dadas a partir de los vientos en altura, y por debajo hasta la capa superficial, usando una ley potencial (γ_{bl}, exponente para la capa intermedia).
- Por último, para cada punto de la columna de la malla, se interpola horizontalmente a partir de los perfiles verticales cercanos. Las observaciones en altura no afectan a la capa superficial, pero su efecto sí que aumenta con la altura hasta que domina completamente el régimen geostrófico.

En el cálculo de la altura de la capa límite planetaria, se tuvo especial cuidado, que su valor no estuviera influenciado por los efectos de superficie ni por los intercambios de calor que se producen dentro de la capa de mezcla.

Por otro lado, al constituir el tope vertical de la simulación se ha considerado que el intervalo de malla no fuera excesivamente grande.

Capa de mezcla

La altura de la capa de mezcla a la 12:00H, se identifica normalmente con la base de una inversión elevada o capa estable, y se asume que la mezcla turbulenta causada por la turbulencia convectiva y mecánica se extiende hasta la base de la inversión.

Una débil circulación de brisa marina lleva a puntos de rocio bajos disminuyendo la ascensión del aire e induciendo una turbulencia térmica más débil dentro de la capa. Bajo condiciones convectivas, la capa de mezcla se identifica con la base de esta inversión elevada, o como la altura de una importante reducción en la humedad del aire, a menudo acompañado de cizalla del viento (Cost Action 710).

El método de Holzworth o método de la parcela, es usualmente el empleado para dicho cálculo, si bien, debe cumplir ciertas condiciones para que se obtengan resultados satisfactorios.

Dicho método hace uso de la temperatura máxima del día, aproximadamente a las 12:00 H, de forma que la adiabática que pasa por esa temperatura cortando el perfil del sondeo nos da la altura de la capa de mezcla.

Se trata de un método bastante sensible a la temperatura superficial, poseyendo una gran incertidumbre si no hay una pronunciada inversión en el tope de la CBL.

Los perfiles deben cubrir hasta los 2-3 kilómetros con una resolución temporal de 1 hora o menor para describir su evolución, y una resolución vertical de aproximadamente 10-30 metros para evitar incertidumbres de más del 10 – 20 %, sobre todo para bajas capas de mezcla. (<250 metros).

Se debe tener en cuenta, que las variaciones espaciales de la capa de mezcla son debidas sobre todo a la escala de sistemas sinópticos. Añadir efectos de subsidencia puede hacer que disminuya la capa de mezcla considerablemente (Seibert, P. *et al.*, 2000).

A la hora de elegir los sondeos que sirvieron para obtener la capa de mezcla, se tuvo en cuenta, no sólo la cercanía al emplazamiento, sino también la variación que se produciría en la altura de la capa de mezcla al considerar la humedad del aire.

En el cálculo de la capa de mezcla, también se tuvo en cuenta el efecto de la estratificación térmica de capas atmosféricas, en la que se produce una intensa mezcla vertical por procesos convectivos o turbulentos, más intensos por ejemplo en verano al darse una mayor insolación.

Se promedió capa a capa, de forma ascendente desde el suelo hasta el valor en el que coincidía con el promedio de la razón de mezcla proporcionado por los sondeos, interpolando entonces para obtener su valor aproximado.

La mezcla convectiva y turbulenta facilita la dispersión de los contaminantes en la atmósfera baja. El alcance vertical a la que ocurre dicho mezclado varía diariamente de una a otra estación del año, afectándole también las características topográficas. Cuanto más grande sea el alcance vertical, mayor será el volumen de la atmósfera disponible para diluir la concentración de los contaminantes. Los efectos de flotación térmica determinan la altura de la capa de mezcla, que se conoce como la altura máxima de mezcla.

En general, se dispuso de datos de un periodo de un mes, por lo que se pudo disponer de la altura máxima promediada de mezcla.

Por otro lado, se observó que la variación diurna de la altura de capa de mezcla experimentaba una variación mucho menor sobre el mar que sobre la tierra debido a la gran capacidad calorífica del agua.

Se trató de modelizar los datos de la evolución temporal de la capa de mezcla para Murcia a lo largo de un día representativo de cada mes, así como observar su evolución de forma mensual y a lo largo del año.

Como consecuencia de la variación diurna que experimenta la altura de la capa de mezcla, debido en su mayor parte a la turbulencia térmica, parecía intuitivo tratar de ajustar la altura de capa de mezcla según la radiación solar (De Oliveira *et al.*, 2002).

Dicho esto, se ajustaron los resultados obtenidos con los sondeos por una función de tipo sinusoidal. Variando entre un máximo y un mínimo, entre verano e invierno respectivamente, aunque con variaciones debido fundamentalmente a la entrada de sistemas sinópticos.

Por otro lado, para cada mes se calculó la capa de mezcla promedio, con valores a las 00:00 y a las 12:00 horas. Se presenta los resultados a modo de ejemplo para los meses de enero a junio del 2003, periodo en el que se incluyen buena parte de las simulaciones realizadas (Tabla V.1)

Mes	Promedios (metros)		
	00:00 horas	12:00 horas	
Enero	420 ± 30	590 ± 30	
Febrero	580 ± 30	550 ± 30	
Marzo	510 ± 30	710 ± 40	
Abril	420 ± 30	290 ± 10	
Mayo	560 ± 30	710 ± 40	
Junio	430 ± 30	380 ± 20	

Tabla V.1 Promedios a las 00:00 y 12:00 horas de la capa de mezcla para los primeros seis meses del año 2003

Criterios de estabilidad

El modelo utiliza el criterio del gradiente de la temperatura a la hora de calcular la estabilidad en cada periodo horario, empleándose dicha clasificación, para estimar los coeficientes de dispersión que se emplean dentro de las curvas empíricas del esquema de Pasquill-Guifford.

La estabilidad se clasifica a partir de los datos en superficie por la diferencia de temperatura, el número de Richardson u otros parámetros de estabilidad (Wang, 1981).

Otro aspecto importante a tener en cuenta con respecto a la estabilidad, es la rafagosidad del viento.

La rafagosidad vertical presenta valores que se aproximan a los máximos de cada nivel después del mediodía, debido a la contribución de la turbulencia térmica a la variación diurna.

Desde el punto de vista teórico y experimental, se observa que la turbulencia y las ráfagas de viento están relacionadas entre sí. En principio los parámetros de dispersión, y en concreto los parámetros de estabilidad, variarán localmente según el emplazamiento por estar relacionada la rafagosidad con la rugosidad del terreno y con la altura sobre éste, decreciendo ésta al aumentar la altura.

En estudios locales y de baja atmósfera, es más aconsejable la utilización de temperaturas potenciales en lugar de temperaturas reales, debido a que aquellas incluyen el gradiente adiabático de temperaturas (0,98°C/100m), siendo más inmediata la determinación de la estabilidad de estratificación.

Torres meteorológicas con datos en varios niveles (como es el caso), permiten obtener la variación del número de Richardson con la altura, valor interesante a la hora de calcular la estabilidad en la baja atmósfera, así como observar su evolución temporal.

Cabe esperar que la intensidad de turbulencia, disminuya en términos globales con la altura al ir desapareciendo progresivamente la influencia del terreno.

En las capas de la atmósfera donde los efectos térmicos comienzan a tener importancia, la inestabilidad atmosférica produce una mayor intensidad de turbulencia, contribuyendo al aumento de la agitación turbulenta entre los distintos niveles de la capa límite y favoreciendo el intercambio de contaminantes entre estas capas, lográndose una mejor difusión de éstos.

Se establecen unos criterios propuestos por la EPA para el gradiente térmico vertical y la desviación típica de la dirección horizontal del viento ($\sigma\theta$) (Tabla V.2 y Tabla V.3), criterios por otro lado determinados por condiciones estacionarias, viento a 10 metros, terreno no accidentado y rugosidad de unos 15 centímetros. Para otras condiciones dichos parámetros fueron susceptibles de sufrir variaciones y por tanto fueron modificados.

Gradiente térmico vertical (°C/100m)	Clase de estabilidad	Pasquill
<-1,9	Extremadamente inestable	A(1)
-1,9 a -1,7	Inestable	B(2)
-1,7 a -1,5	Ligeramente inestable	C(3)
-1,5 a -0,5	Neutral (indiferente)	D(4)
-0,5 a 1,5	Ligeramente estable	E(5)
>1,5	Estable	F(6)

Tabla V.2 Criterios de estabilidad según el gradiente térmico vertical

σθ	Clase de estabilidad	Pasquill
>22,5°	Extremadamente inestable	A(1)
17,5º - 22,5º	Inestable	B(2)
12,5º - 17,5º	Ligeramente inestable	C(3)
4,5º - 12,5º	Neutral (indiferente)	D(4)
3,8º - 7,5º	Ligeramente estable	E(5)
<3,80	Estable	F(6)

Tabla V.3 Criterios de estabilidad en función de la desviación típica de la dirección horizontal del viento. Para la condición de neutralidad el modelo diferencia entre condiciones de día y noche

Para cada simulación, las frecuencias de las clases de estabilidad fueron calculadas para el número máximo de horas posibles. También se calculó el valor medio de la intensidad de turbulencia en el periodo considerado.

Según el criterio del gradiente de la temperatura, se tiende hacia las condiciones de mayor estabilidad, mientras que, según la desviación estándar de la dirección horizontal del viento, las frecuencias están más repartidas según la estabilidad dominante. Hay que tener en cuenta que se trata de medidas diurnas y nocturnas, tomadas para los días de muestreo, por lo que su respuesta varía notablemente.

Coeficientes de dispersión

Los coeficientes de dispersión son parámetros importantes a la hora de estimar las concentraciones derivadas de los modelos de dispersión.

El empleo de datos horarios de la velocidad del viento, junto con la desviación estándar de la dirección horizontal, proporcionaba mejores resultados que el método estándar basado en la estabilidad calculada a partir del gradiente vertical de temperaturas.

El método estándar (esquema de Pasquill-Guifford) basado en un único criterio de estabilidad, sobrestimaba las concentraciones máximas e infravaloraba las laterales vistas en círculos concéntricos. Aunque esquemas locales, proporcionan a priori mejores resultados, había que tener en cuenta que se aplican para condiciones estables. Teóricamente, no habría problemas para su uso bajo condiciones de inestabilidad, aunque se deberían comprobar con series de datos representativos de condiciones inestables.

Bajo una buena aproximación, las fluctuaciones horizontales del viento se pueden considerar isotrópicas, por lo que la desviación estándar de la componente lateral y longitudinal del viento se puede considerar equivalente.

El modelo isótropo Gaussiano (IGM) asume que la componente lateral y longitudinal de la componente horizontal de la velocidad del viento son variables aleatorias descritas por una función de distribución gaussiana, estadísticamente independientes y de igual varianza.

La dificultad de establecer un criterio único en cada emplazamiento y en cada período se puso de manifiesto, así como la conveniencia de hacer un criterio mixto entre el gradiente de temperaturas y la desviación estándar de la dirección horizontal del viento.

Esto requirió, tener las desviaciones horizontal y vertical de la dirección del viento proporcionadas por anemómetros más sofisticados.

Finalmente, se emplearon esquemas ampliamente utilizados. En concreto, el modelo trabaja con tres algoritmos de dispersión: para dispersión inicial, dispersión a corto plazo y a largo plazo.

Una vez que el *puff* se emite desde la fuente, puede crecer según dos esquemas:

- <u>Esquema de Pasquill-Guifford (Turner, 1985</u>), que caracteriza la dispersión en función de la estabilidad y la distancia. Utiliza las curvas empíricas de Pasquill y la clasificación de estabilidad para estimar los coeficientes de los parámetros de dispersión. Las clases de estabilidad se introdujeron numéricamente al modelo, en base a los datos de las torres meteorológicas empleando la aplicación DMDMETEO.
- <u>Esquema local (Gryning, 1987)</u>, relaciona directamente la difusión con la turbulencia y es dependiente del tiempo. La desviación estándar de la distribución horizontal de la concentración, es función de la desviación estándar de la

componente horizontal del viento, del tiempo de emisión del contaminante y de una función adimensional dependiente del tiempo (Weber, 1998)

Para distancias pequeñas a la fuente, el crecimiento del *puff* es lineal con respecto al tiempo, pasando a ser proporcional, a la raíz cuadrada para largas distancias.

En general puede decirse que los *puffs* individuales, preferentemente se dispersan en la dirección horizontal, alineándose con el viento medio de cizalla dentro del nivel de transporte. Esto se debe en parte a que la probabilidad de que se produzcan los remolinos más grandes no se da en la vertical, sino en la horizontal, donde entonces se necesitan corregir para tiempos promedios distintos de 10 minutos.

Perfiles verticales de la velocidad y dirección del viento, ayudarían a simular con mayor precisión la dispersión de contaminantes en la baja atmósfera.

Así, pequeños cambios sobre la capa superficial, moverán al *puff* en una dirección diferente, que llevará a obtener impactos en áreas superficiales diferentes de las condiciones de dirección de la torre meteorológica (Walcek, 2002).

Vientos en altura

Los datos de viento en altura, se obtuvieron a partir de los sondeos de Murcia a las 00:00 y a las 12:00 UTC a 1000 metros para los días que se incluían en cada simulación.

Los sondeos proporcionaron medidas con poca resolución y en niveles no homogéneos, por lo que se optó por interpolar entre alturas para obtener la velocidad y dirección a 1000 metros.

Se introdujo una velocidad y dirección promedio en cada caso, siempre que las variaciones no fueran muy acusadas.

La entrada de datos en altura con los sondeos de Murcia, hizo patente que no introducir datos consecuentes con los medidas proporcionados por las torres meteorológicas repercutía en las salidas de vientos generados, haciendo que los vientos obtenidos con el modelo en el nivel de la torre no fueran tan satisfactorios, sin duda, debido al forzamiento que se producía con los vientos en altura. En nuestro caso, este efecto no es de gran importancia, teniendo en cuenta el escaso poder ascensional de las emisiones que son objeto de estudio y su impacto en su entorno cercano. No obstante, estas discrepancias sí que se tuvieron en cuenta para su corrección y la posterior interpretación de los resultados.

Se representó el viento y la dirección en superficie para el período completo en cada simulación, junto con los vientos y direcciones en altura, permitiendo ver, cómo el modelo responde en intervalos de una hora a los datos meteorológicos introducidos.

Se observaron las características generales del viento para el nivel de 850 hectopascales a partir del modelo del NCEP AVN⁹. Los vientos para Murcia en el nivel de 1000 metros no son muy variables por lo que se puede promediar en el periodo considerado. En cada campaña se visualizaron los datos en altura de los sondeos para ver su evolución.

V.3.2 PROCESAMIENTO: EJECUCIÓN DEL MODELO

Condiciones de ejecución del modelo

Se introdujo una adaptación al modelo que consistió en introducir una modulación horaria en las tasas de emisión, la cual se explica en apartados siguientes (Llavador, 2012b; 2010b; Mantilla, 2012).

La ventana de simulación que se utilizó en los trabajos fue de 4 kilómetros de lado centrada aproximadamente en la planta depuradora. Ello determina automáticamente la resolución espacial de los resultados, condicionada por la dimensión fija de la malla de 50 x 50 puntos, lo que supone que las salidas del modelo corresponden a distribuciones espaciales de los valores de inmisión promedio de una hora, con una resolución espacial de 80 metros.

Normalización

Una parte importante a la hora de la realización de las simulaciones, fue tomar en cuenta, la normalización del factor que modula la tasa de emisión durante todo el periodo de trabajo. Según la metodología propuesta, los resultados se comparan con las medidas experimentales para obtener la

⁹ AVN Model: Modelo de aviación norteamericano, conocido actualmente como GFS (Global Forecast System); NCEP: National Center for Enviromental Prediction

mejor estimación de la tasa de emisión promedio durante el periodo.

Es importante, por lo tanto, que en los diferentes modelos horarios de emisión que se propusieran, la aportación total fuera la misma, para que no hubiera diferencias debido a la propia cantidad de masa puesta en juego.

Debido a esto, fue necesario proceder a una normalización de los diferentes esquemas de emisión, de manera que, al cabo de la totalidad de las horas de simulación, la masa total emitida sea igual a la puesta en juego cuando se considera una tasa constante y unitaria.

En este punto existen dos posibilidades de actuación: normalizar cada día individualmente o bien normalizar el periodo completo.

En el primer caso se forzaría a que cada jornada se emitiese igual cantidad de masa (aunque la variación temporal fuese diferente), mientras que en el segundo supuesto se mantendrían diferencias diarias de emisión (aunque asegurando el balance final).

Se prefirió en todos los casos el segundo de los procedimientos, en tanto no existía una razón de peso para forzar a que todos los días mantuviesen las emisiones constantes, más allá de los condicionantes determinados por las magnitudes consideradas. Como parte final del proceso se procedería a la comparación de las concentraciones promedio predichas por el modelo con los valores medidos en los puntos donde se situaron los dosímetros, observando si la correlación mejoraba entre los diferentes esquemas.

V.3.3 POSTPROCESAMIENTO: INTEPRETACIÓN DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS POR EL MODELO

Control de calidad de las simulaciones

La posibilidad de realizar un control de calidad de las medidas se ha limitado a la comparación con medidas reales disponibles, y éstas quedan limitadas a las medidas de viento de la torre meteorológica y a las de concentración promedio proporcionada por los dosímetros pasivos.

Dado que el modelo se ejecuta en dos fases, generándose primero el campo de vientos, para proceder en una segunda etapa, a la simulación de la dispersión de los efluentes, se comprobó, de manera cualitativa, que los resultados del campo de vientos, fueran suficientemente parecidos a las medidas de la torre meteorológica, extraídos aquellos, de la malla tridimensional de resultados en el mismo punto geométrico de ubicación de la instrumentación.

Para alcanzar un resultado considerado satisfactorio, se realizaron numerosas ejecuciones del campo de vientos para cada periodo de simulación, ajustando algunos de los parámetros de entrada, cuya modificación es posible en los ficheros de configuración.

Representatividad temporal

Un aspecto importante a la hora de valorar los resultados, reside en asignarles un grado de representatividad temporal más allá del corto periodo de simulación utilizado, inherente a la utilización de herramientas de corto rango.

Para esta valoración, se ha realizado una aproximación cualitativa a partir de las diferentes magnitudes disponibles, comparando los valores registrados durante los periodos de medida, frente a los característicos de la población completa en el mismo emplazamiento.

Se ha tratado por lo tanto, de utilizar el banco de datos completo disponible para cada estación meteorológica como referente del comportamiento climático, y contrastar con aquellos, valores ambientales registrados durante los episodios considerados.

V.4 ESTIMACIÓN INDIRECTA DE EMISIONES GASEOSAS

Una de las mayores potencialidades de la metodología propuesta, es la posibilidad de proporcionar valores de emisión.

Por la propia naturaleza de las emisiones en una EDAR, se ha considerado que la dispersión está suficientemente bien captada con la información meteorológica de que se dispone, y que alimenta al modelo. Mientras que gran parte de los errores cometidos, procedían del hecho de trabajar sobre unas tasas de emisión unitarias (utilizadas por defecto en el modelo) que no reflejaban de manera realista, la variación temporal de las mismas. Para minimizar dicho error, se ejecutó repetidamente la aplicación DIMEDAR, en las que previamente se definieron unos modelos de variación temporal de las emisiones para la obtención de un mejor ajuste entre los datos experimentales y los numéricos (Espinos, 2008).

Véase las pruebas realizadas con diferentes modelos de emisión temporal en *Material Complementario H: Emisión Temporal*.

V.4.1 MODELO DE EMISIONES DE VARIABILIDAD TEMPORAL

Por la propia naturaleza de las emisiones producidas en una planta depuradora, parecía más realista, intentar introducir una variación temporal en las tasas de emisión, de manera que se mejorase el ajuste de las simulaciones a las medidas experimentales. Esto, nos permite evaluar las posibles variaciones que se introducen en el impacto del entorno al poder considerar distintas condiciones de emisión.

Una aproximación general se podría ajustar al esquema (Ecuación V.1):

$$Q(t) = QA(t)D(t) + R$$
 (Ecuación V.1)

Dónde:

Q(t)	Modelo de emisión propuesto dependiente del tiempo
Q	Nivel promedio de emisión resultado del ajuste experimental y el modelo
A(t)	Función normalizada de modulación temporal de emisiones. Incorpora la contribución a la emisión de parámetros ambientales
D(t)	Función normalizada de modulación temporal de emisiones. Incorpora la contribución de parámetros de operación de la planta
R	Término que supondría emisiones de fondo

Como aproximación a un modelo de variabilidad temporal, parece razonable tratar la generación de olor, como un

proceso físico de evaporación de los compuestos de interés desde el seno del medio líquido hacia la atmósfera.

En esta primera aproximación, sólo se ha considerado la modulación temporal que pudieran incorporar los parámetros ambientales, sin tenerse en cuenta la posible contribución que pudiesen tener los parámetros de operación de planta. El esquema finalmente considerado ha sido el siguiente (Ecuación V.2):

$$Q(t) = QA(t) + R$$
 (Ecuación V.2)

En los trabajos de modelización presentados se ha trabajado con varios modelos de emisión variable A(t).

El primero de ellos, ha sido un esquema general basado en la formulación propuesta por Penman (P_{PENMAN}), y que posteriormente fue adaptada por Quintanar *et al.* (2009) y viene descrito por la Ecuación V.3.

$$P_{PENMAN} (T, P, u, P_{vap}, t) = P_{ENER} (T, P, t) + P_{AERO} (T, u, P, P_{vap}, t)$$
(Ecuación V.3)

Esta formulación consta de dos contribuciones. La primera tiene una base aerodinámica (P_{AERO}), en la cual la evaporación se produce por un transporte turbulento de vapor por un proceso de eddy-difusión (Ecuación V.4).

$$P_{AERO}(T, u, P, P_{vap}, t) = \frac{\gamma(T, t, P)}{\Delta(T, t) + \gamma(T, t, P)} C_e u_i(t) \left(\frac{0.622}{R_d T_i(t)}\right) \left(P_{vap}(T, t) - P_{aire}(T, t)\right)$$
(Ecuación V.4)

La segunda aproximación es termodinámica, donde la evaporación, es la consecuencia de un aumento de temperatura debido a la radiación incidente y al intercambio de flujos de energía (P_{ENER}).

$$P_{ENER}(T, p, t) = \frac{\Delta(T, t)}{\Delta(T, t) + \gamma(T, t, P)} \left(\frac{R_n(t) - G(T, t)}{L}\right)$$
 (Ecuación V. 5)

$P_{PENMAN}\left(T,P,u,P_{vap}t\right)$	Evaporación de una superficie por el método de Penman [kgm ⁻² h ⁻¹]
$P_{AERO}\left(T, u, P, P_{vap}, t\right)$	Evaporación de una superficie por el modelo aerodinámico [kgm ⁻² h ⁻¹]
$P_{ENER}(T, p, t)$	Evaporación de una superficie por el modelo energético [kgm ⁻² h ⁻¹]
$\Delta(T,t)$	Pendiente de saturación de la curva de presión de vapor [kPaK ⁻¹]
$\gamma(P,T,t)$	Constante psicométrica [kPaK ⁻¹]
$R_n(T,t)$	Radiación neta [Wm ⁻²]
G(T,t)	Calor almacenado [Wm ⁻²]
L	Calor latente de vaporización del H ₂ S [Jkg ⁻¹]
C_e	Coeficiente de transferencia del H ₂ O para condiciones neutras [adimensional]
$u_i(t)$	Velocidad del aire [ms ⁻¹]
R_d	Constante de los gases para aire seco: 287.04 [Jkg ⁻¹ K ⁻¹]
$T_i(t)$	Temperatura del aire [K]
$P_{vap}(T,t)$	Presión de vapor de saturación del H ₂ S [kPa]
$P_{aire}(\overline{T,t})$	Presión del aire [kPa]

Dónde:

En el uso de las ecuaciones V.2, V.3, V.4 y V.5 se han realizado las siguientes hipótesis:

- Se ha considerado para la realización de los cálculos, que el calor latente de vaporización, es constante para todo el periodo de simulación.
- Se ha supuesto que todo el sulfhídrico que se va produciendo va escapando a la atmósfera.
- Se ha despreciado la presión de vapor de H₂S en aire, en otras palabras, se ha considerado que la atmósfera contiene inicialmente una cantidad de sulfuro de hidrógeno insignificante.

- Para los cuatro modelos de emisión utilizados en los trabajos de modelización (modelo de emisión constante, modelo de emisión variable de Penman, modelo de emisión variable de contribución aerodinámica y modelo de emisión variable de contribución energética) las emisiones de fondo (R) se han considerado nulas.
- Por último apuntar, que las expresiones analíticas para los distintos parámetros de las distintas ecuaciones de los modelos de emisión utilizados se desarrollan con detalle en el Anexo A.

V.4.2 ESTIMACIÓN DE EMISIONES PROMEDIO

Para la estimación de emisiones promedio se utilizaron los valores de concentración proporcionados por los dosímetros, comparándolos con los valores resueltos por el modelo en las mismas ubicaciones geográficas e integradas durante las mismas horas de exposición.

La comparación de los resultados se llevó a cabo realizando la mediana de los cocientes entre las medias experimentales y los resultados del modelo.

De dicho resultado se obtiene un factor¹⁰, que representa la emisión que ajusta medidas y simulaciones.

Estos factores (Q) constituyen una vía indirecta para estimar la tasa de emisión promedio¹¹ de una EDAR.

El análisis de las diferencias entre las medidas proporcionadas por los dosímetros y los resultados del modelo se hizo en base al cálculo de diversos estadísticos (ver anexo B).

 $^{^{10}}$ Todas las salidas que se presentan a lo largo de la tesis, ya están afectadas por dicho factor de corrección.

 $^{^{11}\ {\}rm Las}$ tasas presentadas a lo largo de la tesis corresponden a tasas de sulfuro de hidrógeno

V.4 RECAPITULACIÓN

- Se ha presentado el modelo numérico DIMEDAR, desarrollo interno realizado por la Fundación CEAM, utilizado para los trabajos de simulación. Este modelo numérico consta de dos módulos: uno climático y otro mesoescalar. El módulo mesoescalar a la vez consta de dos módulos, uno meteorológico que crea el campo de vientos tridimensional y otro de dispersión, encargado de dispersar la masa contaminante.
- Se han descrito y estudiado los parámetros más susceptibles de modificar la dispersión y el grado en el que pudieran afectar.
- Se han mostrado los parámetros de entrada al modelo mesoescalar detallando el proceso de normalización empleado para asegurar que durante toda la simulación se conserva el principio de conservación de la masa (toda la masa emitida es igual a la masa dispersada).
- Se ha expuesto en forma de anexo los principales estadísticos que se han utilizado para comparar la bondad de los resultados en función del esquema dispersivo de variabilidad horaria.
- Se ha desarrollado una adaptación al código empleado, que consiste en la aplicación de un factor de variabilidad horaria directamente proporcional a la tasa de emisión que se suministra como parámetro de entrada al modelo.
- El grado de sensibilidad del modelo varía según la variable considerada, y las fuentes de error varían en orden decreciente según:

Dirección de viento: pequeñas diferencias en la dirección del viento (del orden de 10 grados) tienen un efecto importante en las concentraciones del modelo, sobre todo en escalas horizontales pequeñas, como es nuestro caso (4 kilómetros).

Topografía: hay que diferenciar entre la topografía real del entorno de cada EDAR, con respecto a la topografía que se introduce en el modelo. Las variaciones que existen entre ellas son claves y determinan las variaciones en el campo de vientos esperado, así como variaciones en las concentraciones.

Parámetros de turbulencia: la mayoría se han obtenido realizando un tratamiento semiempírico.

Velocidad del viento: El modelo en general, es capaz de reproducir el campo tridimensional de vientos con errores menores del 2%. Dicho error aumenta considerablemente con velocidades consideradas calmas (vientos menores de 0,5 m/s).

- Por otro lado, se puso especial cuidado al comparar los resultados del modelo con los proporcionados por los dosímetros, al ser promedios horarios y promedios de seis días respectivamente. El análisis de las discrepancias entre los datos observados y los del modelo se hizo por comparaciones estadísticas.
- Una de las mayores potencialidades de la metodología propuesta fue la posibilidad de proporcionar valores de emisión. Esto tiene verdadera relevancia por dos motivos. El primero pone de manifiesto la dificultad de medir emisiones difusas, y el poder "sistematizar" dicho proceso en una combinación de medidas experimentales y simulaciones numéricas, permite tener un mayor conocimiento del que se tenía hasta el momento. El segundo motivo, pone de relevancia la estimación de las tasas de emisión (que aunque tasas de emisión promedio) permiten cuantificar (no con unidades de olor, sino de una forma cuantitativa) aquellos procesos susceptibles de mejora, proporcionando una herramienta versátil y fácil de usar para gestores, administradores...
- Por último, destacar la ausencia hasta el momento de tasas de emisión en instalaciones de este tipo. Este hecho es de gran importancia al poder dar una estimación promedio de la contaminación producida por este tipo de instalaciones. Esto puede permitir, a la hora de crear una legislación específica para la problemática de olores, establecer límites de emisión.
- Por otro lado, la estimación de las tasas puede ayudar a encontrar una relación (ya sea directa o indirecta) entre concentraciones y unidades de olor, abriendo un campo inexistente hasta el momento.

CAPÍTULO SEXTO

Resultados

Las verdades que revela la ciencia superan siempre a los sueños que destruye.

Joseph Ernest Renan (1823-1892)

El extenso número de medidas, de campañas realizadas a lo largo de diversos años, y la cantidad de localizaciones objeto de estudio, hacen imposible mostrar todos los resultados obtenidos.

Por motivos de extensión y de claridad para el lector, se ha preferido mostrar algunos ejemplos representativos de los resultados (mostrando algunos casos más en el material complementario suministrado en la presente tesis).

Por esta razón, se ha dividido este capítulo en cuatro subcapítulos que abordan todas las perspectivas del problema de contaminación por olores.

La estructura del capítulo por tanto queda de la siguiente manera:

- *Resultados en cuanto a medidas experimentales (R1)* Se presenta como caso ejemplo la evolución de los niveles históricos de sulfuro de hidrógeno y amoniaco para la EDAR de la Conca del Carraixet.
- Resultados usando captación forzada (R2)
 Los trabajos mediante captación forzada, tuvieron
 como objetivo la medida de la eficiencia en la
 eliminación de sulfuro de hidrógeno y amoniaco en los
 sistemas de desodorización de las distintas EDAR.
 Como ejemplo se presenta los trabajos realizados en
 la EDAR de la Vila Joiosa.
- *Resultados de la modelización numérica (R3)* En este capítulo se presentan los resultados en las mejoras de los modelos de emisión de variabilidad horaria incorporados al modelo y la cantidad de

contaminación (concentración de H_2S) que dichas instalaciones emiten al ambiente (tasas de emisión).

 Resultados de laboratorio (R4) Dichos resultados fueron encaminados al estudio de nuevas especies químicas que complementasen la información que nos suministran las especies hasta ahora estudiadas (sulfuro de hidrógeno y amoniaco).

RESULTADOS R1: MEDIDAS EXPERIMENTALES

CASO EJEMPLO: EVALUACIÓN Y CONTROL DE LOS NIVELES DE INMISIÓN DEL H₂S Y NH₃

VI-R1.1 MEDIDAS SISTEMÁTICAS CON DOSIMETRÍA PASIVA

Los principales objetivos de la realización de medidas sistemáticas con dosimetría pasiva fueron, por una parte, la estimación de la distribución espacial de las concentraciones, y por otro lado, la evaluación continua de los niveles de inmisión registrados.

La elección de la distribución de los puntos de medida, se apoyó básicamente en la distribución de la frecuencia de vientos, la topografía circundante y los trabajos previos realizados.

Aunque la distribución de vientos varía estacionalmente, se prefirió un diseño único de puntos de muestreo (en cada EDAR) para todo el periodo, a fin de poder comparar y posteriormente evaluar dichos niveles de inmisión.

A la hora de elegir los respectivos puntos, se prestó especial atención a los límites de la planta, puesto que a través de éstos, se realiza teóricamente la "exportación" de los olores hacia el exterior de la instalación.

Se procuró disponer de una serie de puntos de medida cubriendo el perímetro, de manera que se recorriera el mayor rango de direcciones posibles (según los puntos cardinales o bien según ejes perpendiculares referentes a las direcciones preferentes de flujo).

VI-R1.1.1 EDAR DE LA CONCA DEL CARRAIXET

Disposición de los puntos de medida

Para justificar la distribución de los distintos puntos de muestreo se realizó un estudio de la dinámica atmosférica (Figura VI-R1.1).



Figura VI-R1.1 Detalle de los respectivos puntos de muestreo (de izquierda a derecha y de arriba abajo: C10, C11, C15, C16/18)

El emplazamiento muestra un comportamiento característico de régimen de brisas, sin un efecto de canalización muy pronunciado. Un eje oeste-noroeste y otro este-sureste (WNW-ESE) marcarían aproximadamente las direcciones más frecuentes de los vientos, con un abanico de posibilidades más o menos amplio en torno a la misma (que se correspondería aproximadamente con la dirección del cauce del río).

Las direcciones procedentes de tierra, englobarían tanto los regímenes nocturnos de los ciclos de brisa, como las situaciones de poniente correspondientes a condiciones de circulación a macroescala, conteniendo simultáneamente la mayor proporción de vientos flojos y vientos intensos.

Éstos estarían en contraposición con los flujos del mar, en los que se integran, la parte diurna de las circulaciones de brisa y las situaciones de levante de mayor escala (Figura VI-R1.2).



Figura VI-R1.2 Rosa de vientos de la EDAR de la Conca del Carraixet

Medidas de H₂S. Evolución Temporal

Los puntos de muestreo CI10 y CI11 son dos de los puntos denominados "calientes" de la EDAR. Ambos se encuentran ubicados en la zona norte, donde están situadas el tipo de instalaciones en las que se puede generar H_2S .

El punto CI11 es el que registra en promedio los valores más altos de concentración, ya que, de todos los puntos de muestreo, es el que se encuentra más próximo a la línea de fangos y al edificio de pretratamiento, y además, está situado cercano a un decantador primario.

El punto CI10 presenta valores también altos, pero generalmente inferiores a CI11. Se encuentra situado más al este de la instalación, junto a un decantador secundario, pero también dentro de la zona de influencia de la línea de fangos, aunque más alejado del edificio de pretratamiento y de los decantadores primarios que CI11.

Los puntos CI15 y CI16/18 presentan valores de concentración de H_2S bastante más bajos, ya que se encuentran situados en la zona sur de la instalación, más alejados de los posibles focos de emisión del contaminante.

El punto CI15, al encontrarse situado cerca de un decantador primario, presenta valores algo superiores a CI16-18 que se encuentra más próximo a un decantador secundario y al reactor biológico (ver concentraciones Figura VI-R1.3).



Figura VI-R1.3 Evolución temporal de los niveles de concentración promedio para el periodo total de medidas disponibles de concentración de H_2S (años 2002 al 2011) para la EDAR de la Conca del Carraixet

Hay que destacar la importante disminución de los niveles de concentración de sulfuro de hidrógeno a partir de la realización de las obras de ampliación y optimización de la EDAR que tuvieron lugar entre el 2006-2007, pasándose de concentraciones máximas registradas en torno a los 500-600 μ g/m³, a los niveles actuales registrados que se mantienen en torno a los 100 μ g/m³.

Si observamos el gráfico anterior (Figura VI-R1.3), se observa que, en general, los máximos de concentración han disminuido notablemente, pero que los niveles promedio se mantienen del mismo orden o se incrementan. Este hecho, justifica un análisis más profundo del último periodo de años (medidas después de las obras realizadas durante los años 2006-2007).

Centrándonos en el periodo comprendido entre 2008 y 2010, se puede apreciar el carácter claramente estacional que presenta la depuradora para los puntos de medida.

Los valores más altos, se presentan en los meses centrales del año, de abril a agosto, unas veces teniendo un carácter más primaveral y otras en cambio más estival (Figura VI-R1.4).



Figura VI-R1.4 Evolución temporal anual para los niveles de concentración de H_2S (periodo 2008-2010) para la EDAR de la Conca del Carraixet

La diferencia de concentraciones registradas entre los distintos puntos de medida, es muy elevada, existiendo grandes diferencias, en algunos casos de alrededor de 100 μ g/m³ entre el valor máximo y mínimo medido en una misma campaña. Este hecho indica la gran variabilidad de concentraciones existente en el interior de la estación (Tabla VI-R1.1). Esta tendencia se ve más acentuada en los puntos CI10 y CI11, mientras que los puntos CI15 y CI16/17/18 muestran valores más homogéneos durante los treinta y seis meses de campaña.

6	C10 (x10)	C11 (x10)	C15 (x10)	C16 (x10)
Campanas	(µg/m³)	(µg/m³)	(µg/m³)	(µg/m³)
Abr-08	240 ± 30	160 ± 30	140 ± 30	160 ± 10
May-08	170 ± 20	200 ± 30	200 ± 30	170 ± 10
Jun-08	69 ± 10	230 ± 40	200 ± 30	270 ± 20
Jul-08	550 ± 60	200 ± 40	170 ± 30	140 ± 30
Sep-08	180 ± 30	310 ± 30	230 ± 20	250 ± 20
Oct-08	130 ± 20	320 ± 30	280 ± 20	390 ± 30
Nov-08	270 ± 30	210 ± 50	140 ± 30	240 ± 20
Dic-08	100 ± 10	220 ± 20	100 ± 30	170 ± 20
Ene-09	19 ± 5	110 ± 30	81 ± 15	130 ± 20
Feb-09		180 ± 30	140 ± 20	130 ± 20
Mar-09	28 ± 15	320 ± 30	230 ± 20	320 ± 20
Abr-09	48 ± 20	290 ± 30	280 ± 20	370 ± 30
May-09	2500 ± 800	170 ± 20	260 ± 20	190 ± 30
Jun-09	280 ± 70	230 ± 20	290 ± 30	200 ± 30
Jul-09	160 ± 20	330 ± 30	370 ± 30	350 ± 30
Sep-09	340 ± 60	170 ± 20	320 ± 20	280 ± 20
Oct-09	37 ± 15	250 ± 40	170 ± 30	220 ± 20
Nov-09	950 ± 200	360 ± 80	210 ± 40	160 ± 20
Dic-09	420 ± 100	220 ± 40	180 ± 30	160 ± 30
Ene-10	180 ± 60	120 ± 20	83 ± 20	52 ± 20
Feb-10	140 ± 40	110 ± 20	65 ± 20	88 ± 20
Mar-10	100 ± 30	180 ± 20	190 ± 30	170 ± 20
Abr-10	35 ±15	49 ± 15	79 ± 20	94 ± 15
May-10	37 ± 15	100 ± 20	88 ± 20	110 ± 20
Jun-10	110 ± 50	160 ± 40	130 ± 20	130 ± 20
Jul-10	39 ± 15	260 ± 30	310 ± 30	180 ± 20
Sep-10	250 ± 20	2540 ± 200	230 ± 20	240 ± 20
Oct-10	51 ± 20	190 ± 30	78 ± 20	100 ± 20
Nov-10	360 ± 30	230 ± 40	110 ± 20	130 ± 20

Tabla VI-R1.1 Datos brutos de concentración promedio de H₂S para cada punto de muestreo de la EDAR de la Conca del Carraixet (en μ g/m³)

Por otra parte, si se analizan los máximos anuales, el máximo primaveral es relativamente menor, mientras que los otros dos máximos (el estival y el otoñal) son muy elevados respecto de las concentraciones promedio anuales.

Es relevante la concentración registrada en las campañas del mes de noviembre (pico otoñal), puesto que dicha concentración es de la misma magnitud que el máximo estival. Dicho comportamiento no parece ser casual de un punto de medida, sino que por norma general, la concentración registrada en la totalidad de los dosímetros mantiene el mismo comportamiento estacional

Evolución espacial

En cuanto a las concentraciones promedio por puntos, se constata el punto CI11, como el punto de mayor concentración durante el periodo 2008-2010.

En general, el año donde se han registrado mayores concentraciones ha sido el 2009 (menos precisamente en el punto CI11 donde la concentración en el 2009 fue la menor de las registradas, no obstante pese a ese hecho, sigue siendo el punto de mayor concentración).

Se observa una disminución de la concentración en todos los puntos en 2010 (menos en el CI11 comentado anteriormente), siendo este último en promedio, el que menores concentraciones ha registrado (Figura VI-R1.5).



Figura VI-R1.5 Evolución espacial de la concentración promedio de H_2S en cada punto (periodo 2008-2010) para la EDAR de la Conca del Carraixet

Medidas de NH₃. Evolución Temporal

En cuanto a las concentraciones de amoniaco, se observa el comportamiento en gran parte homogéneo de las concentraciones en cada punto, diferenciándose en este sentido, de las concentraciones de sulfuro de hidrógeno (dónde en alguno de los puntos se registraron concentraciones que incluso se diferenciaban en un orden de magnitud).

En este caso, las concentraciones de amoniaco registradas oscilan en promedio entre 10-50 μ g/m³.

Es de destacar el periodo comprendido entre finales del 2006 hasta casi el verano del 2008, en donde las concentraciones de amoniaco prácticamente permanecen constantes (entre el rango de 15-20 μ g/m³), dentro de la enorme variabilidad de fluctuaciones en la concentración que registra (Figura VI-R1.6).



Figura VI-R1.6 Niveles de concentración promedio para el periodo total de medidas disponibles de concentración de NH_3 (años 2005 al 2011)¹² para la EDAR de la Conca del Carraixet

Si solo analizamos las concentraciones registradas en las campanas sistemáticas, no se observa una pauta tan clara como era el caso del sulfuro de hidrógeno (Tabla VI-R1.2).

Dicho periodo, no presenta máximos y mínimos de concentración definidos. Se sugiere, que dichos niveles concentración registrados, responden a condiciones o condicionantes ambientales durante el tiempo de muestreo, en contraposición a las concentraciones de sulfuro de

¹² Las medidas disponibles de concentración de amoniaco van desde el 2005 al 2011 y no desde el 2002 al 2011 como el sulfuro de hidrógeno, puesto que la medida de amoniaco se incorporó a las medidas de campo más tarde.

hidrógeno registradas, que respondían al parecer a un patrón mucho más definido, asociado en parte más a procesos y operaciones realizadas en la planta que a condiciones ambientales puntuales acaecidas durante los periodos de muestreo.

Campañas	C10 (x10)	C11 (x10)	C15 (x10)	C16 (x10)
	(µg/m³)	(µg/m³)	(µg/m³)	(µg/m³)
Abr-08	140 ± 30	710 ± 100	2300 ± 400	81 ± 15
May-08	170 ± 30	420 ± 80	18 ± 10	34 ± 15
Jun-08	170 ± 20	400 ± 100	37 ± 10	100 ± 20
Jul-08	120 ± 30	880 ± 300	160 ± 20	81 ± 30
Sep-08	240 ± 40	510 ± 250	38 ± 15	90 ± 20
Oct-08	240 ± 40	280 ± 40	26 ± 16	35 ± 15
Nov-08	180 ± 30	870 ± 260	26 ± 10	180 ± 30
Dic-08	140 ± 20	220 ± 30		28 ± 10
Ene-09	90 ± 20	200 ± 50		
Feb-09	95 ± 20	900 ± 300	34 ± 15	
Mar-09	230 ± 20	650 ± 120	32 ± 15	21 ± 10
Abr-09	280 ± 20	540 ± 200	30 ± 15	28 ± 15
May-09	210 ± 40	760 ± 300	550 ± 40	120 ± 30
Jun-09	290 ± 40	760 ± 440	450 ± 30	170 ± 30
Jul-09	340 ± 30	520 ±200	320 ± 40	170 ± 30
Sep-09	160 ± 30			290 ± 20
Oct-09	160 ± 30	290 ± 20	31 ± 15	200 ± 20
Nov-09	240 ± 30	840 ± 60	150 ± 20	110 ± 10
Dic-09	100 ± 40	380 ± 20	38 ± 15	85 ± 17
Ene-10	90 ± 20	140 ± 30	43 ± 15	
Feb-10	80 ± 20	110 ± 30	46 ± 15	32 ± 15
Mar-10	120 ± 30	280 ± 40	21 ± 10	33 ± 15
Abr-10	34 ± 15	400 ± 70	67 ± 20	47 ± 15
May-10	82 ± 20	140 ± 20	28 ± 15	45 ± 15
Jun-10	140 ± 20	350 ± 40	65 ± 15	51 ± 15

Tabla VI-R1.2 Datos brutos de concentración promedio de NH₃ para cada punto de muestreo de la EDAR de la Conca del Carraixet (en μ g/m³)
Jul-10	170 ± 30	1100 ± 600	170 ± 20	130 ± 20
Sep-10	110 ± 30	550 ± 90	170 ± 30	
Sep-10	169 ± 30	110 ± 30	110 ± 20	
Oct-10	106 ± 30	220 ± 40		
Nov-10	166 ± 30	1070 ± 280	36 ± 15	110 ± 20

En el análisis realizado para cada uno de los años, se puede apreciar que cada año presenta una variabilidad temporal diferente en las concentraciones (Figura VI-R1.7).

Sin embargo, es destacable que aunque haya gran variabilidad en cuanto a los niveles de concentración, éstos se sitúen en el mismo rango (los niveles oscilan de 10 a 40 μ g/m³).





Figura VI-R1.7 Niveles de concentración de NH₃ anuales (periodo 2008-2010) para la EDAR de la Conca del Carraixet

Evolución espacial

En cuanto a las concentraciones promedio por puntos para el amoniaco, se observa, que prácticamente todos los puntos se mantienen en el mismo rango de concentración independiente de su ubicación dentro de la EDAR (Figura VI-R1.8).

También se puede apreciar una disminución bastante significativa en los niveles de concentración de amoniaco para el 2010 (como también ocurría con el sulfuro de hidrógeno), siendo éste el año donde se registran los niveles más bajos.

Por otra parte, es destacable que los niveles de amoniaco registrados son prácticamente en promedio la mitad de los registrados de sulfuro de hidrógeno (alrededor de 40 μ g/m³ para el sulfuro de hidrógeno y unos 20 μ g/m³ para el amoniaco) como se puede observar en la Figura VI-R1.8.



Figura VI-R1.8 Concentración promedio de NH_3 en cada punto (periodo 2008-2010) para la EDAR de la Conca del Carraixet

VI-R1.2 RECAPITULACIÓN

En cuanto a los niveles de concentración promedio para el sulfuro de hidrógeno, son bastante elevados, si bien los niveles han descendido considerablemente en el caso de la Conca de Carraixet después de las obras de ampliación de la EDAR en el 2007 (pasándose de 500 μ g/m³ de sulfuro de hidrógeno en el 2005 a menos de 100 μ g/m³ en el 2010).

A su vez, se ha registrado una evolución estacional con máximos estivales y mínimos invernales. Si bien se registran dos máximos relativos más, uno primaveral de mucha menor intensidad que el estival y un máximo otoñal (coincidente en todos los casos y para todos los años en noviembre y de intensidad parecida al estival). Dicho máximo otoñal ha sido objeto de estudio y parece estar más relacionado con algún proceso de operación que por influencia de condiciones ambientales.

En cuanto a los niveles de concentración de amoniaco registrado, éstos se mantienen en promedio sobre los 30 μ g/m³ (valor bastante inferior que el registrado para sulfuro de hidrógeno).

Los niveles de concentración para cada punto son más homogéneos y presentan menor fluctuación (manteniéndose dentro del rango 20-60 μ g/m³).

Por último, destacar que los máximos de amoniaco, no presentan máximos estacionales tan claramente definidos como con el sulfuro de hidrógeno, variando éstos año a año, por lo que no se aprecia un patrón de inmisiones tan claro.

RESULTADOS R2: MEDIDAS CON SISTEMAS DE CAPTACIÓN ACTIVA

CASO EJEMPLO: EVALUACIÓN DEL RENDIMIENTO Y EFICIENCIA DE LOS SISTEMAS DE DESODORIZACIÓN

ESTE CAPÍTULO ESTÁ PROTEGIDO BAJO PROPIEDAD INTELECTUAL.

PARA CUALQUIER DUDA O MÁS INFORMACIÓN SOBRE EL CAPÍTULO POR FAVOR PÓNGASE EN CONTACTO CON EL AUTOR.

E.mail: hector.espinos@uv.es

RESULTADOS R3: MODELIZACIÓN NUMÉRICA

CASO EJEMPLO: ESTIMACIÓN INDIRECTA DE TASAS DE EMISIÓN PROMEDIO DE LA EDAR DE RINCÓN DE LEÓN

VI-R3.1 INTRODUCCIÓN

Las herramientas informáticas permiten una aproximación a la distribución espacial de las concentraciones según diferentes términos (niveles promedio, frecuencias de ocurrencia, niveles máximos), así como una descripción de la variabilidad temporal de los niveles, complementando el valor proporcionado por los dosímetros.

Todo ello, contribuye a la descripción de las molestias debidas a la presencia de malos olores que, en principio, parecerían englobar en parte, todos aquellos aspectos que no pueden concretar las medidas dosimétricas de captación forzada o en continuo.

En esta línea de progreso no agotada, una de las mayores potencialidades, es la posibilidad de proporcionar valores de emisión.

Para conseguir este fin, se ha explotado el banco de datos experimentales existente hasta el momento, referido a campañas intensivas realizadas mediante captadores pasivos (red externa) en las depuradoras de Rincón de León, La Vila Joiosa, Denia-Ondara-Pedreguer, la Conca del Carraixet, y el Grao Castellón, con un doble objetivo:

- Describir y ajustar el modelo de emisiones variables en el tiempo.
- Evaluar las tasas de emisión de las diferentes plantas con medidas experimentales disponibles.

Para ello, se ejecutó repetidamente la aplicación DIMEDAR para las campañas experimentales, habiendo definido un/unos modelo/s de variación temporal de las emisiones para la obtención de un mejor ajuste entre los datos experimentales y los numéricos.

VI-R3.2 ESTIMACIÓN DE EMISIONES PROMEDIO

Para la estimación de las tasas de emisión promedio, se utilizaron los valores de concentración proporcionados por los dosímetros, comparándolos con los valores resueltos por el modelo en las mismas ubicaciones geográficas, e integrados durante las mismas horas de exposición (como se expuso en el capítulo 5).

Dicha comparación se llevó a cabo realizando la mediana de los cocientes entre las medias experimentales (descartando previamente los $outlayers^{14}$) y los resultados del modelo.

De dicho resultado, se obtiene un factor que representa la emisión que ajusta medidas y simulaciones. Todas las salidas que se presentan a continuación ya están afectadas por dicho factor.

Estos factores (Q) constituyen una vía indirecta para estimar la tasa de emisión promedio de sulfuro de hidrógeno de la planta de depuración.

El análisis de las diferencias entre las medidas proporcionadas por los dosímetros y los resultados del modelo, se hizo en base al cálculo de diversos estadísticos y expresiones analíticas (ver Anexo A y Anexo B).

Los valores negativos de los estadísticos indican una infravaloración del resultado por parte del modelo respecto del valor ideal (valor indicado en las respectivas tablas entre paréntesis). Los valores positivos indican una sobrevaloración de dicho resultado.

Con objeto de ilustrar los resultados obtenidos, se pone a modo de ejemplo una campaña de la EDAR de Rincón de León y en la que se ha incluido la siguiente información:

- ✓ Situación meteorológica y principales incidencias ocurridas a lo largo del periodo de duración de la campaña, así como, una explicación detallada de los resultados y las principales conclusiones que se han extraído.
- ✓ Distribuciones espaciales (tanto máxima como promedio) de las concentraciones para todos los esquemas de emisión propuestos (constante, aerodinámico, energético y modelo de Penman), con objeto de evaluar el transporte y/o dilución de las concentraciones.
- ✓ Niveles de concentración, tanto de las medidas experimentales, como los obtenidos para los

 $^{^{\}rm 14}\,$ Se ha considerado outlayers aquellas medidas experimentales que superan el 40% del valor de la media.

diferentes esquemas de emisión propuestos, junto a diversos estadísticos que permitan la valoración de la idoneidad de la simulación.

✓ Rosa de vientos del periodo concreto, obtenida a partir de las medidas de la torre meteorológica durante el intervalo de simulación. La rosa de vientos es de procedencia y viene representada en m/s.

VI-R3.2.1 EDAR DE RINCÓN DE LEÓN CAMPAÑA II: 25/07/2002 (13:00h) al 30/07/2002 (13:04h)

Durante todo el periodo de medidas en esta planta se mantuvieron condiciones atmosféricas típicamente estivales (Figura VI-R3.2), bajo la influencia de las altas presiones atlánticas.

Los registros meteorológicos registrados por la torre situada en la planta depuradora presentan una marcada onda diurna en todos sus parámetros.

La proximidad de la costa atenúa la oscilación térmica, con un marcado efecto de canalización a través de la rambla durante el régimen diurno, mientras que, el régimen de derrame nocturno, con velocidades efectivamente más bajas, permite una cierta oscilación de las direcciones dentro del cuarto cuadrante.

El patrón obtenido en esta ocasión parece ajustarse, en sus rasgos esenciales, con un eje de máximos aproximadamente este-oeste, coincidiendo con la dirección preferente de transporte a lo largo del cauce de la rambla (Figura VI-R3.1 de niveles promedio y Figura VI-R3.3 de distribución de concentraciones máximas) observándose un claro gradiente al alejarse de la planta (tanto para las concentraciones promedio como máximas).

En cualquier caso, la disminución de los valores de inmisión a distancias crecientes de los focos potenciales de sulfhídrico parece muy acusada, descendiendo rápidamente por debajo de los umbrales de percepción olfativa (sea cuál sea el modelo de emisiones utilizado).

También habría que anotar que los mayores impactos se dan, en la zona aguas arriba (Figura VI-R3.1 y Figura VI-R3.3) como consecuencia de la mayor limpieza de los niveles en condiciones diurnas (entrada de la brisa, como se aprecia perfectamente en la rosa de vientos con una marcada dirección este-sureste y velocidad de vientos moderada) y la mayor estabilidad atmosférica con vientos más flojos asociada habitualmente a "condiciones nocturnas" que no favorecen la dilución rápida de los niveles de sulfhídrico (Figura VI-R3.2).

Por último, destacar el buen ajuste para las dos zonas (este y oeste) de la depuradora por parte de los modelos de emisión variable utilizados (Figura VI-R3.4), siendo el que presenta un mejor ajuste en esta ocasión el modelo de emisión al que hemos denominado "modelo de Penman" (Tabla VI-R3.3).



Concentraciones promedio

Figura VI-R3.1 Resultados de concentraciones promedios para la segunda campaña de la EDAR de Rincón de León y los cuatro modelos propuestos. De izquierda a derecha y de arriba abajo: Constante, método de Penman, contribución aerodinámica, contribución energética



Figura VI-R3.2 Rosa de vientos correspondiente al periodo en el que tuvo lugar la segunda campaña de la EDAR de Rincón de León (25/07/2002 – 30/07/2002)



Concentraciones máximas

Figura VI-R3.3 Resultados de concentraciones máximas para la segunda campaña de la EDAR de Rincón de León y los cuatro modelos propuestos. De izquierda a derecha y de arriba abajo: Constante, método de Penman, contribución aerodinámica, contribución energética



Figura VI-R3.4 Resultados en función de la distancia para las medidas experimentales y los resultados simulados de los diferentes modelos de emisión empleados para la segunda campaña de la EDAR de Rincón de León

Tabla VI-R3.1 Valores promedio, máximo, mínimo y error de diversos parámetros ambientales y concentración de sulfhídrico correspondientes a la segunda campaña de la EDAR de Rincón de León (25/07/2002 – 30/07/2002)

Magnitud	Media	Máximo	Mínimo
Dirección (grados)	154 ± 104	359	2
Velocidad (m/s)	3 ± 1	5,5	0,2
Temperatura (°C)	25 ± 2	28	20,3
H₂S (ppb)	$1,1 \pm 0,8$	3,2	0

Tabla VI-R3.2 Resultados obtenidos de los cuatro modelos propuestos para la segunda campaña de la EDAR de Rincón de León

NODO	MEDIDAS (ppb) (± 0,5)	FACTOR CONSTANTE	FACTOR PENMAN	FACTOR AERO	FACTOR ENER
RE01	0,7	0,3	0,4	0,4	0,4
RE03	0,6	0,4	0,5	0,5	0,6
RE04	0,6	0,3	0,1	0,2	0,1
RE05	1,7	1,4	0,6	0,7	0,5
RE06	3,2	1,7	2,9	2,6	3,1
RE07	1,3	1	1,9	1,7	2,1

ESTADÍSTICOS	FACTOR CONSTANTE	FACTOR PENMAN	FACTOR AERO	FACTOR ENER
ANB (0)	-0,3	-0,2	-0,2	-0,1
BIAS	-0,4	-0,2	-0,2	-0,1
MNB (0)	-0,2	-0,2	-0,2	-0,2
MNE (0)	0,2	0,2	0,2	0,2
STDE (0)	0,5	0,5	0,5	0,6
FB (0)	-0,4	-0,2	-0,2	-0,1
MG (1)	0,5	0,5	0,5	0,4
VG (1)	1,5	1,7	1,5	2,5
SKVAR (1)	0,5	1	0,9	1,1
RMSE (0)	0,7	0,5	0,5	0,6
NMSE (0)	0,5	0,3	0,3	0,3
\mathbf{R} (1)	0,9	0,9	0,9	0,9
CV (0)	-0,6	-0,6	-0,7	-0,6

Tabla VI-R3.3 Resultados de diversos estadísticos para la medida de la bondad del ajuste medidas-modelo obtenidos por los cuatro modelos propuestos para la segunda campaña de la EDAR de Rincón de León

De forma análoga se realizaron los trabajos de modelización de las demás campañas de Rincón de León y de los otros emplazamientos. Se resume en la Tabla VI-R3.4 las tasas de emisión promedio (en g/s) obtenidas para las distintas campañas y emplazamientos.

Tabla VI-R3.4 Tasas de emisión promedio (g/s) obtenidas para los distintos emplazamientos del banco de datos experimental y para cada periodo de muestreo

Campaña	Fecha	Modelo de emisiones	Tasa de emisión (g/s) (± 0,1)
	EDAR GRAO	DE CASTELLÓN	
I	Julio-2005	Aerodinámico	1,1
II	Octubre-2005	Penman	1,4
EDAR CONCA DEL CARRAIXET			
I	Junio-2002	Penman	1,7
II	Febrero-2003	Energético	0,2
III	Abril-2003	Energético	0,5
IV	Junio-2003	Constante	2,5
EDAR DENIA-ONDARA-PEDREGUER			
I	Mayo-2002	Aerodinámico	0,6
II	Febrero-2003	Aerodinámico	1,2
III	Mayo-2003	Aerodinámico	1,4

IV	Julio-2003	Aerodinámico	0,4	
	EDAR V	ILA JOIOSA		
Ι	Mayo-2002	Penman	0,8	
II	Febrero-2003	Aerodinámico	0,2	
III	Mayo-2003	Penman	0,7	
IV	Mayo-2003	Penman	0,2	
V	Julio-2003	Penman	1,1	
EDAR DE RINCÓN DE LEÓN				
I	Mayo-2002	Energético	1,2	
II	Julio-2002	Penman	1,5	
III	Enero-2003	Energético	1,3	
IV	Mayo-2003	Constante	0,9	
V	Mayo-2003	Constante	3,1	
VI	Enero-2004	Aerodinámico	2,1	
VII	Febrero-2004	Aerodinámico	0,6	

VI-R3.3 RECAPITULACIÓN

De las ejecuciones realizadas para distintas EDAR, se han obtenido diferencias sustanciales en los resultados simulados para los diferentes esquemas de emisión utilizados, lo que ha conducido a distintos patrones de inmisión. Hay que recalcar que estas diferencias, se deben únicamente a la incidencia de variar la tasa horaria de emisión, manteniendo igual el balance total, bajo un entorno dispersivo que no cambia en todos los episodios).

Existe una pequeña variabilidad en la estimación de la tasa de emisión promedio que depende de la utilización de uno u otro esquema, aunque en general, los valores obtenidos se mantienen en el mismo rango de concentraciones con una ligera variabilidad en los resultados.

Esta variabilidad va desde los 0,2 g/s hasta los 3 g/s, con una emisión promedio que podemos concluir para este tipo de instalaciones de alrededor de 1 g/s.

Desde el punto de vista de la bondad del ajuste, corresponde al modelo de emisión de Penman y al modelo aerodinámico los mejores resultados en el global del banco de datos experimental, aunque si nos fijamos por separado en los distintos emplazamientos, en algunos casos, coinciden que son los otros dos modelos de emisión con los que se obtiene mejores resultados. El que un esquema de emisión, proporcione mejores o peores resultados que otro dependerá de varios factores (entre ellos las condiciones meteorológicas que se den en la campaña).

Por lo que a la hora de generalizar, o decidir cuál o cuáles son los mejores modelos de emisión, habría que hacerlo con sumo cuidado, y cuyos pasos, serían hacer un cuidadoso estudio de la meteorología del entorno y de los parámetros (en este caso ambientales y de planta) que más influencia pudieran tener en el emplazamiento y en la campaña, y así poder elegir el esquema de emisión que mejor se adapte.

Se puede concluir, que la aplicación del modelo mediante la incorporación de un esquema de emisiones que introduzca variaciones temporales parece aportar mejoras relevantes, tanto en lo que se refiere a la estimación de las tasas de emisión de la planta, como a la propia formulación de un posible modelo de emisiones.

En este sentido sería de gran interés el seguir depurando el modelo de emisiones intentando introducirle alguna variación a la emisión proveniente de alguno de los parámetros de operación de la planta.

Otro aspecto interesante, sería poder hallar de forma indirecta tanto la emisión global promedio de la planta (con la herramienta DIMEDAR), como la emisión de algunos de los focos fuente existentes en la EDAR (mediante el desarrollo y refinamiento del modelo DIODISP, el cual se detalla en próximos capítulos del presente trabajo).

RESULTADOS R4: EXPERIENCIAS EN LABORATORIO

ESTUDIO DE NUEVAS ESPECIES QUÍMICAS: PRIMERAS APROXIMACIONES

ESTE CAPÍTULO ESTÁ PROTEGIDO BAJO PROPIEDAD INTELECTUAL.

PARA CUALQUIER DUDA O MÁS INFORMACIÓN SOBRE EL CAPÍTULO POR FAVOR PÓNGASE EN CONTACTO CON EL AUTOR.

E.mail: hector.espinos@uv.es

CAPÍTULO SÉPTIMO

Actuaciones complementarias I: Diseño y construcción de un prototipo de captador activo

Vivimos en una sociedad profundamente dependiente de la ciencia y la tecnología, y en la que nadie sabe nada de estos temas. Ello constituye una formula segura para el desastre

Carl Sagan (1934-1996)

VII.1 ANTECEDENTES

La tendencia actual del control de emisiones causantes de malos olores en las EDAR mediante el cubrimiento de los principales elementos emisores, y la captación del aire hacia sistemas de eliminación, propicia la realización de estudios específicos sobre el comportamiento de tales sistemas de desodorización.

La medida de las especies presentes en las diferentes fases o etapas de dichas instalaciones, permitiría no sólo la caracterización de su funcionamiento en detalle (desde un punto de vista físico-químico), sino que proporcionarían, medidas directas de una buena parte de las emisiones gaseosas de la planta.

En este contexto, se vio la conveniencia, de estudiar tales sistemas, aunque para ello, se precisase la generación de un caudal de aire forzado.

Para tal fin, se construyó un primer equipo de medida en captación forzada. Durante su uso en diferentes campañas experimentales, se vio la necesidad de dotar al equipo de más funcionalidad para solucionar las limitaciones del equipo anterior. Por este motivo se abordó el diseño y construcción de un nuevo equipo de muestreo actualizado (Figura VII.1).

ESTE CAPÍTULO ESTÁ PROTEGIDO BAJO PROPIEDAD INTELECTUAL.

PARA CUALQUIER DUDA O MÁS INFORMACIÓN SOBRE EL CAPÍTULO POR FAVOR PÓNGASE EN CONTACTO CON EL AUTOR.

E.mail: hector.espinos@uv.es

CAPÍTULO OCTAVO

Actuaciones complementarias II: Aplicación DIODISP. Una nueva herramienta de dispersión de efluentes gaseosos

Estudia las frases que parecen ciertas y ponlas en duda David Riesman (1909-2002)

VIII.1 ESTADO DEL ARTE Y ANTECEDENTES

La realización de simulaciones numéricas de dispersión de contaminantes, proporciona un procedimiento de gran interés para la caracterización del impacto olfativo, el cual, siempre constituye un término subjetivo difícil de cuantificar.

Las herramientas informáticas permiten una aproximación a la distribución espacial de las concentraciones, así como de la variabilidad temporal de los niveles, complementando el valor proporcionado por los dosímetros.

En esta línea, la combinación de medidas y modelos, ha permitido realizar estimaciones de las tasas de emisión de H_2S para diferentes situaciones en muchas de las EDAR, sugiriendo una prometedora guía de trabajo. Esta guía, actualmente se dirige hacia el refinamiento del modelo numérico, incorporando diferentes esquemas de emisión como base para una mejora de las predicciones.

En este contexto, la estimación de tasas de emisión asociadas a una EDAR se revela como un campo de indudable interés, en el que no existe aún un cuerpo metodológico bien establecido.

Desde un punto de vista experimental la medida directa de las emisiones procedentes de una planta resulta muy compleja. Ello es debido a la diversidad de fuentes y procesos que las originan.

Como un paso adelante en estos trabajos, se plantea la posibilidad de disponer de una herramienta que permitiese el tratamiento de la dispersión de manera individualizada para cada uno de los focos potencialmente emisores que configuran una EDAR.

Hasta el momento, la modelización del impacto olfativo en el presente ámbito, había recaído sobre la aplicación DIMEDAR. La experiencia de su utilización, ha ido concretando su aplicación a un entorno espacial de unos pocos kilómetros alrededor de la planta, con una resolución para la cual aquella ha de ser tratada como un foco emisor global, sin distinguir sus diferentes elementos constituyentes.

Ello supone necesariamente, una limitación a la hora de refinar la estimación de tasas de emisión de manera indirecta, dado que cada foco presenta características y comportamientos específicos (difícilmente homogeneizables en una fuente única).

Además, existe un indudable interés en la posibilidad de discriminar cada foco, estableciendo tasas y perfiles de emisión individualizados, cuyo tratamiento requeriría necesariamente, el desarrollo de un modelo de dispersión específico que considerase la dispersión de emisiones difusas procedentes de fuentes extensas.

En este contexto, se desarrolla la aplicación DIODISP en su versión preliminar (beta), la cual, simula la dispersión de emisiones gaseosas desde focos extensos, adaptados a las geometrías de los elementos de una EDAR.

La aplicación informática en su distribución actual (versión 0.0 de 12/2010) se encuentra plenamente operativa. La mayor limitación de la herramienta procede de la necesidad de realizar un profundo trabajo de validación experimental, en condiciones reales de campo, actividad que en cualquier caso, no se ha podido realizar durante el transcurso de la tesis por cuestiones ajenas a la propia investigación.

VIII.1.1 JUSTIFICACIÓN

En una planta depuradora de aguas residuales, existe una gran multiplicidad de focos potenciales de sustancias causantes de malos olores, algunos de los cuales, pueden alcanzar dimensiones considerables (en el que ocuparían un caso extremo las balsas de lagunaje).

A esta diferencia de tamaño, se une también una gran diversidad en cuanto a su naturaleza, tanto por las características morfológicas que condicionan la forma de emisión a la atmósfera de los compuestos (evaporación, emisión forzada, etc.), como por la propia naturaleza de las especies que emiten, lo que viene determinado por el papel funcional desempeñado dentro de las diferentes líneas de tratamiento de la planta.

Es bien conocido el carácter fuertemente variable de la percepción olfativa, que se manifiesta habitualmente como una rápida sucesión de vaharadas de diferente intensidad, consecuencia de los propios procesos de emisión y de transporte a través de la dispersión turbulenta de la atmósfera.

A distancias suficientemente cortas, los niveles de concentración superficiales de las emisiones de los distintos focos definen una distribución espacial con fuertes gradientes, resultado de una mezcla aún incompleta. Sobre posible este campo es reconstruir los aportes individualizados procedentes de cada elemento a partir de una colección suficiente de medidas de inmisión, simulando los correspondientes procesos dispersivos. Pero, en las proximidades, es necesario tener en cuenta la extensión y geometría de cada foco, ya no asimilables a emisiones puntuales.

Este hecho, se pone de manifiesto en la siguiente representación (Figura VIII.1), en la que mediante un código numérico de dispersión, se ha representado de forma cualitativa el campo de concentraciones superficiales debido a las emisiones de un foco circular extenso, representado en el dibujo (patrón superior), y el debido a un foco puntual de la misma intensidad (estela inferior).

Para simplificar y resaltar la experiencia, se consideró un viento constante procedente de la parte izquierda de la figura (supuestamente componente oeste). La emisión de masa por unidad de tiempo fue igual en ambos casos. En uno, distribuida sobre toda la superficie del círculo (con un radio de 12 metros), y en el otro concentrada en un único punto de salida.

El patrón espacial de las inmisiones, presenta marcadas diferencias en las proximidades de los focos, mientras que parece uniformizarse en la cola final de la estela.



Figura VIII.1 Distribución espacial del campo de concentraciones simuladas para dos focos, uno circular extenso en la parte superior y otro puntual en la parte inferior

En la Figura VIII.2 se ha representado los niveles de inmisión debidos a los dos focos (puntual en línea de trazos y extenso en línea continua) a diferentes distancias del foco viento abajo, sobre el mismo eje del penacho (curvas marrones y escala izquierda) y sobre un eje paralelo al anterior desplazado lateralmente 30 metros (curvas verdes y escala derecha).



Figura VIII.2 Concentraciones simuladas (en ppb) obtenidas para dos focos superpuestos (un círculo extenso y otro puntual) según dos transectos espaciales paralelos al eje del penacho y a distintas distancias del foco.

Sobre la línea del propio eje, las concentraciones decaen rápidamente, siendo muy superiores en el caso del foco puntual, e igualándose a partir de cierta distancia del foco.

En el transecto situado por encima del eje, el comportamiento es bien diferente. Por una parte, las

concentraciones son bastante menores, siendo nulas en las proximidades del foco.

Empiezan a crecer a partir de cierta distancia al mismo, siendo en este caso, mayores las debidas al foco extenso, convergiendo también a cierta distancia viento abajo (en este caso tras el punto de inflexión, cuando ambas empiezan a decrecer).

Si representamos el porcentaje debido a la contribución de cada uno de los focos al nivel conjunto de inmisión (foco puntual línea a trazos, foco extenso línea continua), para tres transectos paralelos viento abajo (según el eje central -curvas marrones- y según sendos ejes paralelos a 10 metros -curvas azules- y 30 metros -curvas verdes-) se observa sobre el eje a distancias cortas predominan los aportes del foco puntual frente al extenso (70% / 30%), mientras que en los cortes paralelos siempre es superior la contribución del foco extenso en las proximidades (Figura VIII.3).

No obstante, se aprecia claramente, que todas las curvas convergen hacia un 50%, lo que significa que a partir de cierta distancia (que en el caso actual se podría estimar en unos 200 metros) las contribuciones de ambos focos - de igual intensidad- son equivalentes e indistinguibles.





Para distancias cortas, resulta por lo tanto crítico, el considerar individualizadamente cada foco emisor con su correspondiente geometría.

Por otro lado, este tratamiento permitiría incluir en la simulación de la dispersión, modelos de emisión específicos para cada tipo de fuente. Éstos responden, en

muchos casos, a procesos diferenciados, y sobre los que existen algunos estudios específicos en la bibliografía.

Con una herramienta de simulación de esta naturaleza, se abordarían dos aspectos de interés: ajustar más adecuadamente la simulación del campo de inmisiones en un entorno próximo de una planta depuradora y abordar de manera más realista tanto las tasas como los perfiles de emisión específicos para cada uno de los elementos potencialmente emisores.

Antes del diseño y puesta en funcionamiento del modelo, se realizaron diferentes consideraciones teóricas, planteándose qué aspectos habría que incluir en el código, qué tipo de modelos serían más estables numéricamente, intentando la máxima optimización entre la capacidad de cálculo y los tipos de datos disponibles, etc.

En este aspecto se ha realizado un considerable esfuerzo por describir detalladamente, cada una de las consideraciones teóricas empleadas y su formulación, agrupando todo este volumen de información en *Material Complementario I: Diodisp*.

VIII.2 ESTIMACIÓN DE LAS EMISIONES

La aplicación del modelo en uno de sus modos de ejecución, está orientada a la estimación de las tasas de emisión de los diferentes elementos que conforman la planta.

La metodología empleada en este caso, ha consistido en disponer de una serie temporal de medidas experimentales y meteorológicas, al que se ha aplicado el modelo con objeto de simular la contribución teórica de cada uno de los '*F*' focos. De esta manera, se obtiene una colección de ecuaciones ('*N*', igual al número de registros de la serie temporal de partida), de acuerdo a la expresión (Ecuación VIII.1).

$$C_{i=1,N} = \sum_{j=1}^{F} Q_j f_{ij} M_{ij} + R \quad \text{(Ecuación VIII.1)}$$

C_i = Representa la concentración experimental medida en cada instante i.

- Q_j = Representa la tasa de emisión promedio para el foco j.
- M_{ij} = Representa la simulación de la contribución al nivel de concentración en el punto de medida experimental en el instante 'i' debido al foco 'j'.
- f_i = Representa el factor de modulación temporal en el instante 'i' de la emisión para el foco 'j'.
- R = representa la contribución del nivel de concentración de fondo.

Dado que habitualmente el número de medidas superará ampliamente el de focos de la planta, el sistema de ecuaciones lineales estará sobredeterminado, careciendo en general de solución exacta.

Si se reescribe el sistema de ecuaciones lineales anteriores en forma matricial como en la ecuación VIII.2, se tiene que:

C = QM (Ecuación VIII.2)

Y se puede obtener un vector 'q' tal que la distancia euclídea (Ecuación VIII.3) sea mínima.

$$|C - QM|$$
 (Ecuación VIII.3)

Siendo 'q' una solución que minimiza la norma anterior, se cumple la ecuación VIII.4.

$$M^T M Q = M^T C$$
 (Ecuación VIII.4)

Sistema en el que ahora se igualan el número de ecuaciones y el de incógnitas (=n), y que posee solución única (siempre que $det(M^T M)!=0$ o bien $rango(M^T M)=n$).

Este tipo de tratamiento y solución que se muestra recibe el nombre de *ecuaciones normales o de Gauss*.

El problema de este procedimiento radica en que las soluciones obtenidas del anterior sistema lineal, $Q = \{q_1, q_2, q_3, \dots, q_n\}$, $q_i \in \mathbf{R}$, y que representarían las tasas de emisión de los diferentes focos, pueden adquirir valores negativos para algunos de sus elementos, situación de difícil interpretación física.

Para soslayar esta nueva limitación, se realizó una aproximación diferente, en la que se asegurase coeficientes no negativos. Matemáticamente el problema se enunció como la minimización de la norma |C - QM| sujeto a la restricción general $GQ \ge h$. En el caso presente 'G' representaría la matriz unidad $(n \times n)$ y 'h' un vector nulo (de dimensión n).

Estos algoritmos reciben el nombre general de *mínimos cuadrados no negativos* (NNLS a partir de las siglas en inglés).

El modelo incluye en su versión actual una rutina de resolución desarrollada por Charles L. Lawson and Richard J. Hanson del Jet Propulsion Laboratory, 1973, publicada en el libro "Solving least squares problems" Prentice-Hall, 1974.

VIII.3 MODELOS DE EMISIÓN

En una primera aproximación metodológica, se ha considerado que las emisiones de cada foco son estacionarias durante el periodo de simulación $(q_i = constante)$.

Esta hipótesis resulta poco asumible cuando se trabaja con periodos largos, ya que la liberación de compuestos causantes de malos olores puede experimentar fuertes variaciones, debido a razones de operación como a factores ambientales.

Por ello, de forma análoga a como se hizo en el modelo DIMEDAR, se utilizó una emisión variable en el tiempo de acuerdo a un esquema general del tipo (Ecuación VIII.5).

Q(t) = QD(t)A(t) + R(t) (Ecuación VIII.5)

Una mejora del modelo, siempre que fuese posible introducir la distinción, consistiría en individualizar la dependencia para cada foco (Ecuación VIII.6).

 $q_i(t) = q_i d_i(t) a_i(t)$ (Ecuación VIII.6)

donde nuevamente ' q_i ' representaría la emisión promedio del foco 'i' (ajustable mediante la aplicación), mientras que las funciones ' $d_i(t)$ ' y ' $a_i(t)$ ' representarían las dependencias operacionales y ambientales específicas para la fuente.

En este caso sería fructífero desligar ambos tipos de forzamientos para fuentes de naturaleza muy distinta (como por ejemplo la salida de un "scrubber" o las emisiones procedentes de un decantador).

Un refinamiento sobre el esquema anterior, supondría la caracterización de las tasas de emisión específicas (q_i) de acuerdo a diferentes modelos de emisión, dependiendo de su naturaleza.

En este sentido buena parte de las ideas proceden del documento, *EPA-453/R-94-080A "Air emissions models for waste and wastewater*".

Otra fuente interesante de información utilizada, procede del documento de la EPA *"Compilation of air pollutant emission factor. Volume I: Stationary point and area sources", AP-42.* El capítulo tercero de dicho documento está dedicado específicamente a las emisiones originadas en colectores, tratamiento y almacenaje de aguas residuales.

Por tanto, un factor clave a la hora de refinar el modelo, sería ver de qué posibles maneras podrían liberarse las emisiones difusas.

Se distinguen nueve posibles vías genéricas de eliminación:

- Volatilización
- Adsorción
- Migración
- Lavado
- Descomposición biológica
- Descomposición fotoquímica
- Hidrólisis
- Oxidación-reducción
- Reacción con radicales hidroxilo

Las cuatro primeras vías son de naturaleza física, mientras que las restantes lo son de naturaleza química (incluyendo los procesos biológicos).

Centrándose en los cuatro primeros (es decir volatilización, adsorción, migración y lavado), sólo los procesos de volatilización contribuirían de manera sustancial a la ocurrencia de episodios de malos olores, por lo que se ha focalizado sobre la volatilización, la discusión sobre los posibles esquemas de emisión.

Siguiendo este esquema, para líquidos no turbulentos, el paso de una sustancia en disolución hacia la fase gaseosa vendría dado por una relación lineal como la mostrada en la ecuación VIII.7.

 $C_l = HP$ (Ecuación VIII.7)

 C_l representa la concentración del compuesto en fase líquida.

P es la presión parcial del gas.

H es la constante de Henry, que depende del compuesto en disolución, de la naturaleza del disolvente y de la temperatura.

El formulismo para la constante de volatilización (*k*), en este caso vendría dada por una ecuación diferencial (ecuación VIII.8).

$$k = \frac{1}{L} \left[\frac{1}{k_l \left(\frac{D_l^c}{D_l^0} \right)^m} + \frac{RT}{10^6 H k g \left(\frac{D_g^c}{D_g^0} \right)^n} \right]$$
 (Ecuación VIII.8)

Donde el proceso de volatilización es función de la temperatura (T) y de una serie de constantes en las que se incluyen las propiedades y especificidades del compuesto y la disolución.

Dichas constantes son '*L*' (espesor del contenedor del líquido), '*R*' (constante de los gases ideales), '*k*_l' (coeficiente de transferencia de masa del oxígeno en agua), ' $D_l^{c'}$ (coeficiente de difusión del compuesto en fase líquida), ' $D_l^{o'}$ (coeficiente de difusión del oxígeno en fase

líquida), '*H*' (constante de Henry),' kg' (coeficiente de transferencia de masa del vapor de agua en aire), ' $D_q^{c'}$ (coeficiente de difusión del compuesto en fase gaseosa), ' $D_q^{a'}$ (coeficiente de difusión del vapor de agua en fase gaseosa), '*m*' (exponente turbulento líquido, y cuyo valor se encuentra entre 1,5 y 1) y '*n*' (exponente turbulento gaseoso, con un valor que oscila de 0,5 a 1).

Además de los condicionantes de tales procesos (naturaleza de solutos y disolventes, temperatura ambiente, concentración inicial,...), influirán otros aspectos como pueden ser la velocidad del viento (en cuanto a su capacidad de eliminar compuestos atmosféricos de las inmediaciones del foco) y las propiedades geométricas del foco (superficie expuesta, profundidad del embalsamiento, conducciones forzadas, etc.).

Cabe hacer aquí una pormenorización de distintos tipos de elementos que forman parte habitualmente de una planta de tratamiento de aguas residuales, y que para su sistematización se pueden integrar en tres tipologías:

- Los colectores y sistemas de conducción
- Elementos de tratamiento propiamente dichos
- Balsas de almacenamiento.

La velocidad de volatilización, puede determinarse a partir de la teoría de transferencia de masa para la fase líquida y gaseosa (' k_a ' y ' k_l ' respectivamente).

Dichos coeficientes se utilizan para estimar los coeficientes conjuntos de transferencia (' K_D ', 'K', con o sin reaireación) para cada especie.

Dependiendo de la naturaleza del elemento estructural de la planta, existen diferentes modelos para estimar los factores de emisión.

A modo de ejemplo, entre la gran variedad de formulaciones dependiendo de cada situación específica, cabe mostrar lo que sería la estimación de los factores de emisión para una conducción (depósito) no aireada y no biológicamente activa (Ecuaciones VIII.9 a VIII.23).

$$k_{l} = (2,78 \cdot 10^{6}) \left(\frac{D_{W}}{D_{ether}}\right)^{2/3} para \ 0 < U_{10} < 3,25 \ \left(\frac{m}{s}\right) y \ cualquier \frac{F}{D}$$
(Ecuación VIII.9)

$$k_{l} = \left[(2,605 \cdot 10^{-9}) \left(\frac{F}{D} \right) + (1,277 \cdot 10^{-7}) \right] (U_{10})^{2} \left(\frac{D_{w}}{D_{ether}} \right)^{2/3}$$

$$para \ U_{10} > 3,25 \ \left(\frac{m}{s} \right) \ y \ 14 < \frac{F}{D} < 51,2 \quad (\text{Ecuación VIII.10})$$

$$k_{l} = (2,61 \cdot 10^{-7})(U_{10})^{2} \left(\frac{D_{w}}{D_{ether}}\right)^{2/3}$$

$$para \ 0 < U_{10} < 3,25 \ \left(\frac{m}{s}\right)y \ \frac{F}{D} > 51,2 \qquad (\text{Ecuación VIII.11})$$

$$k_l = 1 \cdot 10^{-6} + 144 \cdot 10^{-4} (U^*)^{2,2} (Sc_L)^{-0,5}$$
 (Ecuación VIII.12)

$$k_{l} = 1 \cdot 10^{-6} + 34.1 \cdot 10^{-4} U^{*} (Sc_{L})^{-0.5}$$

para $U_{10} > 3.25 \left(\frac{m}{s}\right) y \frac{F}{D} < 14$ (Ecuación VIII.13)

Donde los diferentes factores tendrían las siguientes expresiones:

$$U^* = 0.01(U_{10})(6.1 + 0.63(U_{10}))^{0.5}$$
 (Ecuación VIII.14)

$$Sc_L = \frac{\mu_L}{(\rho_L D_W)}$$
 (Ecuación VIII.15)

$$\frac{F}{D} = 2(A\pi)^{0.5}$$
 (Ecuación VIII.16)

$$kg = 4.82 \cdot 10^{-3} (U_{10})^{0.78} (Sc_G)^{-0.67} (d_e)^{-0.11}$$
 (Ecuación VIII.17)

Y en donde:

$$Sc_G = \frac{\mu_a}{(\rho_a D_a)}$$
 (Ecuación VIII.18)

$$d_e = 2(A\pi)^{0.5}$$
 (Ecuación VIII.19)

$$K = \frac{k_l K_{eq} kg}{K_{eq} kg + k_l} \quad \text{(Ecuación VIII.20)}$$

$$K_{eq} = \frac{H}{RT}$$
 (Ecuación VIII.21)

Y finalmente los factores de emisión vendrían dados por las ecuaciones VIII.22 y VIII.23.

• Para el caso de una conducción

$$N = \left(1 - \frac{C_t}{C_0}\right) V \frac{C_0}{t} \quad donde \ \frac{C_t}{C_0} = exp\left[-ka\frac{t}{V}\right]$$

(Ecuación VIII.22)

• Para el caso de un depósito

$$N = kC_L A$$
 donde $C_L = Q \frac{C_0}{kAtQ}$ (Ecuación VIII.23)

En la Tabla VIII.1 se describe el significado de los parámetros utilizados y sus unidades.

Tabla VIII.1 Descripción de los parámetros de las distintas ecuaciones mostradas anteriormente para el ejemplo del cálculo de factores de emisión para una conducción (depósito) no aireada y no biológicamente activa

PARÁMETRO	SIGNIFICADO Y UNIDADES
N	Tasa de emisión (g/s)
k _i	Coeficiente de transferencia de masa en fase líquida (m/s)
k _g	Coeficiente de transferencia de masa en fase gas (m/s)

К	Coeficiente de transferencia de masa conjunto para el paso de la fase líquida a la gaseosa (m/s)	
U 10	Velocidad del viento a 10 m sobre la superficie (m/s)	
U*	Velocidad de fricción (m/s)	
D _w	Difusividad del compuesto en agua (cm ² /s)	
D _{eter}	Difusividad del éter en agua (cm ² /s)	
F/D	Relación de la superficie a la profundidad del contenedor	
μL	Viscosidad del agua (g/cm-s)	
Α	Área del recipiente (m ²)	
Q	Caudal (m ³ /s)	
CL	Concentración de la especie en agua (g/m ³)	
Co	Concentración inicial de la especie en agua (g/m³)	

Algunos de los parámetros anteriores corresponden a datos de operación, otros proceden de la bibliografía técnica, mientras que otros deben ser establecidos experimentalmente.

La incorporación de esquemas de emisión de este tipo permitiría, a través de la utilización del modelo, ajustar experimentalmente, de manera indirecta, algunos de estas parametrizaciones.

Un refinamiento de los modelos anteriores, sería recurrir a formulismos más específicos que tengan en cuenta las características y geometrías concretas de cada elemento.

En esta línea, pueden ser descritos una gran variedad de modelos de emisión, con progresivos grados de complicación.

El problema reside en que cuanto más sofisticado resulta el modelo (y por tanto con mayor detalle contempla los procesos de transferencia involucrados), más difícil resulta asignar sus parámetros de entrada.

La medida directa es en ocasiones una tarea costosa, inabordable si se pretende individualizarla para cada

planta. Por otra parte, medidas experimentales muy puntuales tampoco reflejan una realidad, que en ocasiones, presenta fuertes variaciones temporales.

VIII.4 APLICACIÓN DIODISP

VIII.4.1 ELECCIÓN DEL SOFTWARE DE PROGRAMACIÓN

Otro aspecto importante en el diseño de la herramienta, fue la elección del software de programación, desde una perspectiva combinada entre las posibilidades de desarrollo y las necesidades de un usuario final.

No siempre, para "desgracia" del desarrollador, el entorno de programación más potente o que ofrece más posibilidades, es el más "amigable" para el usuario final de la aplicación.

Por lo tanto la nueva aplicación a desarrollar debía responder a varios requerimientos de partida:

- Uso de un lenguaje flexible y universal. Dado que el núcleo central de la aplicación estaría constituido por un motor de cálculo numérico a desarrollar. Éste núcleo, debe asegurar una gran libertad de procesamiento numérico, con una precisión suficiente en el tratamiento de números y operaciones matemáticas, siendo deseable la disponibilidad de rutinas de cálculo utilizables en el proceso de construcción del modelo.
- Facilitar la incorporación/adaptación de información desde las posibles fuentes existentes.
- Proporcionar al usuario un abanico de opciones de ejecución (seleccionando distintos esquemas dispersivos, opciones orográficas, etc.).
- Proporcionar al usuario una serie de posibilidades (suficientes) para la explotación de los resultados, generalmente consistentes en representaciones gráficas de distinto tipo (prever la exportación de los resultados a entornos más potentes como podrían ser los de tipo CAD o GIS).
- Su diseño debería ser en un entorno multiplataforma y de diseño modularizado (incluyéndose la posible

incorporación de nuevas capacidades como la adaptación a otros entornos).

VIII.4.2 CARACTERÍSTICAS GENERALES

El *front-end* (o interfaz para el usuario) se realizó con el lenguaje de programación Qt (http://qt.nokia.com). Sin entrar en detalles técnicos y metodológicos, cabe destacar que se trata de un lenguaje modular, multiplataforma, intuitivo y programación blanda (*soft programming*).

El back-end (o núcleo de programación) se realizó en el lenguaje de programación C++.

La aplicación en sus distintas versiones, está desarrollada para entorno Windows. Asimismo, se dispone de una versión a utilizar en sistemas Unix/Linux (no testeada experimentalmente). Se ha dejado la adaptación de la aplicación en el sistema OS X de Apple para más adelante.

Los ejecutables fueron programados en lenguaje C y utilizan recursos exclusivamente del intérprete de comandos, por lo que inicialmente resulta independiente de la versión del sistema operativo (95, XP, 2000, Windows 8...).

Los recursos gráficos para la visualización por defecto de los resultados, se incluyen como parte de la propia distribución, incluyéndose también una interfaz de adaptación para la herramienta de visualización de campos meteorológicos GRADS ('*Grid Analysis and Display System*', *http://www.iges.org/grads/*).

La aplicación tiene una estructura modular, organizada en forma de menús a distintos niveles como su aplicación homónima DIMEDAR.

En conjunto, contempla todas las operaciones necesarias para realizar las simulaciones, desde la preparación de la información de entrada hasta la representación gráfica de los resultados.

Parte del funcionamiento del programa, se controla mediante diferentes archivos de configuración, los cuales deberán responder a una organización concreta y bien definida. En algunos casos el programa proporciona un interfaz para la creación/modificación de los mismos, mientras que en otras ocasiones, crea un modelo genérico para que el usuario lo modifique siguiendo el mismo patrón.

La emisión se expresa en términos de masa por unidad por segundo y por unidad de superficie/distancia en el caso de focos extensos/lineales.

Los valores de concentración para cada foco se multiplican por un factor consignado en el fichero meteorológico, encargado de modular la variación temporal (por defecto = 1), siendo responsabilidad del operador, el normalizar adecuadamente estos factores.

El programa utiliza siempre las mismas unidades, a las que deberán adaptarse los datos de entrada de la Tabla VIII.2.

MAGNITUD	UNIDADES
Longitud	metros (m)
Tiempo	segundos (s)
Velocidad	metros por segundo (m/s)
Emisión Inmisión	masa (opcionalmente gramos) por segundo y, dependiendo del tipo de fuente, metros o metros cuadrados ([g]/s/[m[*m]]). 10 ⁻⁶ veces la masa emitida (en el caso de que fuesen gramos se obtendrían microgramos) por metro cúbico ([µg]/m ³).

Tabla VIII.2 Dimensiones utilizadas en la aplicación DIODISP

La aplicación reproduce los niveles de concentración sobre una superficie (retícula) o bien en uno o varios receptores concretos.

La aplicación DIODISP se distribuye en forma de un ejecutable autoinstalable (AUTODIODISP.EXE), que carga una estructura de directorios.

El directorio `\ejecutables\' incluye los cinco ejecutables que constituyen la aplicación, más un programa complementario, `*DiodispP.exe'*, que se ejecuta de manera autónoma y se encarga, entre otras cosas, de convertir los resultados numéricos obtenidos de la simulación sobre una malla a un formato compatible con el entorno GRADS (Tabla VIII.3).
<u>Directorio</u>	Archivos	<u>Directorio</u>	Archivos
.\ejecutab\	DIODISP.exe DiodispE.exe DiodispG.exe DiodispN.exe DiodispN.exe DiodispN.exe DiodispN.exe Diodisp.ico	.\fuentes\	DIODISP. C DiodispE. C DiodispG. C DiodispI. C DiodispN. C DiodispP. C
.lgpcl	EGAVGA.DRV CGM.DRV CONFIG.GPC TRIPLEX.FNT SIMPLEX.FNT MATRIX.FNT COMPLEX.FNT MESSAGES.TAB MESSAGES.DAT	.\ejemplo∖	diodisp.bat DIODISPCFG DIODISPRCP TURIA_DB.CFG TURIA_T.FOC TURIA.MET TURIA.EJC TURIA.TOP TURIA.TOP TURIA.TPN s100622a.SAL tm_turia.cfg

Tabla VIII.3 Estructura organizativa de la distribución de la aplicación en su versión actual

La aplicación propiamente dicha, consta de seis programas, cuatro de ellos invocados desde el principal, *DIODISP.EXE'*, desde el cual se inician todas las funciones mediante un sistema de menús y submenús.

Su funcionamiento viene controlado por un archivo de configuración ('*diodisp_.cfg'*) en el cual se debe indicar, entre otras cosas, el directorio del resto de los ejecutables, que no necesariamente deben residir en el de trabajo.

Estos programas que son gestionados desde el programa raíz son los siguientes:

- '*DiodispE.exe'*, encargado de varias funciones relacionadas con la preparación y actualización de los archivos de entrada al sistema.
- *`DiodispG.exe'*, que controla las salidas gráficas directas de los resultados.
- *`DiodispN.exe'*, incluye los cálculos numéricos para la resolución del sistema de ecuaciones lineales sobredeterminado con soluciones positivas (NNLS).
- *`DiodispI.exe,'* que proporciona ayuda en tiempo de ejecución sobre diferentes aspectos de la funcionalidad de la aplicación.

Finalmente, también se adjunta un archivo con el icono de la aplicación ('*diodisp.ico'*).

El directorio `*fuentes*\' incluye los códigos fuente, en lenguaje C, de los seis ejecutables descritos.

El directorio `*ejemplo*\' contiene los archivos de configuración, datos de entrada, etc. necesarios para la simulación de un caso ejemplo.

También se incluye como ejemplo, un fichero con el dibujo de la planta ('.*top*') con algunos puntos singulares ('.*tpn*') para su visualización, y que proporcionan el modelo para otros emplazamientos.

Finalmente, el directorio '*gpc*\' incluye todos los archivos necesarios para que funcionen las salidas gráficas incorporadas como parte de la funcionalidad de la aplicación.

Para un mayor detalle sobre la funcionalidad de la aplicación DIODISP (de forma análoga a como se hizo con la aplicación DIMEDAR) se remite al lector a echar un vistazo a *Material Complementario J: Funcionalidad Diodisp*.

VIII.5 RECAPITULACIÓN

Se ha presentado una herramienta de modelización DIODISP enfocada a la modelización de los diferentes focos o fuentes de emisión en el entorno de una EDAR. Dicha herramienta complementa las dos herramientas presentadas anteriormente: la aplicación meteorológica DMDMETEO y la herramienta de modelización DIMEDAR (en el que la EDAR es considerada como un todo y está enfocada a la simulación de las aportaciones externas que la planta puede emitir a su entorno más próximo).

El desarrollo de estas tres herramientas, permite al observador avanzado y a los gestores de las distintas explotaciones, "explorar" el funcionamiento de la planta y caracterizar su comportamiento disponiendo de abundante información constatable con medidas experimentales complementarias (estudios de olfatometría dinámica, medidas con captadores activos, eficacia de sistemas de desodorización).

Este tipo de herramientas y su aplicación a este tipo de instalaciones, abre un nuevo campo de investigación en el que en los últimos años se ha volcado la comunidad científica del sector. Este hecho convierte en muy atractiva esta línea de trabajo que no está ni mucho menos acotada. Con ello se pretende cubrir el importante hueco que existe actualmente, disponer de metodologías adecuadas de cuantificación y control de las emisiones difusas de partículas en entornos industriales.

La herramienta DIODISP se concibió en el marco del proyecto DIFUCER ("*Cuantificación y caracterización de las emisiones difusas de partículas en la gestión y transporte de materiales pulverulentos*", referencia GL2009-14680-C02-01, financiado por el Ministerio de Ciencia y Educación) donde se probó con éxito y cuyos resultados se recogen en el *Libro blanco de sobre emisiones difusas de material particulado: cuantificación, control y minimización* editado en marzo del 2014 por el Instituto Tecnológico de la Cerámica.

Aun habiéndose probado con éxito la herramienta durante el proyecto DIFUCER, la mayor carencia que presenta, es la necesidad de una mayor validación experimental del propio modelo dispersivo. Ello podría llevar al refinamiento de algunos de esquemas los de transporte/difusión y algoritmos de cálculo utilizados en el desarrollo de la herramienta (fase de optimización).

Por otro lado, no se ha considerado necesario introducir topografía compleja en el desarrollo, pues las distancias esperadas de aplicación son cortas, próximas al ámbito típico de la propia planta. Sin embargo, si sería conveniente incluir posibles efectos debido a edificaciones y otros elementos estructurales, que en ocasiones pueden tener efectos importantes sobre los niveles de concentración.

Se ha incorporado un esquema numérico para la obtención de las tasas de emisión de cada foco potencial presente en la planta a partir de la resolución de un sistema de ecuaciones lineales obtenidas como resultado de la modelización de la dispersión.

En el estado actual de desarrollo de la aplicación, se precisan valores experimentales de concentración en un punto, que constituirían el término independiente del sistema algebraico. Para ello se precisan mediciones automáticas que proporcionen una serie temporal continuada de valores sobre las que contrastar las simulaciones.

En esta línea cabría profundizar a partir de la bibliografía existente (en parte revisada en el presente informe) algunas ideas y formulismos respecto a diferentes esquemas de emisión de diferentes elementos funcionales de una línea típica de depuración de aguas. Ello permitiría abrir un desarrollo orientado, no solamente hacia la estimación de tasas de emisión, sino hacia la formulación y ajuste de modelos de emisión individualizados para cada foco.

Sería interesante valorar las diferentes posibilidades de explotación conjunta de los resultados del modelo con medidas de inmisión experimentales para obtener como producto tasas emisión (específicas para cada foco).

CAPÍTULO NOVENO

Conclusiones generales

Porque la repugnancia a aceptar ideas preconcebidas y convertir la opinión de uno mismo en tesis antes que en hipótesis de trabajo, es precisamente lo que constituye la marca de calidad de un científico genuino y lo que constituye la naturaleza ética esencial de la actividad científica

Aldous Huxley (1894-1963)

Las conclusiones que a continuación se presentan, discurren alrededor de las tres grandes líneas de investigación en las que se han basado los trabajos: la capacidad de medida de concentraciones ambiente de especies causantes de malos olores (concentradas en dosímetros pasivos y captación forzada), la simulación numérica de los procesos dispersivos responsables de la distribución de dichas especies en el entorno, y la descripción de procedimientos y metodologías adecuadas para abordar diferentes problemas relacionados con el impacto olfativo a partir de la ventajosa utilización de los anteriores recursos.

Con la perspectiva de varios años de trabajo e investigación en la línea de la caracterización del impacto olfativo derivado de las actividades de depuración de aguas residuales, siempre en colaboración entre la Fundación CEAM y la EPSAR de la Comunidad Valenciana, se permite valorar de manera inmejorable los resultados obtenidos y, quizás como contribución más interesante, los grandes espacios aún por recorrer.

Aunque existen otras aproximaciones posibles, se ha mantenido siempre el enfoque de que se trata de una cuestión típica de dispersión atmosférica. En este sentido, el "problema" se redujo a establecer las conexiones entre emisiones e inmisiones, actuando la atmósfera como vehículo de transporte y distribución. Esta perspectiva, determinó automáticamente algunos de los aspectos a cubrir en un planteamiento de este tipo. Se debía disponer de herramientas que facilitasen la estimación objetiva de los niveles de inmisión, así como otro tipo de recursos que permitiesen lidiar con los aspectos más relevantes de la dispersión de contaminantes.

Ambas cuestiones, retrotraen a otros dos aspectos que resultan cruciales al tratar cualquier problema de dispersión: el conocimiento de las tasas de emisión de aquellos compuestos concretos cuyo comportamiento se pretende caracterizar, y la posibilidad de medir la presencia (en este caso en concentración ambiente) de dichas especies.

Desde el punto de vista de la *caracterización objetiva* se inició mediante la incorporación de dos sustancias que se consideraron "buenos trazadores" de malos olores y que podían caracterizar las dos familias más importantes de compuestos emitidos en este tipo de instalaciones (sulfuro de hidrógeno y amoniaco).

Si bien, el recorrido del estudio del amoniaco se vio ralentizado por las dificultades que presentaba la medida de dicha especie en estado gaseoso. La adquisición de un equipo automático (técnica de quimioluminiscencia) puso de manifiesto los problemas en el muestreo del amoniaco, con indeseados efectos de adsorción y/o difusión a lo largo de las líneas de muestreo. Ello obligó a la preparación de nuevos soportes para el proceso de exposición de los captadores, siendo que la tradicional cúpula de teflón utilizada en la generación de atmósferas de concentración conocida alteraba sensiblemente la estabilidad de las muestras.

Los resultados mostraron una mayor variabilidad de los resultados que en el caso de las equivalentes medidas de sulfuro de hidrógeno, revelándose uno de los procedimientos testeados (geometría, impregnación, solución captadora,...) como sensiblemente más eficiente que las restantes.

Como parte sustancial de estos trabajos experimentales, se realizaron medidas sistemáticas de sulfuro de hidrógeno y amoniaco mediante captadores pasivos en varias plantas depuradoras de la Comunidad Valenciana, con una frecuencia mensual y una duración varios años. Estas mediciones han proporcionado un primer banco de datos muy sustancioso sobre el comportamiento de las concentraciones de ambas especies (directamente ligadas a los malos olores).

Siendo clara la fuerte variabilidad intrínseca de las concentraciones, sometidas éstas a las contingencias ambientales y de operación en cada momento (se ha documentado la existencia de intensos gradientes espaciales de concentración dentro de una misma planta, así como una fuerte variabilidad temporal). Las medidas han mostrado, no solamente las diferencias cuantitativas entre las distintas plantas, sino también ciertos patrones de comportamiento.

Estos patrones parecen tener un claro componente estacional en el caso del sulfuro de hidrógeno, mientras que resultaron más erráticos en el caso del amoniaco.

La disponibilidad de una serie temporal larga de medidas de inmisión, se revela un elemento de interés como forma de aportar conocimiento y caracterizar uno de los aspectos consustanciales, como es su impacto olfativo en el entorno.

El diseño de un muestreo basado en medidas sistemáticas con periodicidad de un mes y con dosímetros distribuidos en la planta se muestra también, sin ser en ningún modo el único posible, como un compromiso razonable entre esfuerzo y rentabilidad.

En la línea de las medidas sistemáticas, los registros meteorológicos en muchas de las plantas, están alcanzando dimensiones que permiten aproximarse a valores climáticos normales del emplazamiento.

En este sentido, se ha introducido en el análisis del banco de datos la idea de anomalía para caracterizar el comportamiento de un periodo anual individual, por referencia al "modo normal" del emplazamiento.

Este tratamiento permite resaltar las peculiaridades de cada periodo, su comparación entre sí y su evaluación respecto al climático. Quizás en esta línea algunas de las representaciones puedan ser mejoradas con vistas a enfatizar estas características diferenciales, si bien es necesario disponer de una banco histórico suficientemente largo como para que la muestra resulte representativa de la población (incorporando los rasgos climáticos estables) sobre la que contrastar las submuestras, situación que en algunos de los emplazamientos aún no se ha conseguido. Desde el punto de vista de la *caracterización de fuentes,* se ha concretado y descrito una metodología basada en la combinación de medidas experimentales mediante captadores pasivos y simulaciones numéricas.

La estimación de dichas emisiones ha resultado un aspecto clave en todo problema de dispersión de contaminantes, y en especial, si se está tratando algo tan intangible como es el olor.

Algunas metodologías, como es el caso de las técnicas de olfatometría, abordan precisamente todo el tema del impacto por olores precisamente desde el punto de partida de la medida de emisiones.

Sin hacer una crítica a dicho enfoque, de nuevo se ha recurrido a la medida experimental de concentración en el aire ambiente de especies concretas, con el objetivo de obtener un cálculo de las emisiones potencialmente responsables de dichos niveles de inmisión.

Para ello se ha recurrido a técnicas de modelización inversa, apoyándose en las simulaciones realizadas por la aplicación DIMEDAR (desarrollo propio, que más tarde se complementó con un desarrollo posterior, la aplicación DIODISP) que proporciona una buena estimación de los factores dispersivos.

Se realizaron cálculos en diferentes EDAR aportando los primeros valores tentativos sobre tasas de emisión de sulfuro de hidrógeno.

La concreción sobre una especie química concreta, permite la ejecución de planes de reducción y seguimiento de su eficacia a escala de la planta, lo que no resulta tan evidente cuando se trabaja con el "olor" como magnitud.

En esta línea, existen numerosas vías de mejora del procedimiento, tanto en lo que se refiere a las medidas experimentales (por ejemplo usando mayor número de puntos de medida) como a la simulación numérica (mejora del procedimiento dispersivo, aumento de las resoluciones espaciales, incorporación de nuevos modelos de emisión,...).

Utilizando la misma metodología, sería posible obtener tasas de emisión simultáneamente para más de un compuesto, sin más que ampliar con nuevas especies las campañas experimentales con dosímetros.

En esta línea, la puesta a punto de capacidades de medida mediante captadores pasivos para nuevas especies

(añadidas a las ya practicadas de amoniaco y sulfhídrico) constituye un complemento de gran interés.

A caballo entre este punto y el anterior, se realizaron medidas mediante captación forzada en varios sistemas de desodorización de otras tantas plantas en la Comunidad Valenciana.

La presencia de varias etapas de lavado en estas instalaciones permite el muestreo en diferentes puntos del mismo de las concentraciones de las especies de interés, valorándose directamente los rendimientos en cada una de ellas.

Además, la liberación al ambiente de la corriente de aire final, proporciona una medida directa de la emisión que, dado la actual tendencia a cubrir los diferentes elementos de la planta, tratando mediante aspiración los gases liberados por la misma, constituye una interesante estimación experimental de una buena parte de las emisiones de la planta.

Otro aspecto tanto o más relevante, lo constituye la evaluación de la eficacia de dichos sistemas, que en ocasiones constituyen un sumidero de recursos sin una valoración clara de su eficacia.

En este sentido, esta metodología, de fácil aplicación, permitió no solamente valorar el rendimiento de dichos sistemas, sino entrar en un programa de optimización de los mismos, habiendo sido el diseño y construcción de un prototipo para la captación forzada de muestras una parte importante y exitosa de los trabajos (se encuentra en trámite de patente), abriéndose una prometedora puerta a la realización de mediciones experimentales en campo.

Para finalizar, destacar que la difusión de resultados ha sido un acicate explícito del proyecto desde el mismo momento de redacción de la oferta inicial, habiéndose publicado hasta la fecha, varios artículos internacionales en revistas del ISI, varios artículos en revistas no indexadas, la presentación de numerosos pósters y ponencias en congresos de ámbito nacional e internacional. Trabajos todos ellos, que no agotan ni mucho menos los resultados publicables que de esta tesis se han obtenido.

CAPÍTULO DÉCIMO

Bibliografía

Dile a un hombre que hay 300 billones de estrellas en el Universo, y te creerá...Dile que un banco está recién pintado, y tendrá que tocarlo para asegurarse

Raimond Verwei

- Barrios, A. F. y Carvajal, Y. (2006). Regionalización de índices de aridez y agresividad climática en Colombia utilizando análisis multivariado. Conformación estadística de una base de datos nacional homogénea .Tesis de grado. Universidad del Valle. Facultad de Ingeniería. Santiago de Cali
- Campíns, P., Molins, C., Sevillano, A.,(2001). o-Phthalaldehyde–N-acetylcysteine polyamine derivatives: formation and stability in solution and in C18 supports. *Journal of Chromatography B, 759*, 285–297.
- Cobos, M., & Silva, M. (1999). Continuous solid-phase extraction and dansylation of low-molecular-mass amines coupled on-line with liquid chromatography and peroxyoxalate chemiluminescence-based detection. J. Chrom. A., 848(I-II), 105-115.
- De Oliveira, A., Machado, A., Escobedo, J., (2002). Diurnal evolution of solar radiation at the surface in the city of Sao Paulo: seasonal variation and modelling. *Theor. Appl. Climatol.*, 71, 231-249.
- De Santis, F., Allegrini, I., Bellagotti, R., & Vichi, F. (2006). Development and field evaluation of a new diffusive sampler for hydrogen sulfide in the ambient air. *Anal. Bioanal. Chem, 384*, 897-890.
- Espinos, H. (2008). Procedimiento experimental para la estimación de nuiveles de inmisión de H₂S. Valencia, España.
- Espinos, H., Mantilla, E., & Azorín, C. (2008). Evaluación de un modelo meteorológico de diagnóstico en la generación de campos de viento en entornos locales

de topografía compleja. *Primeres Jornades de Meteorologia i Climatologia de la Mediterrània Occidental.* Baecelona: Tethys.

- Fowler, J., Cohen, L., & Jarvis, P. (1992). *Practical Statistics for field Biology. Second Edition.* Macclesfield: Wiley.
- Glasius, M., Funch, C., & Stroyer, H. a. (1999). Measurements of dioxide on Funen using diffusion tubes. *Atmos. Environ.*, *33*, 1177-1185.
- Gryning, S., Holtslag, A., Irwin, J., & Sivertsen, B. (1987). Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. *Atmos. Environ.*, 21, 79-89.
- Gudzhedzhiani, E. (1978). Effective coefficient of diffusion of acid gases in cement materiaL. *Chem. Abs., SRR 89*, 165-168.
- Hair, J.F., Anderson, R.E., Tatham, R.L. y Black, W.C. (1999) Análisis Multivariante (5^a edición). Ed. Prentice Hall.
- Hanna, S., Briggs, G., & Hosker, R. (1981). *Handbook on Atmospheric Diffussion*. TIC, US, DOE.
- Heal, M., O. M., & Cape, J. (1999). Overestimation of urban nitrogen dioxide by passive diffusion tubes: a comparative exposure and model study. *Atmos. Environ., 33*, 513-524.
- Jaeschike, W. (1977). New methods for the analysis of SO2 and H2S in remote areas and their application to the atmosphere. *Atmos. Environ.*, *12*, 715-721.
- Kjeld, I., & Bo, B. (1981). Seasonal variation in H2S emission to the atmosphere from intertidal sediments in Denmark. *Atmos. Environ.*, *16*, 855-865.
- Koch, O. (1978). General Aspects of Trace Analytical Methods II- Standard Reference Materials for trace analysis. *Pure & Appl. Chem, 50*, 1531–1699.
- Kourtidisa, K., Kelesisb, A., & and Petrakakisb, M. (2008). Hydrogen sulfide (H2S) in urban ambient air. *Atmos. Environ.*, *42*, 7476–7482.
- Li, J., Purnenedu, P., & Dasgusta, K. (1999). Chemiluminescence detection with a liquid core waveguide: Determination of ammonium with electrogenerated hypochlorite based on the luminolhypochlorite reaction. *Anal. Chim. Acta, 389*.
- Lin, G. y L. Chen. (2006). Identification of homogeneous regions for regional frequency analysis using the self-organizing map. Journal of Hydrology 324, pp 1– 9.
- Llavador, F., Espinós, H., Campos, A., & Mantilla, E. (2010). Estimation of hydrogen sulphide emissions at several

wastewater treatment plants through experimental measurements by using passive samplers. *Chem. Eng. Trans., 23*, 213-218.

- Llavador, F., Espinos, H., Mantilla, E., Gomez, T., Campos, A., & Coll, C. (2012). Characterization of the olfactory impact around a wastewater treatment plant: Optimization and validation of a hydrogen sulphide determination procedure based on passive diffusion sampling. *J. Air Waste Manage., 62*, 863-872.
- Mantilla Iglesias, E., Espinos-Morato, H., & Llavador Colomer, F. (2012). Caracterización del impacto olfativo en el entorno de una EDAR. Aproximación metodológica. *Tecnoambiente, XXII*(229), 9-21.
- McIntyre, A. (2000). Odour modelling and monitoring: The use of marker compounds such as hydrogen sulphide. *Proceedings of CIWEM/ Southern Water Approaches to Setting Odour Planning Conditions Workshop.*
- McKee, E. a. (1986). Laboratory validation of a passive length-of-stain dosimeter for hydrogen sulfide. *Am. Ind. Hyg. Assoc. J, 47*, 475–481.
- Mürvet, V., Tijen, E., Ahmet, E., Eroglu, O., Yavuz, A., Harry, B., y otros. (1998). A novel tube for ambient hydrogen sulfide determination. *Talanta, 47*, 585-593.
- Natush, D., Sewell, J., & Tanner, R. (1975). Determination of hydrogen sulfide in air. An assessment of impregnated paper tape methods. *Anal. Chem., 46*, 410-415.
- Pal Arya, S. (2009). *Introduction to Micrometeorology* (Second edition ed., Vol. 79). International Geophysics Series.
- Peña, D. (2002). Análisis de Datos Multivariantes. McGraw -Hill. España.
- Petersen, W., & Leonidas, G. (1986). *INPUFF 2.0 A Multiple Source Gaussian Puff Dispersion Algorithm. User's Guide.* Environmental Protection Agency, PB86-242450 U.S.
- Quintanar, A. (2009). A system for estimating Bowen Ratio and evaporation from waste lagoons. *Appli. Eng. Agric., 25*, 923-932.
- Rao, A. R. y Srinivas, V. (2006). Regionalization of watersheds by hybrid-cluster analysis. Journal of Hydrology, 318, pp 37–56.
- Ramis, G., & García, M. (1991). *Quimiometría.* Madrid: Síntesis.

- Schojoerring, J., Sommer, S., & Ferm, M. (1992). A simple passive sampler for measuring ammonia emission in the field. Water *Air Soil Poll.*, *62*, 13-24.
- Seibert, P., Beyrich, F., Gryning, S., Joffre, S., & Rasmussen, A. a. (2000). Review and intercomparison of operational methods for the determination of the mixing height. *Atmos. Environ.*, *34*, 1001-1027.
- Servant, J., & Delapart, M. (1981). Daily variations of the H2S content in atmospheric air at ground level in France. *Atmos. Environ.*, *16*, 1047-1052.
- Sevillano, A., Moliner, Y., Molins, C., & Campins, P. (2003). Rapid fluorimetric assay for primary amine groups in water samples. *Anal. Bioanal. Chem.*, *37*6, 918-922.
- Shooter, D., Watts, S., & Hayes, A. (1995). A passive sampler for hydrogen sulfide. *Environ. Monit. Assess., 38*, 11-23.
- Slatt, B., & Natush, D. (1977). Hydrogen sulfide in the atmosphere of the northern equatorial atlantic ocean and its relation to the global sulfur cycle. *Atmos. Environ.*, *12*, 981-991.
- Spedding, D., & Cope, D. (1984). Field measurements of hydrogen sulphide oxidation. *Atmos. Environ., 18*(DOI: 10.1016/0004-6981(84)90354-8), 1791-1795.
- Stuetz, R. & Frechen, F.B, (2001). *Odours in Wastewater Treatment* (First Edition ed.). IWA Publishing.
- Taransankar, P., Ashes, G., & Durga, S. (1986). Use of silver-Gelatin complex for the microdetermination of hydrogen sulfide in the atmosphere. *Analyst*(III).
- Turner, S., & and Liss, P. (1985). Measurement of various sulfur gases in a coastal marine environment. *J. Atmos. Chem.*, *2*, 223-232.
- User's Guide to the CG-MATHEW/ADPIC Models (1997), Version 5.0. Lawrence Livermore National Laboratory, Atmospheric Release Advisory Capability, CA.
- Venkatram, A. a. (1988). *Lectures on Air Pollution Modelling.* (A. a. Venkatram, Ed.) Boston, EEUU: American Meteological Society.
- Walcek, C. (2002). Effects of wind shear on pollution dispersion. *Atmos. Environ.*, *36*, 511-517.
- Walker, H. (1995). ARAC Map Projection Package.
- Wang, I. (1981). The determination of surface-layer stability and eddy fluxes using wind speed and vertical temperature gradient measurements. *J Appl. Met, 20*, 1241-1248.

Weber, R. (1998). Estimators for the standard deviations of lateral, longitudinal and vertical wind components. *Atmos. Environ., 32*, 3639-3646.

www.odalog.com www.draeger.com

Glosario de términos

Lo importante en ciencia no es tanto obtener nuevos hechos, como descubrir nuevas formas de pensar sobre ellos

> William Lawrence Bragg (1890-1971)

AGUA MILLI-Q Agua ultra pura, usada principalmente en laboratorio, que ha sido filtrada y purificada por osmosis inversa, quedándose como agua desionizada.

AIRE CERO Aire ambiente que contiene menos de 0,1 ppm de hidrocarburos.

AMONIFICACIÓN Proceso en el que las bacterias (amonificantes) transforman compuestos orgánicos nitrogenados en amoníaco, como parte del ciclo del nitrógeno.

ANÁLISIS CLÚSTER (AC) Método estándar de análisis multivariado que puede reducir una compleja cantidad de información en pequeños grupos (clústers), donde los miembros de cada uno de ellos comparten características similares (Lin & Chen, 2006). El AC se considera una técnica eminentemente exploratoria que no utiliza ningún tipo de modelo estadístico para llevar a cabo el proceso de clasificación (Hair et al., 1999) y, por ello, se le podría calificar como una técnica de aprendizaje no supervisado, decir, una técnica muy adecuada para extraer es información de un conjunto de datos sin imponer restricciones previas en forma de modelos estadísticos (Barrios & Carvajal, 2006). El AC tiene por objeto formar grupos o clústers homogéneos en función de las similitudes o similaridades entre ellos (Peña, 2002). Los grupos se forman de tal manera que cada objeto es parecido a los que hay dentro del clúster con respecto a algún criterio de selección predeterminado (Rao & Srinivas, 2006).

ANÁLISIS DE LEVENE Prueba estadística inferencial utilizada para evaluar la igualdad de las varianzas para una variable calculada para dos o más grupos. Algunos procedimientos estadísticos comunes asumen que las varianzas de las poblaciones de las que se extraen diferentes muestras son iguales. La prueba de Levene evalúa este supuesto. Si el P-valor resultante de la prueba de Levene es inferior a un cierto nivel de significación (típicamente 0,05), es poco probable que las diferencias obtenidas en las variaciones de la muestra se hayan producido sobre la base de un muestreo aleatorio de una población con varianzas iguales. Por lo tanto, la hipótesis nula de igualdad de varianzas se rechaza y se concluye que hay una diferencia entre las variaciones en la población.

ANÁLISIS T (prueba t de Student) Prueba en la que el estadístico utilizado tiene una distribución t de Student si la hipótesis nula es cierta. Se aplica cuando la población estudiada sigue una distribución normal pero el tamaño muestral es demasiado pequeño como para que el estadístico en el que está basada la inferencia esté normalmente distribuido, utilizándose una estimación de la desviación típica en lugar del valor real.

ANÁLISIS DE VARIANZA (ANOVA) Colección de modelos estadísticos y sus procedimientos asociados. El análisis de la varianza permite determinar si diferentes tratamientos muestran diferencias significativas o por el contrario puede suponerse que sus medias poblacionales no difieren.

CAPA LÍMITE PLANETARIA (CLP) Capa de normalmente unos 600-800 metros de altura, si bien su espesor puede variar en función de numerosos factores como pueden ser la topografía, intensidad del viento, advección de calor y humedad, grado de calentamiento o enfriamiento del suelo, etc. En dicha capa, la elevación convectiva de burbujas de aire al calentarse junto al roce del aire contra la superficie rugosa del suelo hace que se cree una mezcla turbulenta de aire. Durante el día debido al aporte de calor originado por el Sol se incrementa la mezcla vertical de aire (el aire caliente sube y el frío baja) lo cual hace que se incremente el grosor de dicha capa, alcanzando su máximo a primeras horas de la tarde, cuando las temperaturas acostumbran a marcar los máximos diarios. Por el contrario, se produce el proceso inverso durante la noche, debido al enfriamiento del suelo que debilita la turbulencia.

CAPA DE MEZCLA ATMOSFERICA (CMA) Zona que tiene una temperatura potencial constante y humedad específica

con la altura. La profundidad de la capa de mezcla atmosférica se conoce como altura de mezcla.

CROMATOGRAFÍA DE GASES La cromatografía de gases es una técnica muy utilizada para separar los diferentes compuestos volátiles de una muestra. La fase móvil es un gas inerte, (nitrógeno o helio) que transporta la muestra volatilizada en el inyector a través de la columna cromatográfica. La fase estacionaria generalmente está constituida por una columna de metil polisiloxano, o derivados de éste. Los diferentes compuestos se separan en función de su grado de volatilidad (punto de ebullición, peso molecular) y su afinidad por la fase estacionaria. Entre los detectores más utilizados caben mencionar el detector FID (ionización de llama) que por su alta versatilidad, hace posible la detección de un elevado tipo de compuestos.

CUADRATURA DE ROMBERG Técnica de integración numérica diseñada para obtener integrales numéricas (aproximaciones) de manera eficiente basadas en la regla del trapecio. Se genera así una matriz triangular cuyos elementos son estimaciones numéricas de la integral definida.

DIFUSIÓN MOLECULAR Movimiento de las moléculas de los componentes de una mezcla producida por la diferencia de concentración existente en el sistema. La difusión de las moléculas se produce en la dirección necesaria para eliminar el gradiente de concentración. Si se mantiene el gradiente añadiendo continuamente material nuevo a la región de la alta concentración y eliminándolo de la región de baja concentración, la difusión será continua. Ello se presenta a menudo en las operaciones de transferencia de materia y en sistemas de reacción.

DOWNWASH (o efecto suelo) Fenómeno fluidodinámico que ocasiona una menor elevación del penacho, arrastrando los humos a la zona de recirculación, y que da origen a la fumigación de éstos sobre el suelo. Cuando los gases emitidos por la chimenea se encuentran arrastrados por la zona de baja presión en la estela de la chimenea y forzados hacia abajo mezclándose con los vórtices detrás de la chimenea, se habla de "downwash", el cual depende del cociente entre la velocidad de salida de los humos y la del viento incidente, del ángulo de viraje del viento incidente relativo a la dirección de desplazamiento y del diseño de la chimenea.

ESFUERZOS DE REYNOLDS En el flujo turbulento existen fuerzas de cizalla, mucho mayores que las que existen en el

flujo laminar, siempre que haya un gradiente de velocidad a través de un plano de cizalla. El mecanismo de la cizalladura turbulenta depende de las velocidades de fluctuación en la turbulencia anisotrópica. Los esfuerzos cortantes turbulentos, se llaman esfuerzos de Reynolds o también conocidos como esfuerzos de remolino y se miden mediante coeficientes de correlación del tipo R_{ul"y.}

$$R_{u'v'} = \frac{\overline{u'v'}}{\sqrt{(u')^2 (v')^2}}$$

Para relacionar los esfuerzos de Reynolds con las correlaciones de velocidades de fluctuación, se puede utilizar el principio de cantidad de movimiento.

ESPECTROSCOPÍA DE EMISIÓN DE LLAMA Método analítico basado en la medida de la energía radiante emitida por átomos (o iones o moléculas) de un elemento que se encuentra en estado de vapor. Esta transformación reversible entre un estado electrónico de base y un estado electrónico excitado, origina una señal óptica que es la que se mide.

FENÓMENO DE MESOESCALA Fenómeno que tiene una duración entre 1 y 12 horas o una extensión horizontal entre 1 y 100 Km o una altura entre 1 y 10 Km. Ejemplo de estos fenómenos son las tormentas, tornados, brisa de mar, etc.

FLUJO DESCENDENTE AERODINÁMICO Situación que ocurre cuando la pluma (penacho) es arrastrada hacia abajo en un área de estela turbulenta creada cuando el aire se mueve sobre y alrededor de los edificios. Esto puede incrementar las concentraciones de contaminantes inmediatamente a sotavento de la fuente.

FLUORIMETRÍA Técnica espectrofotométrica que se basa en la absorción de radiación por parte del analito a medir en una muestra y su posterior emisión. Su fundamento es la fluorescencia molecular que se basa en la emisión de radiación por electrones excitados que vuelven al estado fundamental, de manera que se emite una radiación de una longitud de onda distinta a la absorbida.

FRECUENCIA DE BRUNT-VÄISÄLÄ En la dinámica atmosférica, es la frecuencia angular en la que una parcela

desplazada verticalmente oscilará dentro de un entorno estáticamente estable (frecuencia de flotabilidad).

FUMIGACIÓN Condición que ocurre cuando una pluma se libera justo debajo de una capa de inversión y los contaminantes son transportados rápidamente hacia el suelo.

INVERSIÓN POR SUBSIDIENCIA Tipo de inversión elevada, casi siempre asociada con sistemas de alta presión cuando el aire desciende y se calienta sobre una capa de aire más frío.

ISOTROPÍA Característica de algunos cuerpos cuyas propiedades físicas no dependen de la dirección en que son examinadas. Es decir, se refiere al hecho de que ciertas magnitudes vectoriales conmensurables dan resultados idénticos independientemente de la dirección escogida para dicha medida.

LEY DE FICK Ley cuantitativa en forma de ecuación diferencial que describe diversos casos de difusión de materia o energía en un medio en el que inicialmente no existe equilibrio químico o térmico. En situaciones en las que existen gradientes de concentración de una sustancia, o de temperatura, se produce un flujo de partículas o de calor que tiende a homogeneizar la disolución y uniformizar la concentración o la temperatura. El flujo homogeneizador es una consecuencia estadística del movimiento azaroso de las partículas que da lugar al segundo principio de la termodinámica, conocido también como movimiento térmico casual de las partículas.

LEY DE HENRY Ley formulada que expresa la volatilidad de las sustancias, es decir la facilidad con que una sustancia disuelta en agua se transforma en gas y pasa a la atmósfera. A una temperatura constante, la cantidad de gas disuelto en un líquido es directamente proporcional a la presión parcial que ejerce ese gas sobre el líquido.

MÉTODO DEL ELECTRODO SELECTIVO Método para la determinación de las concentraciones de iones disueltos. Se utiliza para medir la concentración de determinado ion en un electrolito. Para hacerlo, mide la diferencia de potencial causada por el contacto del electrodo con el ion en cuestión, respecto de la diferencia de potencial en el electrodo de referencia. Estos electrodos ion selectivos poseen una membrana ion selectiva, que sólo responde al contacto con un determinado ion disuelto en la solución, y la diferencia de potencial generada a cada lado de la membrana se

utiliza para medir la concentración del ion en la solución estudiada.

MODELO DE GRADIENTE Modelo consistente en un algoritmo específico para la resolución de modelos de modelos de programación lineal (PNL) sin restricciones, perteneciente a la categoría de algoritmos generales de descenso, donde la búsqueda de un mínimo está asociado a la resolución secuencial de una serie de problemas unidimensionales. Al método del gradiente también se le conoce como método de Cauchy o método del descenso más pronunciado.

MOVIMIENTO BROWNIANO Movimiento aleatorio que se observa en algunas partículas microscópicas que se hallan en un medio fluido. El movimiento estocástico de estas partículas se debe a que su superficie es bombardeada incesantemente por las moléculas (átomos) del fluido sometidas a una agitación térmica. Este bombardeo a escala atómica no es siempre completamente uniforme y sufre variaciones estadísticas importantes. Así, la presión ejercida sobre los lados puede variar ligeramente con el tiempo, y así se genera el movimiento observado.

NÚMERO DE FROUDE (Fr) Número adimensional que relaciona el efecto de las fuerzas de inercia y la fuerzas de gravedad que actúan sobre un fluido.

PARÁMETROS DE OBUKNOV Serie de parámetros usados para describir los efectos de contorno y frontera en flujos turbulentos, particularmente en los primeros diez kilómetros de la capa límite atmosférica.

PROCESO DE DERIVATIZACIÓN Proceso mediante el cual se transforma el analito por una reacción química a un derivado más fácil de analizar. En el caso de la cromatografía de gases se derivatiza para obtener especies más volátiles y no tener que usar temperaturas demasiado altas que puedan descomponer los analitos en el equipo, o la precipitación indeseada en la columna que ensucia la columna y además altera los resultado obtenidos. Otra posible razón por la que se usa la derivatización es para la inserción de un grupo funcional que aumente la resolución en la detección.

PRUEBA DE TUKEY prueba estadística utilizada general y conjuntamente con la ANOVA. Se usa en experimentos que implican un número elevado de comparaciones. Es de fácil cálculo puesto que se define un solo comparador, resultante del producto del error estándar de la media por el valor tabular en la tabla de Tukey usando como numerador el número de tratamientos y como denominador los grados de libertad del error.

QUENCHING (Desactivación fluorescente) Proceso por el que se produce una disminución en la intensidad de la fluorescencia emitida por una determinada sustancia. La desactivación fluorescente es altamente dependiente de la presión y la temperatura.

QUIMIOLUMINESCENCIA Fenómeno por el que, en algunas reacciones químicas, la energía liberada no sólo se emite en forma de calor o de energía química, sino también en forma de luz. La quimioluminiscencia es un fenómeno que se produce cuando, en una reacción química, los electrones saltan de las capas más altas de los átomos a las más bajas.

REACCIÓN DE BERTHELOT El método de Berthelot se basa en la sustitución de un hidroxilo por un halógeno, que al encontrarse en presencia de ese halógeno, produce el alcano correspondiente, en este caso el amoniaco.

REACTIVO DE NESSLER Reactivo químico usado para detectar pequeñas cantidades de amoníaco o catión amonio (NH_4^+) . En presencia de amoníaco o catión amonio, toma coloración amarilla-naranja y en grandes concentraciones se forma un precipitado color naranja. El reactivo de Nessler está compuesto de una solución acuosa al 5 % de yoduro potásico, una solución de 2,5 % de cloruro de mercurio y otra al 16 % de hidróxido de potasio.

SILICA GEL (o gel de sílice) Es una forma granular y porosa de dióxido de silicio hecho a partir de silicato sódico. A pesar de su nombre es un gel sólido y duro. Es un material muy poroso (alrededor de 800 m²/g), lo que le convierte en un absorbente de agua, por este motivo se utiliza para reducir la humedad en espacios cerrados; normalmente hasta un 40%. Es un producto que se puede regenerar una vez saturado, si se somete a una 120-180°C. temperatura de entre Calentándolo desprenderá la humedad que haya absorbido por lo que puede reutilizarse una y otra vez sin que ello afecte a la capacidad de absorción, ésta solo se verá afectada por los contaminantes que posea el fluido absorbido.

TEMPERATURA POTENCIAL Variable termodinámica ampliamente utilizada en meteorología que representa la temperatura que una parcela de aire seco a una presión *p* y

temperatura T (en Kelvin) tendría si fuera comprimida o expandida adiabáticamente hasta una presión de referencia p_o , normalmente 1000 *mb*.

TEST DE DIXON (Q TEST) Test estadístico que se utiliza para identificar y/o discriminar valores anómalos en una distribución de medidas ("outlayers").

VIENTO ANABÁTICO (brisa de valle) Viento que sopla ascendentemente por una pendiente montañosa. Este tipo de brisa ocurre durante el día, con un tiempo soleado en calma. Una elevación o montaña con calor de transferencia calentado por el sol, hace mover el aire circundante; y como el aire del valle no se calienta como el del alto, entonces se produce un viento húmedo y fresco que se eleva por una ladera y que a su paso se condensa provocando la formación de nubes de tipo lenticular en la cima. Es un fenómeno puramente convectivo. Se crea una región de más baja presión, que hace que el aire fluya hacia esa región, causando viento. Normalmente el aire se va enfriando cuando gana altura (proceso adiabático), por debajo de su punto de rocío y forma nubes de tipo cúmulo, lo que hace que normalmente se produzca lluvia o al menos nubes de tormenta.

VIENTO CATABÁTICO (brisa de montaña) Viento local, producido por el desplazamiento de aire frío por acción de la gravedad, desde regiones topográficamente más elevadas hacia otras de menor altitud. Este tipo de flujo se llama brisa de montaña. Se establece durante la noche, cuando el suelo se enfría por radiación. El aire en contacto con ese suelo frío se enfría a su vez y se vuelve más denso que el aire que le rodea; entonces lo gravedad le obliga a descender por la pendiente del terreno.



El viento catabático, es más fuerte que el anabático.

El enfriamiento radiativo durante la noche clara baja la temperatura del suelo. Por lo tanto, el aire en contacto con el suelo se enfría por conducción y se hace más denso que el aire en d en la atmósfera libre. Entonces, por gravedad, se establece un flujo de aire descendente a lo largo de la pendiente. De esta forma, el aire se mueve hacia presiones más elevadas y, si se comprime adiabáticamente, se calienta y el movimiento cesa. De hecho, el aire permanece en contacto con el suelo frío y continúo perdiendo calor; por lo tanto, la compresión no es adiabática y el movimiento continúa. En general, la brisa de montaña es bastante débil. En caso de que las montañas estén próximas al mar, la brisa de montaña puede reforzar la brisa de tierra durante la noche provocando en el mar vientos de tierra muy fuertes.

VIENTO DE CIZALLA Cambio de la velocidad o de la dirección del viento en el espacio, incluso las corrientes ascendentes y las corrientes descendentes. Se sigue que cualquier fenómeno atmosférico o cualquier obstáculo material a la circulación del viento, que produzca un cambio en su velocidad o dirección, ocasiona cizalladura del viento.

ANEXO A

Expresiones utilizadas para el cálculo de estadísticos en los trabajos de modelización¹⁶

Basta un poco de espíritu aventurero para estar siempre satisfechos, pues en esta vida, nada sucede como deseábamos, como suponíamos, ni como teníamos previsto

Noel Clarasó i Serrat (1899-1985)

Para algunos parámetros, el error inevitable incrementa con el valor medido. La normalización que se hace a la medida, es uno de los posibles caminos para evitar los grandes errores cometidos por pequeñas observaciones extremas que dominan el error de la medida. Para tal efecto existen un grupo de estadísticos.

Con objeto de valorar cuál o cuáles de los modelos de emisión utilizados ajusta mejor a las medidas experimentales, y por ello reproduce de forma más realista el campo de inmisiones, se ha procedido con el cálculo de diversos estadísticos empleados comúnmente en trabajos de modelización y de contaminación atmosférica.

En este anexo, quedan presentes tanto las expresiones analíticas utilizadas, como una breve explicación del significado estadístico de algunas de ellas.

En las expresiones que se disponen a continuación de describen los valores predichos por el modelo (P_i) y los observados (O_i) para cualquier lugar y tiempo.

¹⁶ Expressiones en parte extraídas del GAW Report No.181 Overview of Tools and Methods for Meteorological and Air Pollution Mesoscale Model Evaluation and User Training (COST ACTION 728)

ERROR (E_i) $E_i = P_i - O_i$

VALORES MEDIOS (\vec{P} y \vec{O})

$$\overline{O} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} O_i$$
$$\overline{P} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} P_i$$

DESVIACIONES STANDARD (σ_{P}, σ_{O})

$$\sigma_o = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (O_i - \overline{O})^2}$$
$$\sigma_P = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (P_i - \overline{P})^2}$$

BIAS (diferencia media)

El estadístico BIAS nos da una medida del signo del error de las simulaciones. Esto es particularmente útil en los desarrolladores de modelos, para encontrar las partes débiles del modelo. El BIAS puede variar tanto en el espacio como en el tiempo. Proporciona información de los errores sistemáticos del modelo para valores particulares observados. Tiene la siguiente expresión:

$$BIAS = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} E_i = \overline{P} - \overline{O}$$

5.- STDE (Desviación estándar del error)

La desviación estándar del error, evalúa la parte no sistemática del error y es una medida de la predictibilidad del modelo. La STDE suele aumentar cuanto mayor es el

pronóstico. Cuando ésta tiene la misma magnitud que el modelo simulado, se puede interpretar como si el error estuviera inicialmente saturado debido a deficiencias en la hipótesis del modelo. Su expresión es:

$$STDE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left[\left(P_i - \overline{P} \right) - \left(O_i - \overline{O} \right) \right]^2}$$

SKVAR (Varianza técnica o skill varianza)

La SKVAR evalúa la habilidad que tiene el modelo para reproducir la varianza de los datos observados.

$$SKVAR = \frac{\sigma_P}{\sigma_O}$$

RMSE (RAIZ DEL ERROR CUADRÁTICO MEDIO: Root Mean Square Error)

Es una simple combinación del BIAS y el STDE y expresa el error total cometido por el modelo. Es un estadístico muy útil para la comparación entre diferentes modelos.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (P_i - O_i)^2} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} E_i^2} = \sqrt{BIAS^2 + STDE^2}$$

8.- r (COEFICIENTE DE CORRELACIÓN)

El coeficiente de correlación es similar a STDE. Sin embargo r es adimensional y el STDE tiene las dimensiones del parámetro medido. En el uso del coeficiente de correlación, hay que tener cuidado cuando se usa éste con series de tiempo larga (años). Por ejemplo, la amplitud anual de la temperatura es normalmente grande por lo que el valor que suministrará en este caso el factor de correlación estará dominado por esta estructura de gran escala. Esto puede llevar el peligro de esconder los errores a pequeña escala como pueden ser los ciclos diurnos. El factor de correlación tiene la siguiente expresión:

$$r = \left[\frac{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} (O_i - \overline{O})(P_i - \overline{P})}{\sigma_P \sigma_O}\right]$$

Para una mejor visualización de los estadísticos utilizados y a modo de resumen se presentan dichas expresiones y su valor ideal en la Tabla A.1.

Tabla A.1Resumen de los principales estadísticos utilizados en lostrabajos de simulación

NOMBRE	AC ¹⁷	EXPRESIÓN	VALOR IDEAL
Average Observed Value (Valor observado medio)	\overline{O}	$\overline{O} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} O_i$	Sin valor establecido
Average Modelled Value (Valor medio del modelo)	\overline{P}	$\overline{P} = rac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}P_i$	El mismo que \overline{O}
Standard Deviation of Measurements (Desviación Standard de las medidas)	σ_o	$\sigma_o = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (O_i - \overline{O})^2}$	Sin valor establecido
Standard Deviation of Model Results (Desviación Standard de los resultados modelizados)	$\sigma_{_P}$	$\sigma_P = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (P_i - \overline{P})^2}$	El mismo σ_o
Average Normalized Absolute BIAS (Promedio Normalizado Absoluto del	ANB	$ANB = \left(\frac{\overline{P} - \overline{O}}{\overline{O}}\right)$	0

¹⁷ AC: Acrónimo

BIAS)			
Mean Normalized BIAS (Media Normalizada del BIAS)	MNB	$MNB = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{P_i - O_I}{O_i} \right)$	0
Mean Normalised Error (Media Normalizada del Error)	MNE	$MNE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{ P_i - O_I }{O_i} \right)$	0
Standard Deviation of Error (Desviación Standard del Error)	STDE	$STDE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left[\left(P_i - \overline{P} \right) - \left(O_i - \overline{O} \right) \right]^2}$	0
Fractional BIAS (BIAS Fraccionado)	FB	$FB = \frac{\left(\overline{P} - \overline{O}\right)}{0.5\left(\overline{P} + \overline{O}\right)}$	0
Geometric Mean BIAS (Media Geométrica del BIAS)	MG	$MG = \exp\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\ln P_{i} - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\ln O_{i}\right)$	1
Geometric Variance (Varianza Geométrica)	VG	$VG = \exp\left(\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\ln P_{i} - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\ln O_{i}\right)^{2}\right)$	1
Skill Variance (Varianza Técnica)	SKVAR	$SKVAR = \frac{\sigma_P}{\sigma_O}$	1
Root Mean Square Error (Raíz del Error Cuadrático Medio)	RMSE	$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (P_i - O_i)^2} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} E_i^2} = \sqrt{BIAS^2 + STDE^2}$	0
Normalized Mean Square Error (Error Cuadrático Medio Normalizado)	NMSE	$NMSE = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (P_i - O_i)^2}{\overline{P}\overline{O}}$	0

Correlation Coefficient (Coeficiente de Correlación)	r	$r = \left[\frac{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} (O_i - \overline{O})(P_i - \overline{P})}{\sigma_P \sigma_O}\right]$	1
Coefficient of Variation (Coeficiente de Variación)	CV	$CV = \frac{STDE}{\overline{O}}$	0

ANEXO B

Cálculo de las diferentes expresiones para el modelo de emisión propuesto

Insistir en los experimentos y no en los silogismos Robert Boyle (1627-1691)

B.1 CONSTANTE PSICOMÉTRICA

La expresión de la constante psicométrica viene dada por¹⁸:

$$\gamma(T, P, t) = \frac{c_p(T, t)P}{\varepsilon\lambda}$$
 (Ecuación B. 1)

En donde:

 $\gamma(T,P,t)$: Constante psicométrica [kPaK⁻¹]

P(t) : Presión atmosférica [kPa]

Dicha variable se ha de corregir por la altura. Para ello se

ha aplicado la siguiente fórmula: $P_{cor}(t) = P_b + \frac{z}{8}$

Y donde:

Pcor presión corregida;

*P*_b: presión bruta;

z: altura del emplazamiento

 λ : Calor latente de vaporización del H₂S¹⁹: 0,54758 [MJkg⁻¹]

 $c_p(T,t)$: Calor específico a presión constante del H₂S [MJkg⁻¹K⁻¹]

¹⁸ Datos extraidos de Richard G.Allen, Luis S. Pereira, Dirk Raes, Martin Smith. Informe FAO Irrigation and Drainage Paper No.56. pag.32

¹⁹ P.J. Linstrom and W.G. Mallard. Eds., NIST Chemistry WebBook. NIST

$$c_p(H_2S) = [7,2+0,0036(T(t))] \left[\frac{4,7*10^{-3}}{34,08} \right]$$
 y cuya T está en

Kelvin.

 ${}^{\mathcal{E}}$: Ratio del peso molecular del vapor de H_2S entre el peso molecular del aire seco = 1,118 (Se ha considerado el peso molecular del H_2S como 34 uma y el peso molecular del aire seco como 28,8 uma)

B.2 PRESIÓN DE VAPOR DE SATURACIÓN Y PENDIENTE DE LA PRESIÓN DE VAPOR DE SATURACIÓN-TEMPERATURA

Para el cálculo de la presión de vapor de saturación del H_2S se ha empleado la ecuación de Antoine. Dicha ecuación tiene la siguiente expresión:

$$\log_{10} P_{vap}(T,t) = A - \begin{bmatrix} B \\ T(t) + C \end{bmatrix}$$
 (Ecuación B.2)

donde T(t) está en K;

 $P_{vap}(T,t)$ en bares y cuyos coeficientes²⁰ para el sulfuro de hidrógeno son: A = 4,22882 ; B = 806,933 ; C = 251,390

Despejando y convirtiendo $P_{vap}(T,t)$ en kPa:

$$P_{vap}(T,t) = \frac{10^{\left[A - \left(\frac{B}{T(t) + C}\right)\right]}}{0,01}$$

(Ecuación B. 3)

Para hallar la pendiente (
$$\Delta$$
) hacemos la $\displaystyle rac{\partial P_{\scriptscriptstyle vap}}{\partial T}$

 $^{^{20}}$ Datos extraidos de Poling. B.; Prausnitz. J.; O'Connell. J.; The Properties of Gases and Liquids. 5th edition. McGraw Hill. New York. 2001

Por lo que:

$$\Delta = \frac{\partial P_{vap}}{\partial T} = 100 * \frac{B}{\left(T(t) + C\right)^2} * 10^{\left(A - \frac{+B}{T(t) + C}\right)}$$
 (Ecuación B.4)

B.3 RADIACIÓN NETA

Para el cálculo de la radiación neta se ha utilizado la expresión propuesta por Ham (1999):

$$R_n(T,t) = 0.87R_s(t) - 49$$
 (Ecuación B.5)

Donde R_n es la radiación neta y R_s la radiación solar (tanto incidente como reflejada), ambas expresadas en Wm⁻². En la expresión hemos considerado para este caso en concreto que la radiación solar reflejada es insignificante con respecto a la radiación solar incidente.

B.4 COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA

Se ha hallado el valor de dicho coeficiente mediante la expresión:

$$C_e = \frac{k^2}{\ln^2 \left(\frac{z_i}{z_0} \right)}$$

(Ecuación B.6)

En donde

 C_{ε} es el coeficiente de transferencia (adimensional);

k es la constante de Von Karman (en este caso hemos tomado 0,4), también adimensional;

 z_i es la altura de medida sobre la superficie en metros;

 z_0 es la rugosidad de la superficie expresada también en metros (cuyo valor en este caso es 0,0001) (Oke, 1987).

ANEXO C

Esquemas e imágenes del equipo de captación forzada

Insistir en los experimentos y no en los silogismos

Robert Boyle (1627-1691)

Con objeto de dar una información más detallada sobre el captador de nueva generación realizado por el CEAM, se adjuntan los esquemas del diseño electrónico (Figura C.1) y del diseño mecánico (Figura C.2 y Figura C.3).

Por una parte, para una mayor comprensión del funcionamiento del equipo, también se adjunta el diagrama de flujo de software (Figura C.4).

Por otra parte, se muestran unas imágenes del equipo en pleno rendimiento durante la realización de una campaña de medidas en campo (Figura C.5).

Por último, resaltar que dicho prototipo está en vías de conseguir la patente como equipo de medida de captación forzada de gases en medios corrosivos y de peligrosidad alta.

ESTE CAPÍTULO ESTÁ PROTEGIDO BAJO PROPIEDAD INTELECTUAL.

PARA CUALQUIER DUDA O MÁS INFORMACIÓN SOBRE EL CAPÍTULO POR FAVOR PÓNGASE EN CONTACTO CON EL AUTOR.

E.mail: hector.espinos@uv.es

Artículos publicados

La Ciencia se corrompe con facilidad si dejamos que se estanque

Edmund Burke (1729-1797)

Como se ha comentado anteriormente, la divulgación de los resultados obtenidos fue una premisa a lo largo de la realización de la tesis.

Por esta razón, se presentan los artículos publicados más relevantes que han sido fruto de la misma y son consecuencia del trabajo realizado a raíz de esta investigación.

Para no extenderse en cuanto a volumen, se ha decidido adjuntar las dos primeras páginas de cada artículo, presentando todos los datos (entre ellos el DOI) para su búsqueda. No obstante, también se adjuntan en el CD de Material Complementario que acompaña a la tesis los artículos completos.
Characterization of the olfactory impact around a wastewater treatment plant: Optimization and validation of a hydrogen sulfide determination procedure based on passive diffusion sampling

JOURNAL OF AIR & WASTE MANAGEMENT ASSOCIATION Published 18 Jul 2012

IMPACT FACTOR (2013): 1,171 *BY CATEGORY*: 30/46 in Environmental Engineering (Q3) 55/76 in Atmospheric Sciences (Q3)

Estimation of hydrogen sulfide emission rates at several wastewater treatment plants through experimental concentration measurements and dispersion modelling

JOURNAL OF AIR & WASTE MANAGEMENT ASSOCIATION Published 26 Jun 2012

IMPACT FACTOR (2013): 1,171 *BY CATEGORY*: 30/46 in Environmental Engineering (Q3) 55/76 in Atmospheric Sciences (Q3) Monitoring olfactory impacts associated with wastewater treatment plants by using diffusive samplers for the determination of hydrogen sulphide

> CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS Published in 2010

HINDEX (2009-2014): 15 BY CATEGORY: Chemical Engineering (Q2)

Estimation of hydrogen sulphide emissions at several wastewater treatment plants through experimental measurements by using passive samplers

CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS Published in 2010

HINDEX (2009-2014): 15 BY CATEGORY: Chemical Engineering (Q2) "La educación científica de los jóvenes, es al menos tan importante, quizá incluso más, que la propia investigación"

Gleen Theodore Seaborg (1912-1999)

"Ha sido un largo camino, pero ya estamos aquí"

Alan Shepard (tras caminar por la luna)

MATERIAL COMPLEMENTARIO A

Descripción de las EDAR objeto de estudio

Cuán terrible es lo que los científicos guardan en sus portafolios

Nikita Jrushchov (1891-1971)

A.1 EDAR DEL GRAO DE CASTELLÓN

La EDAR de Castellón se encuentra situada al noreste de la capital, en una zona de marjal sin accidentes orográficos relevantes.

Actualmente el límite de la ciudad queda a unos 2.000 metros al oeste de la misma, estando previsto su crecimiento dirección al mar, con la perspectiva de un conflicto potencial con la actividad depuradora, puesto que se reduce el margen de seguridad entre la planta y las zonas habitables que se expanden. Se trata pues, de un emplazamiento muy abierto sin grandes constricciones, y, en dónde el sistema de brisas va a marcar el sistema dispersivo (Figura A.1)



Se trata de una instalación de carácter urbano (pues sirve a la ciudad de Castellón) e industrial (recoge también las aguas vertidas por los polígonos del extrarradio). Trata un caudal medio de 43.250 m³/día que recoge de una población de alrededor de 163.000 habitantes (Figura A.2).



Figura A.2 Vista aérea de la EDAR del Grao de Castellón (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

A.2 EDAR DE LA CONCA DEL CARRAIXET (ALBORAYA)

La planta (Figura A.3) se sitúa en medio de la plana costera valenciana, en un entorno próximo básicamente llano y sin accidentes orográficos significativos (una pendiente muy suave y uniforme hacia el interior que necesita más de 20 kilómetros para ascender 100 metros).



Figura A.3 Localización de la EDAR de la Conca del Carraixet (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

El cauce del barranco del Carraixet en su tramo final, que discurre por sus proximidades, constituye quizás el elemento de forzamiento aéreo de mayor relevancia, aunque no parece suponer un condicionante apreciable para la circulación atmosférica a dicha altura.

Se trata por lo tanto de un emplazamiento muy abierto, sin grandes constricciones al flujo de aire, bajo la influencia directa y repetitiva de las células de brisa costera, (que en estas latitudes alcanzan un gran desarrollo, especialmente durante el periodo estival, siendo frecuentes durante todo el año, incluso en invierno).

En cuanto al funcionamiento de la planta, la EDAR de Conca del Carraixet es de las estaciones que presenta mayores dimensiones, ya que fue ampliada en el 2007 para permitir el tratamiento de $40.000 \text{ m}^3/\text{día}$ (Figura A.4).

Recibe y trata las aguas residuales de una población aproximada de 141.707 habitantes, con un caudal medio de entrada de 38.962 m³/día y un perfil urbano y rural, dado que la mayoría de los trece municipios de la comarca de L'Horta Nord, que vierten sus aguas residuales a la EDAR, tienen una histórica tradición agrícola.



Figura A.4 Vista aérea de la EDAR de la Conca del Carraixet (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

A.3 EDAR DE QUART-BENAGER (QUART DE POBLET)

La presente planta de depuración de aguas (Figura A.5) se sitúa en las inmediaciones del nuevo cauce del río Turia, en un tramo que discurre según una orientación aproximadamente NNW-SSE, a una distancia entre seis y siete kilómetros del mar, en el margen suroccidental del casco urbano de Valencia, en una zona libre de edificaciones próximas.

Se trata de un emplazamiento muy abierto, con una orografía circundante muy suave, en la que el cauce del río, constituye sin duda el mayor condicionante o elemento de forzamiento físico, mientras que la presencia de la ciudad puede ejercer una influencia, más o menos indirecta, de carácter térmico.



Figura A.5 Localización de la EDAR de Quart-Benager (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

La planta de Quart-Benager (Figura A. $\boldsymbol{6}$) recoge aguas de tipo urbano. Trata un caudal de agua cercano a los 41.500 m³/día, dando servicio a una población cercana a los 120.900 habitantes.



Figura A.6 Vista aérea de la EDAR de Quart-Benager (Fuente: <u>www.epsar.qva.es</u>)

A.4 EDAR DE DENIA-ONDARA-PEDREGUER

El emplazamiento de la EDAR de Denia-Ondara-Pedreguer (Figura A.7) se ubica en una zona con importantes accidentes orográficos que condicionan fuertemente el movimiento de aire en sus inmediaciones.



Figura A.8 Localización de la EDAR de Denia-Ondara- Pedreguer (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

Aunque no se sitúa muy alejada de la línea de costa (<6 km en línea recta), importantes resaltes montañosos se sitúan en sus proximidades, entre los que destaca sin duda, la singularidad que constituye el macizo del Montgó, al este del emplazamiento.

Se trata de una instalación de medianas dimensiones que trata alrededor de 16.778 $m^3/día$ (Figura A.9). Sirviendo a una población de 50.106 habitantes aproximadamente.



Figura A.9 Vista aérea de la EDAR de Denia-Ondara-Pedreguer (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

A.5 EDAR DE LA VILA JOIOSA

La planta actual (véase Figura A.10) se encuentra situada a la altura de la población de la Vila Joiosa, retirada unos cuatro kilómetros hacia el interior, en un entorno de orografía muy compleja.

De hecho, tratándose de un emplazamiento netamente costero (a unos 4 km de la línea litoral), se sitúa ya a cierta cota sobre el nivel del mar (entre 100 y 150 m), en plena rambla del Amadorio, y sobre la vertiente de las laderas que, en poca distancia horizontal, ascienden más de 1.500 m hasta las cumbres de la sierra de Aitana.

La presente instalación trata un volumen relativamente pequeño con respecto a las instalaciones hasta ahora estudiadas (alrededor de $9.600 \text{ m}^3/\text{dia}$) y da servicio a una población cercana a los 64.700 habitantes.

Descripción de las EDAR objeto de estudio 7



La EDAR de la Vila Joiosa (Figura A.11) tiene un carácter marcadamente estival (meses desde junio hasta septiembre) donde incluso llega a triplicar el volumen de agua tratada.



Figura A.11 Vista aérea de la EDAR de la Vila Joiosa (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

A.6 EDAR DE RINCÓN DE LEÓN (ALICANTE)

El emplazamiento de Rincón de León (Alicante) se sitúa también próximo al mar (a menos de 2 km de la costa en línea recta), lo que le confiere, como al resto de ubicaciones estudiadas, estar sujeto al sistema de brisas.

La EDAR de Rincón de León (Figura A.12) se ubica en plena rambla del barranco de las Ovejas. En general el emplazamiento está bien ventilado, y no presenta grandes constricciones orográficas, más allá que a escala muy local,



el propio cauce de la rambla y la presencia de la ciudad no muy lejana.

Se trata de una de las instalaciones más grandes de las estudiadas (ver Figura A.13). Trata un caudal de aproximadamente 57.850 m³/día, sirviendo a una población aproximada de 432.820 habitantes.

Tiene un perfil urbano e industrial y presenta altas concentraciones de sulfuro de hidrógeno tanto en el interior como en las inmediaciones de la planta debido principalmente al volumen y a la composición del agua que trata.



Figura A.13 Vista aérea de la EDAR de Rincón de León (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

A.7 EDAR DE GANDÍA-LA SAFOR

La depuradora de Gandía – La Safor se sitúa al sur de la ciudad, en el margen derecho del río Serpis, en plena llanura litoral, a menos de 1,5 km del borde costero.

El transcurso de la vía fluvial hacia el interior se encajona rápidamente en una abrupta orografía de valles (primeras estribaciones costeras del sistema Bético) hacia su nacimiento en la sierra de Mariola (Figura A.14).



El emplazamiento participa por lo tanto de características costeras, con una orografía circundante esencialmente plana, condicionada únicamente por el discurrir del río (aunque meandroso, el cuál se dispone aproximadamente según una dirección suroeste-noroeste en este último tramo) y, si cabe, la propia presencia urbana.

La EDAR de Gandía – La Safor (Figura A.15) es una instalación compleja, pues recoge tanto aguas residuales provenientes de los entornos urbanos de alrededor, como de aguas provenientes de campos y cultivos de regadío.

El caudal de agua tratado es aproximadamente de 40.250 m³/día, sirviendo a una población de alrededor de 118.230 habitantes. Da servicio a prácticamente toda la comarca de La Safor.



Figura A.15 Vista aérea de la EDAR de Gandía – La Safor (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

A.8 EDAR DE CAMP DE TURIA II (RIBARROJA DEL TURIA)

La planta de Camp de Turia II (Figura A.16) se sitúa en el margen izquierdo del cauce del río Turia, en lo que es ya su curso bajo, pero aún por un paso relativamente encajonado, con un eje aproximadamente nornoroeste-sursureste. Dicho eje marca los registros aerológicos obtenidos en esta planta.

El emplazamiento se encuentra a unos 20 km de la costa en línea recta. No presenta grandes desniveles, siendo los más pronunciados menores a 100 m.



Figura A.16 Localización de la EDAR de Camp de Turia II (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

La instalación de Camp de Turia II es una planta de tratamiento de aguas residuales relativamente pequeña (ver Figura A.17).

Trata un volumen diario de alrededor de 10.000 m³ sirviendo a una población cercana a los 41.900 habitantes.



Figura A.18 Vista aérea de la EDAR de Camp de Turia II (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

A.9 EDAR DE VILLENA

La depuradora de aguas residuales de Villena se encuentra situada en el término municipal del mismo nombre, al noroeste del casco urbano y a una distancia de éste de aproximadamente unos 3 km (ver Figura A.19).

Situada en el curso alto del Vinalopó, tras el curso encajonado a la altura de Elda y Sax, desde el suroeste el valle se abre aguas arriba en una amplia vega en la que el río gira hacia la derecha, hacia las cumbres de su nacimiento en la sierra de Mariola.

Así pues, el emplazamiento se sitúa en un punto de inflexión de la cuenca, que se orienta hacia el SE aguas abajo y aproximadamente hacia el NE aguas arriba.



Se trata de una instalación pequeña (Figura A.20), con un caudal medio de agua tratada de 6.800 $m^3/día$ y una población aproximada de 46.900 habitantes.



Figura A.20 Vista aérea de la EDAR de Villena (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

A.10 EDAR DE ALGORÓS (ELCHE)

La depuradora de aguas residuales de Algorós, está situada en la pedanía del mismo nombre. Perteneciente al municipio de Elche y al sur de su casco urbano, no dista de ésta, mucho más de 1 km (Figura A.21).

Próxima a la rambla del Vinalopó, una vez que ésta ha abandonado el núcleo urbano de la capital, el entorno resulta prácticamente plano, con un modesto desnivel que drena suavemente hacia las laderas de la sierra de Crevillente y al noroeste hacia las marismas costeras de Santa Pola.

Sin grandes elementos orográficos relevantes en las proximidades que condicionen sustancialmente la circulación atmosférica, un claro patrón de brisas domina el comportamiento aerológico del emplazamiento, ligeramente potenciado por las vertientes septentrionales y por el paso natural del cauce del río.



La instalación de Algorós recibe aguas de origen urbano principalmente, aparte de las aguas de un polígono cercano.

Se trata de una instalación de tamaño medio (Figura A.23), la cual trata un volumen de agua de alrededor de 22.820 m³/día, abasteciendo a una población de unos 46.910 habitantes.



Figura A.23 Vista aérea de la EDAR de Algorós (Fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>)

MATERIAL COMPLEMENTARIO B

Análisis de datos meteorológicos de las EDAR

El experimentador que no sabe lo que está buscando no comprenderá lo que encuentra

Claude Bernand (1813-1878)

B.1 INTRODUCCIÓN

En esta sección de material complementario se ha querido recoger las actividades de validación y tratamiento de las series meteorológicas de las torres disponibles durante el desarrollo de los trabajos.

Como se comentó sucintamente en el capítulo 2 de la memoria de la tesis, el tratamiento de las medidas procedentes de las torres meteorológicas se ha efectuado con las distintas opciones de la aplicación DMDMETEO que fue desarrollada dentro del marco de la tesis bajo el proyecto "Explotación de las medidas meteorológicas en el Entorno de Depuradoras de Aguas Residuales en la Comunidad Valenciana" DIOD-I (Ref. DIMEDAR/ 09-00 de 09/04/2001).

Dicha aplicación es inicialmente un desarrollo del investigador Enrique Mantilla Iglesias (coordinador del Área de Meteorología y Dinámica de Contaminantes de la Fundación Centro de Estudios Ambientales del Mediterráneo –CEAM-UMH) y posteriormente fue depurada y ampliada para la realización de esta tesis.

La aplicación está escrita en lenguaje C++, y cuya función es facilitar, automatizar y gestionar de una manera lo más sencilla posible el análisis de los datos procedentes de las torres meteorológicas mediante la validación (tanto automática como manual), cálculo de promedios, máximos, mínimos, así como frecuencias de recurrencia.

Los datos provenientes de las torres se han almacenado como promedios de diez minutos. Además de los valores medios de las diferentes magnitudes, se archivaron también, sobre la misma base temporal, la racha máxima y las desviaciones estándar de la velocidad y dirección del viento.

Dichos ficheros de datos incorporan un código de validación (que se asigna a cada medida individual) en el que se consigna la validez o no de la medida (distinguiéndose en este último caso entre valores no registrados, valores anulados -automáticamente por el programa o manualmente por el operador-, o bien valores corregidos).

La revisión de la información meteorológica para cada emplazamiento se ha apoyado fundamentalmente en el análisis de las correspondientes rosas de viento y en las gráficas de distribuciones de las distintas magnitudes analizadas.

Con este último tipo de figuras es posible considerar simultáneamente tres magnitudes, lo que permite incorporar el tiempo (hora del día) como parámetro adicional de representación, lo que resulta muy ilustrativo al evaluar la dinámica atmosférica, pero que no es simple en el caso de trabajar exclusivamente con las rosas.

Se ha preferido trabajar de esta manera a riesgo de multiplicar excesivamente el número de figuras presentadas, ya que se ha considerado que el beneficio de la información adicional obtenida supera con creces el posible hastío y confusión que pueda provocar al lector la presentación de tanta figura¹.

En esta línea, la información incluida para cada emplazamiento contempla los siguientes elementos:

- Un resumen de los principales estadísticos obtenidos para el período completo de medidas disponibles (aunque se han calculado las sigmas de la dirección y la velocidad, éstas no se presentan en el análisis de los datos meteorológicos que sí hacemos puesto que no tienen una gran significancia, no obstante, sí que se tienen muy en cuenta en el proceso de modelización en dónde nos dan una fantástica información de la estabilidad atmosférica.
- Las rosas de viento total y estacional para el mismo periodo completo.

¹ Las rosas de viento representadas, así como la validación y tratamiento estadístico de los datos presentados, se ha realizado con el programa DMDMETEO. Las gráficas de distribuciones, frecuencia de ocurrencia y demás magnitudes se han realizado con el software comercial Golden Surfer. Surfer es un programa para científico comercial que se usa para hacer mapas y trazar líneas de contorno en 3D

- La rosa de temperatura (sólo para el periodo completo).
- Mapas de distribuciones de frecuencias horarias y direccionales de diversas magnitudes (niveles promedio y máximos de velocidad y temperatura). Dichos mapas aparecen para su mejor comprensión con un código de colores que se explica en la Tabla B.1; y el orden en que aparecen es de izquierda a derecha y de arriba hacia abajo.

En todos los casos se ha trabajado sobre las medidas de mayor resolución disponible (promedios diezminutales).

Las gráficas de distribuciones, tanto para el caso de las frecuencias de ocurrencias como para las restantes magnitudes, se calcularon desestimando aquellas medidas para las que el valor de la velocidad del viento correspondiente era inferior a 0,5 m/s (situación de calma), por la inconsistencia que el registro de la dirección supone en estos casos.

La oportunidad de representar distribuciones de alguna magnitud (ocasionalmente frecuencia de ocurrencia) en función de otras dos, se ha resuelto en forma de gráfica, mediante la inclusión de isocurvas, dibujadas a partir de la correspondiente matriz de valores.

Ambos procesos conllevan un cierto grado de incertidumbre, tanto el que se refiere al trazo de curvas de igual valor, como la del cálculo de los estimadores para cada intervalo de la matriz (en efecto, la elección del rango e intervalos de la partición puede condicionar en cierta forma la apariencia de los resultados).

Todo esto se ha tenido en cuenta a la hora de procesar, valorar y analizar los distintos parámetros minimizando al máximo la incertidumbre propia de cada variable.

Por último comentar que se ha optado por no describir la orografía de cada emplazamiento, la cual quedó reflejada en la anterior sección del material complementario.

Código	Descripción			
Azul celeste (A)	Distribución de frecuencias de ocurrencia horarias de velocidades			
Azul oscuro (B)	Distribución de frecuencias direccionales horarias			
Marrón (C)	Distribución de frecuencias de la velocidad del viento en función de la dirección			
Violeta (D)	Distribución de frecuencias de la temperatura en función de la dirección			
Verde claro (E)	Distribución de la velocidad media del viento en función de la dirección y la hora del día			
Verde (F)	Percentil 95 de la velocidad media del viento en función de la dirección y la hora del día			
Naranja (G)	Distribución de la temperatura media en función de la dirección y la hora del día			
Rojo (H)	Percentil 95 de la temperatura media en función de la dirección y la hora del día			

Tabla B.1 Descripción de los códigos utilizados a lo largo del informe para los mapas de frecuencias horarias y direccionales

B.2 CONCA DEL CARRAIXET

El punto donde se alza la torre meteorológica, dentro del recinto de la propia planta, se encuentra a menos de un kilómetro de la línea costera.

La ubicación costera del emplazamiento le confiere una temperatura suave (~18 °C) con un régimen de vientos suaves (~10 km/h) con un claro predominio del régimen de brisas y que podemos evaluar de forma cuantitativa en la Tabla B.2

Primer dato analizado:	01-01-2002
Último dato analizado:	31-12-2010
Número de registros:	429.046

Magnitud	Media	Máximo	Mínimo	%Validos
Dirección (°)	188 ± 11	360	0	95,1
Velocidad del viento (m/s)	3,3 ± 0,7		0	95,1
Racha máxima (m/s)	4,9 ± 0,1	46,5	0	95,1
Temperatura_3m (°C)	18 ± 1	42	-2	95,2
Temperatura_15m (°C)	17 ± 1	45	-1	95,6
Temperatura_INT ² (°C)	24 ± 1	49	0	95,8

 Tabla B.2
 Medidas estadísticas correspondientes al periodo total disponible
 para la EDAR de la Conca de Carraixet

La condición de emplazamiento muy abierto determina que aparezca una distribución de frecuencias de viento con un amplio rango de direcciones, dentro de una configuración en "alas de mariposa" como corresponde a un régimen dominado por las brisas (Figura B.1), tal como se muestra en las correspondientes rosas de viento (Figura B.2).



Figura B.1 Rosas de viento (izquierda) y temperatura (derecha) correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de la Conca del Carraixet (fuente: software DMDMETEO)

² La Temperatura_INT corresponde a la temperatura que hay dentro de la caja donde se coloca el datalogger y los circuitos electrónicos que tiene la estación meteorológica. Esta temperatura nos da una idea de si hay un sobrecalentamiento de la electrónica de la torre. Por otro lado la Temperatura_3m y 15m significa que se han medido dichas temperaturas a esa altura. Nos ha idea del gradiente y turbulencia que puede haber a nivel de suelo (factor importante a la hora de determinar las emisiones difusas)

Analizando el periodo completo se aprecia claramente que los vientos más flojos proceden del oeste, y a la vez los más intensos (Figura B.3c), correspondiendo respectivamente a las circulaciones nocturnas de la onda de brisa y a los regímenes sinópticos respectivamente (Figura B.3e y Figura B.3f).

Adicionalmente, las intensidades más altas, tienen una marcada componente marina y corresponden a circulaciones del primer cuadrante (direcciones este).

Térmicamente, la distribución de temperaturas, tiene una marcada asimetría este-oeste (Figura B.3d), con los niveles más bajos hacia poniente, lo que refleja tanto la distribución de regímenes día/noche como la frecuencia estacional.

Este comportamiento estacional del régimen de vientos se muestra en las cuatro rosas de vientos de la Figura B.2. Así, se presenta la componente terral (direcciones predominantes de rumbos oeste) durante las estaciones invernales (otoño e invierno), con vientos también más intensos (especialmente en invierno), predominando durante el verano y primavera la componente marítima, también con las mayores intensidades ahora procedentes de levante (mucho más acusadas durante el verano).





Figura B.2 Rosas de viento estacionales correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de la Conca del Carraixet (fuente: software DMDMETEO)

Analizando la dinámica característica del emplazamiento se aprecia más detalladamente en las distribuciones horarias y direccionales que presentan las gráficas de la Figura B.3 las dos direcciones preferentes. Se observa de forma bien definida los ejes aproximadamente este-noroeste, correspondiendo el primero de los rumbos preferentemente a condiciones diurnas (brisa de mar) y el segundo a circulaciones nocturnas (Figura B.3b).

Con esta procedencia se registran vientos (Figura B.3c) en general más flojos y más fríos (derrame nocturno) que en los rumbos marinos, dominados fundamentalmente por la componente diurna del régimen de brisas y de temperatura mayor (Figura B.3d).

En consonancia con este predominio de los regímenes de circulaciones locales y mesoescalares, en promedio, viento y temperatura presentan máximos horarios correspondientes con las horas centrales del día (Figura B.3e y Figura B.3g), con cierta independencia en la dirección.

Como hecho curioso destaca que las mayores temperaturas en promedio se registran a primeras horas (en torno a las 8 de la mañana) más que en horas centrales del día (Figura B.3g).



Figura B.3 Mapas de distribuciones de frecuencias horarias y direccionales de diversas magnitudes para la EDAR de la Conca del Carraixet (niveles promedio y máximos de velocidad y temperatura) (fuente: SURFER)

Como contraste, se puede ver que las velocidades máximas presentan una distribución longitudinal, asociadas a las direcciones más que a las horas como se aprecia en Figura B.3e y Figura B.3f, lo que sugiere que estos valores extremos, se asocian preferentemente a situaciones atmosféricas de gran escala (y por tanto con persistencias de varios días, no sometidas a la característica onda diurna).

B.3 QUART-BENAGER

La presente planta de depuración de aguas se sitúa en las inmediaciones del nuevo cauce del río Turia, en un tramo que discurre según una orientación aproximadamente NNW-SSE, a una distancia entre seis y siete kilómetros del mar, en el margen suroccidental del casco urbano de Valencia, en una zona libre de edificaciones próximas.

Se trata de un emplazamiento muy abierto, con una orografía circundante muy suave, en la que el cauce del río constituye sin duda el mayor condicionante o elemento de forzamiento físico, mientras que la presencia de la ciudad puede ejercer una influencia, más o menos indirecta, de carácter térmico.

La recuperación de datos del emplazamiento es muy alta, con muy pocas pérdidas de datos. Durante el transcurso de los trabajos se alertó en varias ocasiones de un sesgo en la velocidad máxima y que ha hecho que se pierdan dichos valores de rachas máximos acaecidos sobretodo en el 2010 y finales del 2009. Por lo tanto a la hora de valorar la estadística de los datos disponibles para este emplazamiento (Tabla B.3) hay que tener especial cuidado con la representatividad de la velocidad máxima.

Aparte de lo comentado anteriormente, la torre de Quart-Benager es una de las más consistentes en cuanto a la recepción de datos.

Primer dato analizado:	03-08-2004
Último dato analizado:	31-12-2010
Número de registros:	486.000

Tabla B.3 Medidas estadísticas correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Quart-Benager

Magnitud	Media	Máximo	Mínimo	%Validos
Dirección (°)	195 ± 20	360	0	91,7
Velocidad (m/s)	3,1 ± 0,8	25,1	0	95,2
Racha máxima (m/s)	5,1 ± 0,1	24,6	0	95
Temperatura_3m (°C)	18 ± 1	44	-5	94,8
Temperatura_15m (°C)	18 ± 1	42	-4	94,2
Temperatura_INT (°C)	24 ± 1	53	-3	95,3

La distribución de vientos, tal y como se muestra en las correspondientes rosas (Figura B.4 y Figura B.5) no discrepa mucho de la obtenida para el emplazamiento de la Conca de Carraixet, presentando de igual manera una distribución de vientos en "alas de mariposa".

Esta estructura del viento remarca el efecto que provoca el encauzamiento del río, con un abanico de direcciones mucho más colimado en torno a su eje.



Figura B.4 Rosas de viento y temperatura correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Quart-Benager (fuente: software DMDMETEO)

La intensidad del viento no es muy grande salvo en la dirección oeste, y se aprecia que en el verano ésta presenta un mínimo estacional con un aumento de la componente marítima (dirección sureste).

El refuerzo invernal se refleja claramente en las rosas estacionales, junto con la mayor frecuencia primaveral de circulaciones del noreste (Figura B.5).

A nivel de temperatura, sigue el mismo comportamiento que los emplazamientos sometidos al régimen local de brisas, con temperaturas menores en direcciones de flujo terral, siendo más elevada la temperatura cuando se trata de la componente marítima (dirección SE).

A pesar de la similitud y cercanía de esta planta con la de la Conca del Carraixet, cabría destacar que estadísticamente la planta de Quart-Benager presenta temperaturas mínimas menores que para la Conca de Carraixet.



Figura B.5 Rosas de viento estacionales correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Quart-Benager (fuente: software DMDMETEO)

Las distribuciones horarias y direccionales de la Figura B.6, vienen marcadas con vientos diurnos principalmente de levante y circulaciones preferentemente nocturnas de poniente (Figura B.6b), siendo también las intensidades de aquellas (levantes) intermedias respecto a los ponientes provenientes de vientos a mayor escala asociados con vientos de velocidades superiores (Figura B.6).

Las velocidades medidas más intensas son principalmente diurnas, mientras que los valores extremos, corresponden principalmente a situaciones de poniente, con independencia de la hora del día/noche (Figura B.6e y Figura B.6f). Las temperaturas (Figura B.6g y Figura B.6h) están claramente ligadas a la hora solar, apreciándose nuevamente el adelantamiento de los valores máximos a primeras horas del día (y no en el momento de máximo calentamiento), como efecto del atemperamiento que supone la entrada de la componente marina (se aprecia especialmente para direcciones de levante)

Por otro lado, los máximos absolutos parecen situarse en el intervalo central del día, pero para direcciones de componente suroeste-oestesuroeste. Este comportamiento térmico refleja muy aproximadamente el descrito anteriormente para la EDAR de Carraixet.







B.4 DENIA-ONDARA-PEDREGUER

La torre meteorológica situada en el emplazamiento de la EDAR de Denia-Ondara-Pedreguer se ubica en una zona con importantes accidentes orográficos que condicionan fuertemente el movimiento de aire en sus inmediaciones.

Aunque no muy alejada de la línea de costa (<6 km en línea recta), importantes resaltes montañosos se sitúan en sus proximidades, entre los que destaca sin duda la singularidad que constituye el macizo del Montgó, al este del emplazamiento.

El emplazamiento de Denia-Ondara-Pedreguer posee la segunda serie meteorológica más larga disponible, aunque ésta sufrió la interrupción de las medidas durante un periodo de tiempo relativamente corto. Esta interrupción fue causada por obras en la planta que obligaron a la reubicación de la torre (este cambio se ha tenido en cuenta para corregir, mediante distintos factores, los datos meteorológicos recogidos en ambas ubicaciones).

Además de la equipación instrumental de las que dotamos habitualmente a las torres, ésta dispone además de un sensor de radiación solar y un pluviómetro, si bien, las medidas obtenidas por estos dos equipos no siempre han sido lo correctas que debieran, alcanzándose porcentajes de datos válidos relativamente bajos para poder considerarse representativos del periodo estudiado (por lo que no se presentan en este análisis).

En la Tabla B.4 se muestra la estadística de diversas magnitudes ambientales para el periodo total de recepción de datos de la estación meteorológica.

Primer dato analizado:	01-01-2002
Último dato analizado:	31-12-2010
Número de registros:	446.113

Tabla B.4 Medidas estadísticas correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Denia-Ondara-Pedreguer

Magnitud	Media	Máximo	Mínimo	%Validos
Dirección (°)	181 ± 18	360	0	91,4
Velocidad del viento (m/s)	3,2 ± 0,8		0	91,3
Racha máxima (m/s)	5,0 ± 0,1	35,3	0	91,3
Temperatura_3m (°C)	18 ± 1	39	-2	90
Temperatura_15m (°C)	19 ± 1	39	-1	83,9
Temperatura_INT (°C)	22 ± 1	60	0	91,6

El emplazamiento de Denia-Ondara-Pedreguer se sitúa en una zona de vientos bajos (~18 km/h) y de temperatura agradable (alrededor de 20°C).

Las rosas de viento, tanto para el periodo completo como las correspondientes para el periodo estacional, muestran una restricción orográfica importante del emplazamiento, con ciertos rumbos preferentes bien marcados, y con una configuración muy asimétrica de las direcciones predominantes.

Además las variaciones estacionales, son especialmente acusadas, lo que resulta de la determinante influencia de la orografía en el desarrollo de los diferentes regímenes de viento (Figura B.7 y Figura B.8).



Figura B.7 Rosas de viento y temperatura correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Denia-Ondara-Pedreguer (fuente: software DMDMETEO)

En general se distinguen bien cuatro direcciones principales:

- I. Un eje SSE, correspondiente a la entrada de la brisa marina, bien definida en las horas centrales del día (Figura B.9a, Figura B.9b y Figura B.9c). Ésta predomina más durante las estaciones más cálidas (destacando el verano con el mayor porcentaje de datos en dicho eje) y con muy poca relevancia en invierno. Las mayores temperaturas registradas corresponden a direcciones en este eje (Figura B.7 rosa de temperatura).
- II. Un eje NE, correspondiente a la entrada de la brisa procedente directamente del mar, que se encuentra al norte del emplazamiento. Esta dirección también es más importante en verano y primavera. En las distribuciones de frecuencias (Figura B.9b se aprecia claramente esta dirección asociada a las primeras horas del día, evolucionando hacia un régimen de SW en las horas centrales y finales del mismo. Hay que destacar que sus velocidades medias son sensiblemente menores a aquellas (figura de frecuencias Figura B.9b y Figura B.9c).
- III. Un eje SW, que corresponde a las direcciones preferentemente nocturnas (Figura B.9b), de circulaciones derrame (catabáticas). Tiene un acusado predominio durante el invierno, aunque es descatable el mismo comportamiento marcado en otoño. Las velocidades asociadas a este eje son generalmente

bajas, como corresponde a este tipo de movimientos de derrame nocturno.

IV. Un eje del NW, que representa condiciones de circulación a gran escala, que, en estas latitudes corresponden habitualmente a flujos del cuarto cuadrante, caracterizándose por intensidades en general más elevadas, siendo típicamente invernales (y en menor medida otoñales).



Figura B.8 Rosas de viento estacionales correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Denia-Ondara-Pedreguer (fuente: software DMDMETEO)

A nivel de la dinámica del emplazamiento, el flujo nocturno se concentra principalmente en torno al SW sujeto a velocidades moderadas, con poca dispersión en los valores medios del viento (Figura B.9c), y temperaturas bajas (véase rosa de temperaturas).

Ello significa que habitualmente, durante el desarrollo de la circulación nocturna de la brisa, el emplazamiento se queda atrapado dentro del derrame de la cuenca del río Girona o del propio Castells que descienden de la sierra de Alfaro.

El forzamiento a escala sinóptica aparece asociado a direcciones del cuarto cuadrante. Las velocidades medias muestran valores más elevados para estos rumbos (alrededor de 30 km/h), con independencia de la hora del día (Figura B.9e y Figura B.9f).

Durante las horas centrales del día, el viento progresa desde unas direcciones entre el N y ENE a primeras horas, para concentrarse claramente en torno al SE durante el resto del día Figura B.9b.

Ello significa que, habitualmente la brisa de mar alcanza al emplazamiento procedente de la costa norte, solamente al inicio del periodo de calentamiento.

Cuando la circulación se establece, el flujo marino procede del corredor SE-SSE, por el pasillo que determina el Montgó, canalizándose la penetración de la brisa de Jávea que se establece a lo largo de la cuenca del Gorgos.

Este efecto es debido al calentamiento de las laderas próximas al emplazamiento como consecuencia de su orientación aproximadamente norte, mientras que la brisa que se establece en torno a la costa de Jávea se ve reforzada por una orientación este de las cadenas montañosas situadas cuenca arriba, llegando a imponer su circulación, a la altura del emplazamiento estudiado.

La distribución de velocidades medias, refleja este hecho (Figura B.9e y Figura B.9f), con un máximo relativo para direcciones de sureste en las horas centrales del día.

Igualmente se verifica en la gráfica de temperaturas medias (Figura B.9g y Figura B.9h) una distribución de máximos en torno a las horas centrales del día para los rumbos del segundo cuadrante,


Figura B.9 Mapas de distribuciones de frecuencias horarias y direccionales de diversas magnitudes para la EDAR de Denia-Ondara-Pedreguer (niveles promedio y máximos de velocidad y temperatura) (fuente: SURFER)

B.5 VILA JOIOSA

La planta se encuentra situada a la altura de la población de la Vila Joiosa, retirada unos cuatro kilómetros hacia el interior, en un entorno de orografía muy compleja.

De hecho, tratándose de un emplazamiento netamente costero (a unos 4 km de la línea litoral), se sitúa ya a cierta cota sobre el nivel del mar (entre 100 y 150 m), en plena rambla del Amadorio, y sobre la vertiente de las laderas que,

en poca distancia horizontal, ascienden más de 1500 m hasta las cumbres de la sierra de Aitana.

Este condicionamiento múltiple, determinado por la proximidad del mar, una fuerte canalización y pronunciadas laderas, tiene su traducción inmediata sobre los registros de la estación meteorológica, tal y como se describen a continuación en la Tabla B.5.

Primer dato analizado:	01-01-2002
Último dato analizado:	27-02-2008
Número de registros:	323.885

Magnitud	Media	Máximo	Mínimo	%Validos
Dirección (°)	233 ± 18	360	0	98,4
Velocidad (m/s)	3,1 ± 0,7	26,3	0	98,4
Racha máxima (m/s)	4,8 ± 0,1	31,9	0	98,4
Temperatura_3m (°C)	18 ± 1	39	-2	98,3
Temperatura_15m (°C)	18 ± 1	38	-4	98,3
Temperatura_INT (°C)	22 ± 1	43	0	98,4

Tabla B.5 Medidas estadísticas correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de la Vila Joiosa

El emplazamiento de la Vila Joiosa, como los dos anteriores, presenta temperaturas agradables (alrededor de 18° C de media) con vientos moderados (~20 km/h). La torre meteorológica dejó de funcionar en el 2008 a causa de su necesario desmontaje por causa de unas obras realizadas en dicho emplazamiento, con lo cual sólo se dispone de datos hasta el 2008.

Sin embargo durante el periodo de funcionamiento fue uno de los emplazamientos con mayor cobertura de datos gracias a su correcto funcionamiento.

La naturaleza especial de este emplazamiento cercano a la costa y con una topografía bastante compleja, determina la peculiar morfología que presentan las rosas de vientos, que cualitativamente se mantienen similares en todas las estaciones (Figura B.10 y Figura B.11).

La restricción orográfica provocada por la rambla del Amadorio, con una fuerte pendiente hacia las laderas de la Grana y Aitana, canalizan por su cauce los flujos de componente terrestre (contribuciones principalmente de la fase nocturna de los ciclos locales de brisa), mientras que la apertura del emplazamiento hacia el mar próximo hace que la entrada de la circulación marítima, presente un mayor rango de direcciones menos definidas (preferentemente correspondiente a la componente diurna de la brisa).



Figura B.10 Rosas de viento y temperatura correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de la Vila Joiosa (fuente: software DMDMETEO)

Este esquema general, presenta variaciones estacionales (Figura B.11), que como era previsible, suponen un reforzamiento de la componente marítima en verano (mayores frecuencias de vientos y de velocidades más altas), mientras que en invierno se potencia la componente terral (en torno al noroeste y oeste-noroeste), apareciendo igualmente una clase de velocidades más altas, mientras que las otras dos estaciones presentan un modelo intermedio.



Figura B.11 Rosas de viento estacionales correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de la Vila Joiosa (fuente: software DMDMETEO)

Esta descripción, se refuerza claramente con las gráficas de frecuencias de vientos (Figura B.12b), donde el carácter diurno/nocturno de cada dirección se muestra perfectamente definido.

Así mismo puede apreciarse, cómo la componente de tierra presenta la mayor proporción de velocidades bajas y a la vez más altas, mientras que la correspondiente marina (segundo cuadrante) presenta una mayor proporción de rangos intermedios de intensidad (Figura B.12c).

En la distribución de velocidades promedio, se aprecia también un doble eje de preferencias (Figura B.12e y Figura B.12f).

En primer lugar un primer eje en torno a direcciones del primer y segundo cuadrante, situado a las horas centrales del día (con cierta independencia de la dirección) con contribución de la alta frecuencia de las circulaciones locales (mesoescalares). En segundo lugar, un eje en torno al cuarto cuadrante, cuya aportación es debida posiblemente, a movimientos de mayor escala y que corresponderían por la ubicación de la EDAR a circulaciones generales de dirección oeste.



Figura B.12 Mapas de distribuciones de frecuencias horarias y direccionales de diversas magnitudes para la EDAR de la Vila Joiosa (niveles promedio y máximos de velocidad y temperatura) (fuente: SURFER)

Respecto a la distribución de temperaturas (Figura B.10) se aprecia claramente la componente nocturna (más fría) y la componente diurna (Figura B.12g y Figura B.12h). Este aporte diurno asociado a la componente marina del viento, se traduce en un máximo relativo a primeras horas del día junto con una distribución muy uniforme de temperaturas altas durante el periodo de insolación.

B.6 RINCÓN DE LEÓN

El emplazamiento de Rincón de León es el localizado más al sur de todos los considerados. Se sitúa próximo al mar (a menos de 2 km de la costa en línea recta), lo que le confiere, como al resto de ubicaciones estudiadas estar sujeto al sistema de brisas.

La EDAR de Rincón de León se ubica en plena rambla del barranco de las Ovejas. La torre meteorológica ocupa un pequeño collado que se abre a la amplia vega de Monforte del Cid, en lo que es ya la cuenca del Vinalopó, de cuya aerología se puede considerar subsidiario a mayor escala.

En general el emplazamiento está bien ventilado y no presenta grandes constricciones orográficas, más allá que a escala muy local, el propio cauce de la rambla y la presencia de la ciudad no muy lejana.

Con una cobertura neta de casi una decena de años, la recuperación de datos de esta torre también se puede considerar excelente, siendo la ubicación de la que disponemos de mayor cobertura de datos válidos.

En la Tabla B.6 se muestra la estadística para el periodo total de disponibilidad de datos. Cabe mencionar que parte del tiempo de funcionamiento de esta torre el sensor de temperatura situado a 15 metros ha estado dando problemas, no obstante, el porcentaje de datos válidos (aunque menor que los de otras magnitudes) puede considerarse bastante representativo (81.1% de recuperación de datos).

Primer dato analizado:	05-10-2001
Último dato analizado:	31-12-2010
Número de registros:	486.000

Magnitud	Media	Máximo	Mínimo	%Validos
Dirección (°)	202 ± 12	36	0	96,2
Velocidad (m/s)	$3,4 \pm 0,7$	31,9	0	96,2
Racha máxima (m/s)	4,9 ± 0,1	41,2	0	96,2
Temperatura_3m (°C)	18 ± 1	40	-1	95,6
Temperatura_15m (°C)	17 ± 1	40		81,1
Temperatura_INT (°C)	22 ± 1	44	0	96,1

 Tabla B.6
 Medidas estadísticas correspondientes al periodo total disponible

 para la EDAR de Rincón de León

A diferencia de lo que ocurría con el emplazamiento de La Vila, aquí existe un mayor encauzamiento de los flujos procedentes de la costa (bajo la influencia directa del barranco de las Ovejas), que en los provenientes del interior, donde el emplazamiento se abre a la gran cuenca del Vinalopó.

La distribución de vientos, muestra como ocurría en la Conca de Carraixet (Valencia) una distribución en "alas de mariposa", según un eje aproximadamente oestenoroesteestesureste (Figura B.13).

La rosa para el periodo total, muestra una componente marina que se manifiesta bastante colimada en torno a ESE y que presenta velocidades intermedias y temperaturas superiores, mientras que la componente de tierra, con un rango más amplio de direcciones permitidas en torno al eje WNW, recoge aquellas velocidades más bajas a la vez que las más intensas.

En este sentido el esquema se repite con relación a los otros emplazamientos comentados, con direcciones del este eminentemente diurnas y marinas, con intensidades intermedias que corresponden a la brisa marina y una distribución en torno a oeste con frecuencias bastante elevadas de vientos muy suaves (correspondientes a vientos terrales forzados por la brisa) junto con una frecuencia menor de vientos intensos (flujos de mayor escala correspondientes a comportamientos a escala sinóptica) (Figura B.15b).



Figura B.13 Rosas de viento y temperatura correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Rincón de León (fuente: software DMDMETEO)

En cuanto a su comportamiento estacional (Figura B.14), siguen el mismo patrón, variando éstos, sólo de forma cuantitativa.

Se observa un refuerzo de la componente marina durante los periodos más estivales y de la componente de tierra durante los periodos más invernales, apareciendo en estos casos un refuerzo de las intensidades más elevadas como consecuencia de la proliferación de situaciones sinópticas comentadas anteriormente.





Figura B.14 Rosas de viento estacionales correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Rincón de León (fuente: software DMDMETEO)

Las distribuciones de velocidad (Figura B.15c, Figura B.15e y Figura B.15f), reflejan claramente la importancia que ejercen sobre el emplazamiento las circulaciones locales asociadas al sistema de brisas, con un eje de máximos durante las horas centrales del día y conservándose cierta independencia de la dirección.

Se puede observar además, picos absolutos que se distribuyen preferentemente a lo largo de direcciones del noroeste, correspondientes a circulaciones de mayor escala que persisten durante periodos más largos, no sometidas a la onda diurna (Figura B.15c y Figura B.15e).

Respecto al calentamiento, en promedio está ligado a las direcciones marinas (en torno al eje este) y primeras horas del día, actuando nuevamente el efecto refrigerante del aire marino durante el periodo de brisa (Figura B.15g y Figura B.15h).





Figura B.15 Mapas de distribuciones de frecuencias horarias y direccionales de diversas magnitudes para la EDAR de Rincón de León (niveles promedio y máximos de velocidad y temperatura) (fuente: SURFER)

B.7 CAMP DE TURIA II

La planta de Camp de Turia II se sitúa en el margen izquierdo del cauce del río Turia, en lo que es ya su curso bajo, pero aún por un paso relativamente encajonado, con un eje aproximadamente nornoroeste-sursureste, dicho eje marca los registros aerológicos obtenidos en esta planta.

El emplazamiento se encuentra a unos 20 km de la costa en línea recta. No presenta grandes desniveles, siendo los más pronunciados menores a 100 m.

La disponibilidad de datos de la presente depuradora se limita a dos periodos separados en el tiempo, el primero de los cuales estuvo instrumentada con un mástil móvil de 10 m de altura, con temperatura en un único nivel, y un segundo periodo en la que se sustituyó por una torre fija, de 15 m, y con temperaturas a dos niveles. En medio queda un periodo sin medidas. Esta situación, explica la existencia del porcentaje de datos válidos que se refleja en la Tabla B.7.

Primer dato analizado:	01-01-2004
Último dato analizado:	31-12-2010
Número de registros:	269.177

Tabla B.7 Medidas estadísticas correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Camp de Turia

Magnitud	Media	Máximo	Mínimo	%Validos	
Dirección (°)	175 ± 18	360	0	87,2	
Velocidad (m/s)	33,6 ± 0,9	36	0	87,2	
Racha máxima (m/s)	3 ± 1	43	0	70,4	
Temperatura_3m (°C)	17 ± 1	42	-5	86,3	
Temperatura_15m (°C)	18 ± 1	45	-4	85,5	

En esta depuradora, la presencia de dos direcciones privilegiadas, se aprecia claramente en todas las presentaciones de los datos, reforzando de esta manera, la onda diurna que de manera normal registraría un emplazamiento sometido preferentemente a un régimen de brisas.

Las distribuciones de las rosas de viento, reflejan una morfología relativamente fusiforme, con vientos moderados a lo largo del eje del río, tanto en circulaciones valle-arriba y valle-abajo que corresponden a circulaciones mesoescalares.

Las situaciones de mayor escala (principalmente ponientes), se presentan como estrechas contribuciones sobre el cuarto cuadrante, con vientos sensiblemente más intensos.

Cabe destacar la dirección NNE con vientos bastante fuertes, provocada probablemente por situaciones sinópticas que desacoplan el sistema local de eje NNW-SE provocado por el encauzamiento que provoca el cauce del río Turia en el entorno de la EDAR (Figura B.16).



Figura B.16 Rosas de viento y temperatura correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Camp de Turia II (fuente: software DMDMETEO)

En cuanto al comportamiento estacional del emplazamiento (Figura B.17), sigue el mismo patrón anterior, disminuyendo claramente la componente marítima (en este caso vientos provenientes del SE) a medida que nos acercamos más a periodos más invernales (haciéndose prácticamente nula esta componente en invierno).

También podemos apreciar que las mayores temperaturas, se registran en dicha dirección, asociadas como anteriormente se ha comentado, al régimen de brisas mucho más intenso en verano (Figura B.16).



Figura B.17 Rosas de viento estacionales correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Camp de Turia II (fuente: software DMDMETEO)

Esta imagen, se confirma con las gráficas de distribuciones, donde las dos direcciones (norte/sursureste) parecen estar bastante perfiladas, con la mayor frecuencia de vientos intensos entre los 270 y 360 grados (Figura B.18a y Figura B.18b).

La distribución de temperaturas (Figura B.18c y Figura B.18d), está claramente ligada a las horas centrales del día y direcciones marítimas en el caso de los valores medios. En los valores máximos, presentan el máximo en torno al noroeste, reflejo sin duda de las elevadas temperaturas asociadas a condiciones de "poniente", sobre todo en verano, y que se puede apreciar en la rosa de temperaturas de la Figura B.16.



Figura B.18 Mapas de distribuciones de frecuencias horarias y direccionales de diversas magnitudes para la EDAR de Camp de Turia II (niveles promedio y máximos de velocidad y temperatura) (fuente: SURFER)

B.8 GANDÍA- LA SAFOR

La depuradora de Gandía, se sitúa al sur de la ciudad, en el margen derecho del río Serpis, en plena llanura litoral, a menos de 1,5 km del borde costero.

En el transcurso de la vía fluvial hacia el interior, ésta se encajona rápidamente en una abrupta orografía de valles, primeras estribaciones costeras del sistema Bético, hacia su nacimiento en la sierra de Mariola.

El emplazamiento participa por lo tanto de características costeras, con una orografía inmediatamente circundante, esencialmente condicionada únicamente plana, por el discurrir del río (aunque meandroso, se dispone aproximadamente según una dirección suroeste-noroeste en este último tramo) y, si cabe, la propia presencia urbana.

Este emplazamiento dispone de una torre meteorológica de diez metros, instalada sobre un mástil portátil, con un único sensor de temperatura superficial a la altura estándar (~3 m).

La recuperación de datos durante el periodo de medidas es en general excelente, siendo una de las torres con mayor porcentaje de datos válidos (Tabla B.8).

Primer dato analizado:	07-12-2004
Último dato analizado:	31-12-2010
Número de registros:	319.104

Tabla B.8 Medidas estadísticas correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Gandía- La Safor

Magnitud	Media	Máximo	Mínimo	%Validos
Dirección (°)	187 ± 16	360	0	92,8
Velocidad (m/s)	$2,4 \pm 0,6$	29,1	0	96,2
Racha máxima (m/s)	$3,9 \pm 0,1$	34,7	0	96,2
Temperatura_3m (°C)	18 ± 1	40	-10	94,2
Temperatura_INT (°C)	20 ± 1	45	-4	96,2

Las rosas de viento, muestran dos direcciones claramente privilegiadas. La primera, en torno al levante, con velocidades moderadas (y las mayores frecuencias de temperaturas elevadas según la correspondiente rosa), y una segunda dirección de vientos aproximadamente del suroeste, más colimados, con velocidades bajas y temperaturas más frías.

Finalmente podríamos destacar otra tercera dirección que correspondería a un pico de vientos muy intensos de componente oeste (Figura B.19).



Figura B.19 Rosas de viento y temperatura correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Gandía- La Safor (fuente: software DMDMETEO)

La componente este corresponde a circulaciones diurnas, de intensidades moderadas y que estarían relacionadas con la entrada a lo largo de la costa de la componente marina de la brisa.

La componente sursuroeste con vientos nocturnos y de menor intensidad, como corresponde al derrame nocturno, y que parece estar un poco condicionada por el cauce del río.

Finalmente parece haber una distribución de vientos en el rango oeste y noroeste con intensidades más altas y cierta independencia horaria, que nuevamente representa circulaciones de mayor escala dejan sobre el emplazamiento (Figura B.21).

Se observa que la componente marina se potencia de forma considerable durante el verano, a la vez que el derrame nocturno es preferiblemente invernal y otoñal. Al igual ocurre con la componente oeste, asignada a circulaciones de mayor escala y claramente inhibida durante el verano. Se encuentra presente con mayor frecuencia en invierno, aunque también, en menor medida, en las estaciones equinocciales (Figura B.20).



Figura B.20 Rosas de viento estacionales correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Gandía- La Safor (fuente: software DMDMETEO)

Fijándose en las gráficas de frecuencias (Figura B.21b, Figura B.21c, Figura B.21e y Figura B.21f), las velocidades medias se centran en torno al este (brisa marina) y al noroeste (componente sinóptica), preferentemente diurna la primera y más persistente en el tiempo la segunda.

Las temperaturas medias (Figura B.21g y Figura B.21h), muestran una distribución asociada a las direcciones de brisa marina.

Se aprecia también el efecto refrigerante de la misma en el hecho, ya comentado en algunos de los emplazamientos anteriores, de que el máximo se registra a primeras horas del día (y no en horas centrales).



Este hecho podría interpretarse como un posible efecto producido por calentamiento orográfico.

Figura B.21 Mapas de distribuciones de frecuencias horarias y direccionales de diversas magnitudes para la EDAR de Gandía- La Safor (niveles promedio y máximos de velocidad y temperatura) (fuente: SURFER)

B.9 VILLENA

La depuradora de aguas residuales de Villena se encuentra situada en el término municipal del mismo nombre, al noroeste del casco urbano y a una distancia de éste de aproximadamente unos 3 km.

Situada en el curso alto del Vinalopó, tras el curso encajonado a la altura de Elda y Sax, desde el suroeste el valle, se abre aguas arriba en una amplia vega en la que el río gira hacia la derecha, hacia las cumbres de su nacimiento en la sierra de Mariola.

Así pues el emplazamiento se sitúa en un punto de inflexión de la cuenca, que se orienta hacia el SE aguas abajo y aproximadamente hacia el NE aguas arriba.

Esta ubicación es relativamente nueva, habiéndose instalado una torre meteorológica provisional. Apenas se han recogido 8 meses de datos por lo que la estadística (Tabla B.9) que aquí se presenta está sesgada (no contiene datos de los meses de primavera) y se muestra como mera información, sin que ésta validez estadística.

Primer dato analizado:	24-06-2010
Último dato analizado:	09-02-2011
Número de registros:	33.185

Tabla B.9 Medidas estadísticas correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Villena

Magnitud	Media	Máximo	Mínimo	%Validos
Dirección (°)	181 ± 19	360	0,1	94,7
Velocidad (m/s)	$2,4 \pm 0,6$	12,6	0	94,7
Racha máxima (m/s)	$3,8 \pm 0,1$	20,1	0	94,7
Temperatura_3m (°C)	15 ± 1	40	-7	94,7
Temperatura_INT (°C)	19 ± 1	45	-4	94,6

La estructura del valle se refleja claramente en la morfología de la figura, con tres direcciones preferentes: aguas arriba hacia el sursureste; aguas abajo, hacia el nornoreste y finalmente una dirección centrada hacia el noroeste que





Figura B.22 Rosas de viento y temperatura correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Villena (fuente: software DMDMETEO)

Estacionalmente³ (Figura B.23), vemos que en época estival la componente del sursureste, es decir la de aguas abajo, se colima como consecuencia del encauzamiento a lo largo del valle, presentando unas velocidades del viento mayores que en las demás estaciones.

En invierno dicha componente sursureste no es demasiado significante como consecuencia del flujo terral proveniente de aguas abajo que provoca que la rosa invernal presente esa forma de "bola de billar" con ninguna dirección bien definida.

En general se potencian las componentes de brisa durante los periodos más estivales, mientras que en invierno predominan las circulaciones de mayor escala, tanto del noroeste (con intensidades más elevadas) como del noreste.

Curiosamente es en el periodo invernal cuando, a la par que se registran las intensidades de viento más elevadas, también se producen las mayores frecuencias de calmas.

Debido a la protección del valle, el desacoplamiento nocturno del régimen superficial (favorecido en su caso por un enfriamiento intenso) respecto a niveles superiores hace que

³ No se muestra la rosa estacional de primavera por no disponerse de registros. Recordemos que la torre se instaló y fue operativa casi en verano y en Villena se realizaron solamente campañas puntuales

se favorezca el encalmamiento de los niveles más superficiales, especialmente en horas nocturnas (como es conocido, la zona registra también, y ligado a este mecanismo, una elevada frecuencia de nieblas).



Figura B.23 Rosas de viento estacionales correspondientes al periodo total disponible para la EDAR de Villena (fuente: software DMDMETEO)

Si se observa la distribución de direcciones por hora del día (Figura B.24a), se puede observar que la componente del sureste prevalece durante la mayor parte del día, representando la correspondiente fase diurna de la brisa de valle.

También en dicha figura, puede apreciarse que la circulación del noreste es preferentemente nocturna, con vientos preferentemente flojos (Figura B.24b), que corresponden a los característicos vientos de derrame nocturno, mientras que la componente más diurna tiene valores de velocidad un poco más elevados.



Figura B.24 Mapas de distribuciones de frecuencias horarias y direccionales de diversas magnitudes (niveles promedio y máximos de velocidad y temperatura) para la EDAR de Villena (fuente: SURFER)

En esta distribución de vientos, la componente norte gira hacia el noroeste en las horas centrales del día, a la vez que se hace más intensa.

Se trata de la canalización a la altura del emplazamiento de la circulación general, y que habitualmente presenta mayores velocidades y persistencias (no está ligada al ciclo diurno) (Figura B.24c).

En esta misma figura puede apreciarse, aun siendo las intensidades mayores en el periodo central del día (por acoplamiento/desacoplamiento de los vientos en superficie y altura en la cuenca del valle), que hay una persistencia más marcada durante todas las horas para las direcciones del NW.

Se puede apreciar también, que corresponden a esta dirección la mayor frecuencia de vientos intensos (en menor grado para los vientos del noreste, que recogen las advecciones del primer cuadrante, también características de las costas levantinas), mientras que la brisa diurna presenta mayor frecuencia de vientos moderados (Figura B.24c y Figura B.24d).

B.10 RESUMEN

Del análisis meteorológico de los ocho emplazamientos estudiados⁴, prácticamente todos ellos de carácter costero, se pueden extraer algunas conclusiones de naturaleza similar a todos ellos.

La mayoría de los emplazamientos mostrados están marcados por un ciclo diurno muy marcado. Como consecuencia, se observa en todos ellos una clara alternancia del viento durante el día y la noche, con vientos en general más intensos procedentes del mar (condiciones anabáticas) y más moderados, a la vez que más fríos en condiciones de derrame nocturno (condiciones catabáticas).

Este patrón se ve modificado a lo largo del año (onda estacional) de manera diferente para cada ubicación, pero todos ellos participan en mayor o menor medida de una mayor frecuencia estival (periodo el cuál el sistema de brisas está más desarrollado).

La orografía circundante del emplazamiento impone ciertas restricciones propias del emplazamiento, que modifican la apariencia de las distribuciones, imponiendo direcciones privilegiadas y restricciones más o menos intensas, mientras que, cuantitativamente pueden inducir ciertas aceleraciones o desaceleraciones del viento modificando los niveles registrados de velocidad.

En algunos de los casos puede ser destacable el efecto de refrigeración en la temperatura provocado por la entrada de brisa marina, que se va atenuando con la distancia hacia el interior, y que como se ha comentado en algunas ubicaciones

⁴ No se ha mostrado el análisis de la EDAR de Algorós y del Grao de Castellón por no pertenecer a la red meteorológica del CEAM y no poder hacer un seguimiento directo de los datos proporcionados por las cabinas de calidad del aire de la Red Valenciana de Vigilancia y Control de la Contaminación Atmosférica (RVVCCV) pertenecientes a la Conselleria de Infraestructuras, Territorio y Medio Ambiente.

provocan que se alcancen las máximas del día no a las horas centrales sino a primeras horas de la mañana.

Por último, destacar el interés que tiene desde el punto de vista del conocimiento del propio entorno el estudio de las anomalías (tanto térmicas como aerológicas) para la caracterización de posibles impactos olfativos y de la dispersión de olores, objetivos principales los dos de los presentes trabajos y donde una parte muy importante de ellos se fundamenta en la mejor y más exhaustiva explotación de datos meteorológicos.

MATERIAL COMPLEMENTARIO C

Descripción de la red de inmisión de captadores pasivos

Un científico no sólo tiene la obligación de investigar, sino que también tiene la responsabilidad ética sobre las consecuencias de aquello que produce su ingenio

Peter Ustinov (1921-2004)

Se pretende describir de una manera sucinta la distribución de los puntos de medida de los dosímetros pasivos en los distintos emplazamientos.

En este caso se presentan la distribución de puntos de muestreo de las EDAR de Cuenca del Carraixet, Denia-Ondara-Pedreguer, La Vila Joiosa, Rincón de León, Camp de Turia II y Gandía – La Safor.

No se muestra la red de inmisión del Grao de Castellón, Algorós y Villena puesto que la EPSAR no ha dado autorización para dar las coordenadas exactas. Por tanto cualquier representación de puntos de muestreo presentados a lo largo del trabajo, es una representación aproximada. No obstante sí que se han utilizado las coordenadas exactas a la hora de realizar cualquier cálculo.

El emplazamiento de Gandía – La Safor no se muestra por no disponer de muestreo exterior.

C.1 DISTRIBUCIÓN DE LOS DOSÍMETROS

De acuerdo a los estudios preliminares anteriores a la realización de esta tesis, se decidió distribuir los puntos de medida en dos zonas: una zona interior de la depuradora, delimitada por la valla perimetral, en la que se sitúan todos los focos potencialmente emisores de olores, y el área exterior.

Dentro del área interior, la distribución de puntos de medida se dispuso intentando cubrir todo el espacio, con un criterio más geométrico, en puntos intermedios entre los focos potenciales, teniendo muy en cuenta que no estuvieran bajo la influencia directa de las emisiones de estos.

Especial atención se prestó a los límites de la planta (zona perimetral exterior), a través de los cuales se realiza la teórica exportación de los olores hacia el exterior de la instalación. En este sentido, se procuró disponer una serie de puntos de medida cubriendo el perímetro, de manera que todas las direcciones apareciesen "vigiladas" por algún punto de medida.

Fuera del recinto de la planta (perímetro exterior) la distribución se ajustó teniendo en cuenta el régimen de vientos y la orografía circundante, siempre procurando elegir las ubicaciones alejadas de focos concretos que pudiesen afectar fuertemente las mediciones. Son estos muestreos exteriores los que nos permiten realizar las modelizaciones que se han mostrado en la sección de resultados y los que nos permiten el ajuste de nuestro modelo.

Los puntos de medida se mantuvieron invariables en todas las campañas (siempre que ello fue posible, habiéndose producido alteraciones a lo largo de la duración del proyecto que impidieron puntualmente el muestreo en alguno de los emplazamientos), facilitando la intercomparación de resultados.

C.2 ENTORNO TOPOGRÁFICO

En las tablas adjuntas se resumen las dimensiones y características de las ventanas seleccionadas como áreas externas e internas de trabajo en cada emplazamiento.

Las dimensiones de cada lado (Lx, Ly) y las coordenadas UTM de los vértices (X0, Y0, X1, Y1) se expresan en kilómetros.

La altura mínima y máxima (Zm, Zx) de las celdas del MDT25 se indica en metros.

Finalmente, se incluye también las dimensiones de la malla (Nx, Ny) referidas, al igual que las alturas, al modelo digital del terreno 1:25000 (MDT25), con una resolución horizontal y vertical de celda de 25 y 1 metro respectivamente.

Para el emplazamiento de Camp de Turia II no se realizaron simulaciones numéricas, por lo que no se preparó el correspondiente modelo digital del terreno. Por último a cada punto de medida se le asignará un código alfanumérico compuesto por tres dígitos. Así el primer dígito corresponderá al emplazamiento (**C**: Conca de Carraixet; **D**: Denia-Ondara-Pedreguer; **V**: Vila Joiosa; **R**: Rincón de León, **T**: Camp de Turia), seguido de la ubicación de dicho punto (**I**: muestreo interior; **E**: muestro exterior) y finalmente con la numeración del punto de medida.

Así pues por ejemplo el punto CEO4, corresponde al punto de medida O4 del muestreo exterior (E) de la Conca del Carraixet (C)

Tabla C.1 Dimensiones y características del área de distribución de los dosímetros para cada emplazamiento (Arriba: dimensiones área de trabajo muestreo exterior; Abajo: dimensiones área de trabajo muestreo interior)

ÁREA	Nx	Ny	Lx	Ly	XO	X1	YO	Y1	Zm	Zx
Ext										
CARRAIX	161	160	4	4	727,5	731,5	4374,0	4378,0	0	13
DENIA	160	161	4	4	762,0	766,0	4300,0	4304,0	9	246
LAVILA	160	160	4	4	738,0	742,0	4265,5	4269,5	0	263
RDELEON	160	160	4	4	714,5	718,5	4244,0	4248,0	0	82
TURIA		-	2	2	712,0	714,0	4378,0	4380,0		

ÁREA	Nx	Ny	Lx	Ly	XO	X1	YO	Y1	Zm	Zx
Int										
CARRAIX	15	14	0,3	0,3	729,2	729,5	4375,7	4376,1	4	5
DENIA	14	14	0,3	0,3	763,5	763,9	4301,4	4301,7	27	34
LAVILA	20	20	0,5	0,5	739,1	739,6	4267,5	4268,0	49	110
RDELEON	20	20	0,5	0,5	716,2	716,7	4245,9	4246,4	18	52
TURIA			0,3	0,5	712,8	713,1	4378,8	4379,3		

C.2.1 EDAR CUENCA DEL CARRAIXET

Tabla C.2 Red de captadores pasivos para la EDAR de la Conca de Carraixet

Código	Coord X	Coord Y	Altura	Descripción ¹
	(m)	(m)	(m)	
CI 01	729,497	4375,899	131	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
CI 02	729,493	4375,953	22	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
CI 03	729,413	4376,009	14	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
CI04	729,340	4376,022	75	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
CI 05	729,289	4375,941	13	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
C106	729,273	4375,889	13	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
CI 07	729,336	4375,867	8	Colgado en un árbol
C108	729,499	4375817	17	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
CI 09	729,452	4375,877	6	Colgado en una farola
CI 10	729,473	4375,945	2	Colgado en una farola
CI 11	729,409	4375,969	9	Sujeto a un poste metálico
CI 12	729,364	4375,962	8	Colgado en una farola
CI 13	729,391	4375,908	7	Enganchado a la pasarela del reactor
CI 14	729,351	4375,911	5	Colgado en una farola
CE01	728,560	4376,612	0	Colgado en una columna eléctrica
CE02	728,467	4376,277	13	Colgado en un poste de madera
CE03	728,466	4375,628	1	Colgado en un poste de madera
CEO4	728,892	4376,353	0	Colgado en una columna eléctrica
CE05	728,859	4376,119	6	En un poste de luz de hormigón
CE06	728,919	4375,595	10	Colgado en un poste de madera
CE07	729,954	4376,045	37	Colgado en una torre eléctrica
CE08	729,863	4375,769	28	Colgado en un poste de madera
CE09	729,833	4375,476	29	Colgado en un poste de madera
CE10	730,154	4376,026	9	Sujeto a un árbol, con una estaca
CE11	730,174	4375,832	46	Colgado en un poste de madera
CE12	730,177	4375,370	1	Sujeto a la valla perimetral de un camping

¹Por motivos de confidencialidad no se muestran "el lugar mediante fotografía el lugar de colocación de cada punto dosimétrico para cada emplazamiento. No obstante se describe lo más detalladamente posible el lugar de colocación. Si se desea una visualización del punto exacto de medida por favor requerir personalmente al autor.



Figura C.1 Planta de la EDAR de la Conca de Carraixet (arriba; fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>). Red de muestreo interior (figura abajo izquierda; fuente: Aplicación DIMEDAR) y red de distribución exterior (figura abajo derecha; fuente: SURFER)

C.2.2 EDAR DE DENIA-ONDARA-PEDREGUER

Tabla C.3 Red de captadores pasivos para la EDAR de Denia-Ondara-Pedreguer

Código	Coord X	Coord Y	Altura	Descripción
	(m)	(m)	(m)	
DI01	763,789	4301,551	35	Colgado en una farola
DI 02	763,847	4301,640	42	En un poste de madera
DI 03	763,797	4301,662	30	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
DI04	763,754	4301,678	37	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
DI 05	763,729	4301,652	43	Colgado en un árbol
DI 06	763,669	4301,613	25	Colgado en una farola
DI07	763,633	4301,560	49	Colgado en un árbol

DI 08	763,681	4301,511	34	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
DI 09	763,736	4301,491	48	Enganchado a una pasarela
DI 10	763,712	4301,527	41	Colgado en una farola
DI 11	763,790	4301,595	38	Colgado en una farola
DI 12	763,760	4301,645	39	Colgado en la torre meteorológica
DI 13	763,717	4301,603	36	Colgado en una farola
DI 14	763,703	4301,552	36	Colgado en una farola
DE01	762,571	4300,868	47	Sujeto a una torre de alta tensión
DE02	762,769	4301,084	41	Colgado a un poste de madera
DE03	763,228	4301,325	33	En la valla perimetral de una casa de campo
DE04	764,086	4302,022	36	En la valla de un campo de naranjos
DE05	764,646	4302,278	43	Enganchado en una torre de alta tensión
DE06	764,931	4302,475	35	En un poste de madera
DE07	763,346	4302,566	38	En un poste de madera
DE08	763,576	4302,240	36	Colgado en una torre eléctrica
DE09	764,211	4301,473	37	Colgado en una torre eléctrica
DE10	765,018	4301,575	32	Sujeto a la valla de un chalet



Figura C.2 Planta de la EDAR de Denia-Ondara-Pedreguer (arriba; fuente: www.epsar.gva.es). Red de muestreo interior (figura abajo izquierda; fuente: Aplicación DIMEDAR) y red de distribución exterior (figura abajo derecha; fuente: SURFER)

C.2.3 EDAR DE LA VILA JOIOSA

Tabla C.4 Red de captadores pasivos para la EDAR de la Vila Joiosa

Código	Coord X	Coord Y	Altura	Descripción
	(m)	(m)	(m)	
VI01	739,343	4267,672	64	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
VI02	739,413	4267,634	93	Colgado en una farola
VI03	739,450	4267,667	81	Colgado en una torre eléctrica
VI04	739,408	4267,767	74	Con una estaca, en el perímetro de la EDAR
VI 05	739,361	4267,810	87	Con una estaca, en el perímetro de la EDAR
VI 06	739,391	4267,894	81	Con una estaca, en el perímetro de la EDAR
VI 07	739,314	4267,862	89	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
VI 08	739,200	4267,820	86	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
VI 09	739,155	4267,801	64	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
VI 10	739,208	4267,709	95	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
VI 11	739,233	4267,654	100	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
VI 12	739,280	4267,707	90	Colgado en una farola
VI 13	739,300	4267,749	77	Colgado en la torre meteorológica
VI 14	739,238	4267,792	82	Colgado en una farola
VEO1	738,529	4268,817	134	En una farola en el pantano
VEO2	739,051	4268,362	82	Colgado en un poste de madera
VEO3	739,870	4267,894	73	Sujeto a una torre meteorológica
VEO4	739,692	4267,514	68	Sujeto a un poste eléctrico
VE05	739,537	4267,152	64	En la valla de un campo de naranjos
VE06	740,436	4267,426	42	Colgado en un poste de madera
VEO7	740,323	4267,087	62	Colgado en un poste de madera
VE08	739,781	4266,956	59	En la valla de un campo de naranjos
VE09	740,773	4267,153	42	Colgado en un poste de madera
VE10	740,423	4266,718	50	Colgado en un poste de madera
VE11	739,899	4266,538	386	Colgado en un poste de madera
VE12	740,700	4266,504	52	Colgado en un poste de madera



Figura C.3 Planta de la EDAR de la Vila Joiosa (arriba; fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>). Red de muestreo interior (figura abajo izquierda; fuente: Aplicación DIMEDAR) y red de distribución exterior (figura abajo derecha; fuente: SURFER)

C.2.4 EDAR DE RINCÓN DE LEÓN

Código	Coord X	Coord Y	Altura	Descripción
	(m)	(m)	(m)	
RI01	716,474	4246,267	0	Sujeto a una torre eléctrica
RI 02	716,337	4246,136	0	Colgado en la torre meteorológica
RI03	716,410	4246,052	0	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
RI04	716,500	4246,003	0	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
RI 05	716,610	4245,997	0	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
RI 06	716,695	4246,098	0	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
RI07	716,675	4246,160	0	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
RI 08	716,607	4246,238	0	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
RI 09	716,558	4246,239	0	Colgado en un árbol.
RI 10	716,451	4246,176	0	Colgado en el pasillo entre los digestores

Tabla C.5 Red de captadores pasivos para la EDAR de Rincón de León

RI 11	716,418	4246,121	0	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
RI 12	716,571	4246,041	0	Colgado en una farola
RI 13	716,569	4246,096	0	Colgado en una farola
RI14	716,569	4246,137	0	En la azotea del edificio de control
RI 15	716,555	4246,170	0	Colgado en una farola
RE01	715,131	4246,442	56	Colgado en una torre eléctrica
RE02	715,825	4246,651	41	Colgado en una farola
RE03	715,557	4246,263	23	En la valla de un campo de naranjos
REO4	715,497	4245,667	33	Colgado en un poste de madera
RE05	716,183	4246,468	27	Enganchado a una estaca de madera
RE06	715,970	4246,302	29	Sujeto a una torre eléctrica
RE07	715,941	4246,186	23	Colgado en una torre eléctrica
RE08	716,751	4245,999	4	Colgado en un poste metálico
RE09	716,979	4245,833	21	Colgado en una torre eléctrica
RE10	717,705	4245,680	37	Colgado en una farola
RE11	717,987	4245,536	19	En la escollera al lado del puerto



Figura C.4 Planta de la EDAR de Rincón de León (arriba; fuente: <u>www.epsar.gva.es</u>). Red de muestreo interior (figura abajo izquierda; fuente: Aplicación DIMEDAR) y red de distribución exterior (figura abajo derecha; fuente: SURFER)

C.2.5 EDAR DE CAMP DE TURIA

Tabla C.6 Red de captadores pasivos para la EDAR de Camp de Turia

Código	Coord X	Coord	Descripción
	(m)	Y (m)	
TI01	713,048	4378,943	Sujeto a la valla perimetral de la EDAR
TI 02	713,029	4378,966	En los silos de fangos
TI 03	713,009	4379,008	En una farola perimetral
TI 04	713,023	4379,055	En la pasarela del tanque de homogenización
TI 05	712,991	4379,071	En una farola perimetral
TI 06	713,028	4379,140	En la barandilla del reactor biológico.
TI 07	712,976	4379,130	En una farola perimetral
TI 08	712,959	4379,191	En una farola perimetral
TI 09	712,987	4379,216	En una farola perimetral
TI 10	713,012	4379,240	En una farola al lado del decantador
TI 11	712,960	4379,286	En la barandilla del edificio de control
TI 12	712,926	4379,280	En la barandilla del edificio de control
TE01	712,752	4379,637	En una estaca de madera
TE02	712,869	4379,462	En una estaca de madera
TE03	713,151	4378,724	En una estaca de madera
TEO4	713,256	4378,569	En una estaca de madera
TE05	713,092	4379,139	En un árbol
TE06	712,881	4378,966	En una estaca de madera
TE07	712,820	4379,070	En la valla perimetral de un campo
TE08	712,694	4378,950	En la valla perimetral de un campo



Figura C.5 Red de muestreo interior (figura izquierda; fuente: Aplicación DIMEDAR) y red de distribución exterior (figura derecha; fuente: SURFER)

MATERIAL COMPLEMENTARIO D

Recomendaciones y consideraciones específicas para los sistemas de desodorización

En lo tocante a la ciencia, la autoridad de un millar no es superior al humilde razonamiento de una sola persona

Galileo Galilei (1564-1642)

Los resultados de las experiencias descritas en los sistemas de desodorización realizadas en una primera tanda, permiten extraer algunas conclusiones que se pasan a formular a continuación.

La tecnología utilizada, adaptada paralelamente a la consolidación de los protocolos de medida con dosímetros pasivos en fases anteriores, parece especialmente adecuada, amén de otras aplicaciones, en aquellas situaciones en las que se precisa conocer niveles de concentración en conductos cerrados, con utilidad ventajosa en casos como el presente, en que se evalúan variaciones relativas en diferentes puntos (rendimiento de la eliminación de ciertos compuestos). También proporciona un procedimiento para medir explícitamente emisiones en algunos de los focos.

Los resultados de las experiencias muestran rendimientos elevados en el caso del sulfuro de hidrógeno, si bien no se han evaluado las emisiones totales (al no haberse medido el caudal).

El caudal debería ser un parámetro a registrar en cada muestreo, dado que puede ser fuente de variación importante en las mediciones realizadas. Y en esta línea, también parece interesante, apoyado por la facilidad de medida, adjuntar el valor de la temperatura y pH del gas en el conducto.

La variabilidad entre medidas en el mismo punto, que en el diseño inicial se planificaron en número de tres, aleatorizado su orden en el contexto de toda la experiencia, aparece en ocasiones bastante elevada, lo que no está claro si se debe a un efecto de la medida o de la variabilidad inherente al propio sistema. Caracterizar este hecho sería deseable a la hora de planificar experiencias futuras en esta línea.

Una utilidad potencial de esta metodología sería la posibilidad de evaluar la eficacia de la adición de las disoluciones que neutralizan las moléculas generadoras de olor, en los tanques de desodorización (tanto en lo que se refiere a cantidad como a su naturaleza).

La experiencia acumulada hasta el momento en las medidas en campo, y con la utilización del instrumental de muestreo disponible (diseñado como prototipo en fases anteriores al actual trabajo de investigación), permitirían definir unas especificaciones muy concretas para el diseño de un equipo de medida con recursos electrónicos actualizados y una funcionalidad adecuada para los objetivos del procedimiento de medida. Un equipo de estas características no existe actualmente en el mercado, lo que podría ser un posible objeto de patente.

Recomendaciones en la instalación de orificios de muestreo en los conductos de aire

En lo que sigue se proponen algunas recomendaciones para la instalación de orificios en aquellas tuberías de transporte de aire para permitir el muestreo mediante la tecnología de captadores activos. Estos orificios deberían permitir simplemente la introducción de un tubo para el muestreo de gases, así como una sonda de caudal (tubo de pitot) y de temperatura cuando fuera menester.

Como norma general, estas medidas no serán adecuadas mediante la metodología actual en aquellas tuberías sometidas a elevadas presiones o temperaturas.

En los conductos en los que se instale un único punto de muestreo se preferirá un orificio de sección ancha (~50 mm), mientras que en el caso de varias tomas de acceso secuenciales (como ocurre en el caso de una cadena de tanques de desodorización, basta con que sea grande uno de ellos, pudiendo los restantes ser de dimensión más reducida (~20 mm), suficiente para la introducción únicamente de la sonda de gases (de sección inferior a los 5-6 mm).

Los orificios deberán estar herméticamente cerrados. Un tapón roscado con su correspondiente junta de goma proporciona una solución adecuada y suficiente. La posibilidad de válvulas de cierre manual nos proporciona mayor comodidad a la hora de su manipulación. En cualquier caso debe estar presente un tapón roscado al final del
conducto (en el caso de que se cierre mediante otro procedimiento deberá existir una rosca estándar en la que poder acoplar un tapón), sobre el que se practicarán las adaptaciones oportunas para fijar el acceso de las sondas.

Los orificios deberán colocarse en puntos accesibles, y siempre que sea posible, al alcance de la mano (así, en conductos horizontales de amplia sección se preferirán posiciones laterales que sobre la parte superior).

Con objeto de que no se acumulen líquidos en el tapón y puedan derramarse al proceder a la apertura del orificio, se procurará su colocación con una inclinación ligeramente hacia arriba sobre la horizontal en aquellos conductos que discurran planos o inclinados.

Los accesos deberían situarse suficientemente alejados de otros elementos que puedan perturbar la medida (ventiladores, tanques de acumulación de líquidos, etc.), procurando cuando sea posible colocarlos en tramos intermedios, donde el flujo es más laminar, la mezcla efectiva y las condiciones estacionarias.

El material de fabricación de los elementos de cierre/acceso de los orificios practicados, así como de los colocados para la toma de muestras, deberán ser inertes, adecuados a las especificaciones de los compuestos potencialmente corrosivos presentes en los conductos, y en cualquier caso preferiblemente del mismo material que la propia tubería.

<u>Condiciones específicas para los sistemas de desodorización</u>

El orificio de muestreo antes de la primera unidad deberá ubicarse después del ventilador, cuando ya no se produzca la incorporación de ninguna corriente de aire a tratar.

En los orificios entre unidades, estas tomas se situarán con la apertura lateral, nunca orientada hacia abajo.

En la chimenea de la última unidad o, en general, cuando un punto de muestreo no quede accesible, deberá instalarse un tubo de material inerte que permita aspirar desde el eje de la conducción y transportar la muestra hasta un punto de fácil acceso (entre 100 y 150 cm del suelo).

Este tubo quedará cerrado mediante un tapón roscado hembra, no debiéndose instalarse a menos de 30 cm del extremo roscado, codos, válvulas o cualquier otro obstáculo que impida la introducción de una sonda recta. La toma se efectuará alejándose del borde a la chimenea; así, si se denomina L a la longitud cilíndrica de la chimenea, el punto de toma de muestra se ubicará a una distancia del borde no inferior a 2L/3.

Es conveniente que en la perforación de la chimenea se sitúe un tubo interior, de sección aproximada al de la propia toma, horizontal, en disposición radial, de longitud próxima al radio de aquella, de manera que la toma de aire en el momento del muestreo proceda de la zona central de la corriente emitida, más que de las zonas próximas a las paredes (en el resto de los orificios el muestreo en el centro aproximado de la tubería se consigue prolongando suficientemente la sonda de toma de muestra).

MATERIAL COMPLEMENTARIO E

Fechas campañas experimentales

En el lenguaje científico la claridad es la única estética permitida

Gregorio Marañon (1887-1960)

Se presentan las fechas (tanto inicial y final) para cada una de las campañas en cada una de las zonas de estudio.

Para tener una mejor visualización de las distintas campañas, debido al número elevado de ellas, se han dividido por emplazamientos.

Cada emplazamiento consta de la siguiente información:

- El mes durante el cual se ha realizado la campaña. Esta información posteriormente será muy útil a la hora de ver la evolución estacional de cada emplazamiento.

- El nombre de la campaña. En este punto se ha nombrado a distintivo mediante cada campaña un para cada emplazamiento seguido de un número (que indica el número de año de cada campaña (ojo, no indica el año de dicha campaña, sino si es una campaña del primer año de proyecto, del segundo, etc...), seguido del número de la campaña en ese mismo año. El código O indica que dichas campañas tienen muestreos intensivos, es decir, medidas tanto en el interior como en el exterior de la planta. Así, pues por ejemplo la campaña CO-O3 sería C (Conca del Carraixet), con muestreo interior y exterior (por el 0) y sería la tercera campaña de ese año (03).

- Y finalmente la fecha de inicio de colocación de los dosímetros (fecha de inicio de la campaña) y fecha de recogida (fecha de finalización).

Los códigos de los diferentes emplazamientos son los siguientes:

(C) Conca de Carraixet (Alboraya); (D) Denia-Ondara-Pedreguer; (V) La Vila Joiosa; (R) Rincón de León (Alicante); (Q) Quart-Benager; (CT) Camp de Turia II

(Ribarroja del Turia); **(G)** Gandía la Safor; **(VI)** Villena; **(AL)** Algorós (Elche); **(CS)** Grao de Castellón.

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Junio - 2002	C0-01	07/06/02	12/06/02
Agosto - 2002	C0-02	09/08/02	13/08/02
Febrero - 2003	C0-03	20/02/03	27/02/03
Abril - 2003	C0-04	24/04/03	29/04/03
Junio -2003	C0-05	12/06/03	17/06/03
Junio – 2003 (II)	C0-06	26/06/03	01/07/03
Enero - 2005	C1-01	28/01/05	01/02/05
Febrero - 2005	C1-02	17/02/05	22/02/05
Marzo - 2005	C1-03	03/03/05	08/03/05
Abril - 2005	C1-04	14/04/05	19/04/05
Mayo - 2005	C1-05	12/05/05	17/05/05
Junio - 2005	C1-06	16/06/05	21/06/05
Julio - 2005	C1-07	07/07/05	12/07/05
Julio - 2005 (II)	C1-08	21/07/05	26/07/05
Septiembre - 2005	C1-09	22/09/05	27/09/05
Octubre - 2005	C1-10	20/10/05	25/10/05
Noviembre - 2005	C1-11	17/11/05	22/11/05
Diciembre - 2005	C1-12	15/12/05	20/12/05
Enero - 2006	C2-01	12/01/06	17/01/06
Febrero - 2006	C2-02	09/02/06	14/02/06
Marzo - 2006	C2-03	23/03/06	28/03/06
Mayo - 2006	C2-04	11/05/06	16/05/06
Mayo – 2006 (II)	C2-05	25/05/06	30/05/06
Junio - 2006	C2-06	15/06/06	19/06/06
Julio - 2006	C2-07	06/07/06	11/07/06

E.1 EDAR DE CONCA DEL CARRAIXET (ALBORAYA)

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Julio - 2006 (II)	C2-08	20/07/06	26/07/06
Septiembre - 2006	C2-09	21/09/06	26/09/06
Octubre - 2006	C2-10	19/10/06	24/10/06
Noviembre - 2006	C2-11	09/11/06	14/11/06
Noviembre – 2006 (II)	C2-12	23/11/06	28/11/06
Abril - 2008	C3-01	02/04/08	07/04/08
Mayo - 2008	C3-02	22/05/08	27/05/08
Junio - 2008	C3-03	05/06/08	10/06/08
Junio - 2008	C3-04	19/06/08	24/06/08
Julio - 2008	C3-05	10/07/08	15/07/08
Septiembre - 2008	C3-06	25/09/08	30/09/08
Octubre - 2008	C3-07	16/10/08	21/10/08
Noviembre - 2008	C3-08	13/11/08	18/11/08
Diciembre - 2008	C3-09	11/12/08	16/12/08
Enero - 2009	C4-01	08/01/09	13/01/09
Febrero - 2009	C4-02	05/02/09	10/02/09
Marzo - 2009	C4-03	05/03/09	10/03/09
Abril - 2009	C4-04	02/04/09	07/04/09
Mayo - 2009	C4-05	21/05/09	25/05/09
Junio - 2009	C4-06	11/06/09	16/06/09
Julio - 2009	C4-07	02/07/09	07/07/09
Septiembre - 2009	C4-08	03/09/09	08/09/09
Septiembre – 2009 (II)	C4-09	17/09/09	22/09/09
Octubre - 2009	C4-10	15/10/09	20/10/09
Noviembre - 2009	C4-11	11/11/09	20/11/09
Diciembre – 2009	C4-12	10/12/09	15/12/09
Enero - 2010	C5-01	15/01/10	20/01/10
Febrero - 2010	C5-02	11/02/10	16/02/10
Marzo - 2010	C5-03	04/03/10	09/03/10
Abril - 2010	C5-04	15/04/10	20/04/10
Mayo - 2010	C5-05	13/05/10	18/05/10
Junio - 2010	C5-06	10/06/10	15/06/10

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Julio - 2010	C5-07	08/07/10	13/07/10
Septiembre - 2010	C5-08	03/09/10	07/09/10
Septiembre – 2010 (II)	C5-09	16/09/10	21/09/10
Octubre - 2010	C5-10	14/10/10	19/10/10
Noviembre - 2010	C5-11	11/11/10	16/11/10
Diciembre – 2010	C5-12	16/12/10	21/12/10
Enero - 2011	C6-01	13/01/11	18/01/11
Febrero - 2011	C6-02	17/02/11	22/02/11
Marzo - 2011	C6-03	25/03/11	29/03/11

E.2 EDAR DE DENIA-ONDARA-PEDREGUER

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Mayo - 2002	D0-01	30/05/02	04/06/02
Julio - 2002	D0-02	11/07/02	16/07/02
Febrero - 2003	D0-03	06/02/03	11/02/03
Abril - 2003	D0-04	30/04/03	07/05/03
Junio -2003	D0-05	05/06/03	10/06/03
Julio – 2003	D0-06	03/07/03	08/07/03
Enero - 2004	D0-07	21/01/04	27/01/04
Febrero - 2004	D0-08	26/02/04	02/03/04
Enero - 2005	D1-01	28/01/05	01/02/05
Febrero - 2005	D1-02	17/02/05	22/02/05
Marzo - 2005	D1-03	03/03/05	08/03/05
Abril - 2005	D1-04	14/04/05	19/04/05
Mayo - 2005	D1-05	13/05/05	17/05/05
Junio - 2005	D1-06	16/06/05	21/06/05
Julio - 2005	D1-07	07/07/05	12/07/05
Julio - 2005 (II)	D1-08	21/07/05	27/07/05
Septiembre - 2005	D1-09	22/09/05	27/09/05
Octubre - 2005	D1-10	20/10/05	25/10/05

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Noviembre - 2005	D1-11	17/11/05	22/07/05
Diciembre - 2005	D1-12	15/12/05	20/12/05
Enero - 2006	D2-01	12/07/06	17/01/06
Febrero - 2006	D2-02	09/02/06	14/02/06
Marzo - 2006	D2-03	23/03/06	28/03/06
Mayo - 2006	D2-04	12/05/06	16/05/06
Mayo – 2006 (II)	D2-05	25/05/06	30/05/06
Junio - 2006	D2-06	15/06/06	20/06/06
Julio - 2006	D2-07	06/07/06	11/07/06
Julio - 2006 (II)	D2-08	20/07/06	25/07/06
Septiembre - 2006	D2-09	21/09/06	26/09/06
Octubre - 2006	D2-10	19/10/06	24/10/06
Noviembre - 2006	D2-11	09/11/06	14/11/06
Noviembre – 2006 (II)	D2-12	23/11/06	28/11/06

E.3 EDAR DE LA VILA JOIOSA

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Mayo - 2002	V0-01	23/05/02	28/05/02
Julio - 2002	V0-02	18/07/02	23/07/02
Enero - 2003	V0-03	30/01/03	04/02/03
Mayo - 2003	V0-04	08/05/03	13/05/03
Mayo -2003 (II)	V0-05	29/05/03	03/06/03
Julio – 2003	V0-06	10/07/03	15/07/03
Enero - 2004	V0-07	15/01/04	20/01/04
Febrero - 2004	V0-08	19/02/04	26/02/04
Enero - 2005	V1-01	28/01/05	01/02/05
Febrero - 2005	V1-02	17/02/05	22/02/05
Marzo - 2005	V1-03	04/03/05	08/03/05
Abril - 2005	V1-04	14/04/05	19/04/05
Mayo - 2005	V1-05	13/05/05	17/05/05

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Junio - 2005	V1-06	16/06/05	21/06/05
Julio - 2005	V1-07	07/07/05	12/07/05
Julio - 2005 (II)	V1-08	21/07/05	26/07/05
Septiembre - 2005	V1-09	22/09/05	27/09/05
Octubre - 2005	V1-10	20/10/05	25/10/05
Noviembre - 2005	V1-11	17/11/05	22/11/05
Diciembre - 2005	V1-12	15/12/05	20/12/05
Enero - 2006	V2-01	12/01/06	17/01/06
Febrero - 2006	V2-02	09/02/06	14/02/06
Marzo - 2006	V2-03	23/03/06	28/03/06
Mayo - 2006	V2-04	11/05/06	16/05/03
Mayo – 2006 (II)	V2-05	25/05/06	30/05/06
Junio - 2006	V2-06	15/06/06	20/06/06
Julio - 2006	V2-07	06/07/06	11/07/06
Julio - 2006 (II)	V2-08	20/07/06	25/07/06
Septiembre - 2006	V2-09	21/09/06	26/09/06
Octubre - 2006	V2-10	19/10/06	24/10/06
Noviembre - 2006	V2-11	09/11/06	14/11/06
Noviembre – 2006 (II)	V2-12	23/11/06	28/11/06

E.4 EDAR DE RINCÓN DE LEÓN (ALICANTE)

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Mayo - 2002	R0-01	17/05/02	21/05/02
Julio - 2002	R0-02	25/07/02	30/07/02
Enero - 2003	R0-03	23/01/03	28/01/03
Mayo - 2003	R0-04	15/05/03	20/05/03
Mayo -2003 (II)	R0-05	22/05/03	27/05/03
Julio – 2003	R0-06	17/07/03	22/07/03
Enero - 2004	R0-07	08/01/04	12/01/04
Febrero - 2004	R0-08	12/02/04	17/02/04

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Enero - 2005	R1-01	28/01/05	01/02/05
Febrero - 2005	R1-02	17/02/05	22/02/05
Marzo - 2005	R1-03	03/03/05	08/03/05
Abril - 2005	R1-04	14/04/05	19/04/05
Mayo - 2005	R1-05	12/05/05	17/05/02
Junio - 2005	R1-06	16/06/05	22/06/05
Julio - 2005	R1-07	07/07/05	12/07/05
Julio - 2005 (II)	R1-08	21/07/05	26/07/05
Septiembre - 2005	R1-09	22/09/05	27/09/05
Octubre - 2005	R1-10	20/10/05	25/10/05
Noviembre - 2005	R1-11	17/11/05	22/11/05
Diciembre - 2005	R1-12	15/12/05	20/12/05
Enero - 2006	R2-01	12/01/06	17/01/06
Febrero - 2006	R2-02	09/02/06	14/02/06
Marzo - 2006	R2-03	23/03/06	28/03/06
Mayo - 2006	R2-04	11/05/06	16/05/06
Mayo – 2006 (II)	R2-05	25/05/06	30/05/06
Junio - 2006	R2-06	15/06/06	20/06/06
Julio - 2006	R2-07	06/07/06	11/07/06
Julio - 2006 (II)	R2-08	20/07/06	25/07/06
Septiembre - 2006	R2-09	21/09/06	26/09/06
Octubre - 2006	R2-10	19/10/06	24/10/06
Noviembre - 2006	R2-11	09/11/13	14/11/06
Noviembre – 2006 (II)	R2-12	23/11/06	28/11/06

E.5 EDAR DE QUART-BENAGER

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Abril -2008	Q1-01	02/04/08	07/04/08
Mayo – 2008	Q1-02	22/05/08	27/05/08
Junio - 2008	Q1-03	19/06/08	24/06/08

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Julio - 2008	Q1-04	10/07/08	15/07/08
Septiembre -2008	Q1-05	25/09/08	30/09/08
Octubre - 2008	Q1-06	16/10/08	21/10/08
Noviembre -2008	Q1-07	13/11/08	18/11/08
Diciembre - 2008	Q1-08	11/12/08	16/12/08
Enero - 2009	Q2-01	08/01/09	13/01/09
Febrero - 2009	Q2-02	05/02/09	10/02/09
Marzo - 2009	Q2-03	05/03/09	11/03/09
Abril - 2009	Q2-04	02/04/09	07/04/09
Mayo – 2009	Q2-05	22/05/09	26/05/09
Junio - 2009	Q2-06	11/06/09	16/06/09
Julio - 2009	Q2-07	02/07/09	07/07/09
Septiembre - 2009	Q2-08	03/09/09	08/09/09
Septiembre - 2009 (II)	Q2-09	17/09/09	22/09/09
Octubre - 2009	Q2-10	15/10/09	20/10/09
Noviembre - 2009	Q2-11	11/11/09	16/11/09
Diciembre - 2009	Q2-12	10/12/09	15/12/09
Enero - 2010	Q3-01	15/01/10	20/01/10
Febrero - 2010	Q3-02	11/02/10	16/02/10
Marzo - 2010	Q3-03	04/03/10	09/03/10
Abril - 2010	Q3-04	15/04/10	20/04/10
Mayo – 2010	Q3-05	13/05/10	18/05/10
Junio - 2010	Q3-06	10/06/10	15/06/10
Julio - 2010	Q3-07	08/07/10	13/07/10
Septiembre - 2010	Q3-08	03/09/10	07/09/10
Septiembre - 2010 (II)	Q3-09	16/09/10	21/09/10
Octubre - 2010	Q3-10	14/10/10	19/10/10
Noviembre - 2010	Q3-11	11/11/10	16/11/10
Diciembre - 2010	Q3-12	16/12/10	21/12/10
Enero - 2011	Q4-01	13/01/11	18/01/11
Febrero - 2011	Q4-02	17/02/11	22/02/11
Marzo - 2011	Q4-03	25/03/11	29/03/11

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Septiembre - 2004	CT1-01	09/09/04	14/09/04
Septiembre – 2004 (II)	CT1-02	23/09/04	28/09/04
Octubre - 2004	CT1-03	07/10/04	13/10/04
Octubre – 2004 (II)	CT1-04	21/10/04	26/10/04
Noviembre -2004	CT1-05	04/11/04	09/11/04
Noviembre -2004 (II)	CT1-06	18/11/04	23/11/04
Octubre – 2006	CT2-01	05/10/06	10/10/06
Octubre - 2006 (II)	CT2-02	13/10/06	18/10/06
Octubre – 2006 (III)	CT2-03	19/10/06	24/10/06
Octubre – 2006 (IV)	CT2-04	26/10/06	31/10/06
Noviembre – 2006	CT2-05	08/11/06	13/11/06
Noviembre – 2006 (II)	CT2-06	23/11/06	28/11/06

E.6 EDAR DE CAMP DE TURIA II (RIBARROJA)

D.7 EDAR DE GANDÍA- LA SAFOR

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Diciembre - 2004	G1-01	16/12/04	22/012/04
Enero - 2005	G1-02	14/01/05	18/01/05
Enero – 2005 (II)	G1-03	27/01/05	01/02/05
Febrero - 2005	G1-04	10/02/05	15/02/05
Febrero -2005 (II)	G1-05	17/02/05	22/02/05
Febrero – 2005 (III)	G1-06	24/02/05	01/03/05
Marzo - 2005	G1-07	03/03/05	08/03/05
Mayo - 2007	G2-01	24/05/07	29/05/07
Mayo – 2007 (II)	G2-02	31/05/07	05/06/07
Junio – 2007	G2-03	07/06/07	12/06/07
Junio – 2007 (II)	G2-04	14/06/07	19/06/07
Junio – 2007 (III)	G2-05	21/06/07	26/06/07
Junio – 2007 (IV)	G2-06	28/06/07	03/07/07

E.8 EDAR DE VILLENA

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL	
Octubre - 2010	V10-01	21/10/10	27/10/10	

E.9 EDAR DE ALGORÓS (ELCHE)

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Marzo - 2011	AL0-01	16/03/11	22/03/11

E.10 EDAR DE GRAO DE CASTELLÓN

CAMPAÑA	NOMBRE	FECHA INICIO	FECHA FINAL
Julio - 2005	CS0-01	14/07/05	19/07/05
Septiembre - 2005	CS0-02	29/09/05	04/10/05

MATERIAL COMPLEMENTARIO F

Trabajos previos y experiencias preliminares en laboratorio

Un científico debe tomarse la libertad de plantear cualquier cuestión, de dudar de cualquier afirmación, de corregir errores

> Julius Robert Oppenheimer (1904-1967)

En la siguiente sección, se presenta una descripción detallada de las experiencias preliminares realizadas con los dosímetros pasivos y un resumen de los datos brutos obtenidos para todos los experimentos en laboratorio, con los dosímetros pasivos y el monitor en continuo (método de referencia). Se describen solamente las experiencias relativas al sulfuro de hidrógeno.

La validación del método del amoniaco está actualmente en proceso de publicación.

F.1 DESCRIPCIÓN DE LAS EXPERIENCIAS PRELIMINARES

Esta serie de experimentos sirvieron para desarrollar una cierta sensibilidad sobre la importancia de determinadas variables, así como para el posterior planteamiento de una experiencia seleccionando las variables independientes de mayor influencia en la metodología pasiva.

F1.1 COMPARACIÓN DE MEDIOS DE COLECCIÓN: MALLAS DE ACERO INOXIDABLE Y FILTROS DE ACETATO DE CELULOSA

Para los dosímetros con este tipo de geometría (tipo tubo) han venido utilizándose mayoritariamente mallas de acero inoxidable como medio de impregnación (Heal *et al.*, 1999; Glasius *et al.*, 1997).

Objetivo

Se pretendió la comparación de los dos medios de impregnación utilizados: mallas de acero inoxidable y filtros de acetato de celulosa.

Procedimiento experimental

Se prepararon dos series de dosímetros. La primera con mallas de acero inoxidable, y la segunda con filtros de acetato de celulosa.

Procedimiento de impregnación

Se colocaron mallas de acero inoxidable (12 mm de diámetro) en el interior del tapón de polietileno y se impregnaron con 50 μ l de disolución acuosa con un 1% de AgNO₃ conteniendo 20% de etanol absoluto y un 10% de glicerina.

Los filtros de acetato de celulosa (12 mm de diámetro) se colocaron también en el interior de una tapón de polietileno después de haber estado 2 horas sumergidas en una disolución 0.01 M de ácido nítrico conteniendo un 2% de AgNO₃, 20% de etanol absoluto y un 2% de glicerina.

Durante la experiencia ambas series fueron expuestas durante cuatro días a una concentración de 20 ppb de sulfuro de hidrógeno, generados en la cúpula de teflón.

Este período fue considerado suficiente para la correcta estabilización y colección del contaminante en el medio de captación.

Fue escogida una atmósfera de 20 ppb de sulfuro de hidrógeno por considerarla como representativa de los rangos medios de concentración del contaminante en la atmósfera dónde se pretende medir. De esta manera, se pudo asegurar una cantidad de masa aceptable para poder evaluar correctamente su captación en el medio colector.

Cada una de las series estuvo formada por seis dosímetros y tres blancos, dos de los cuales se expusieron a la concentración de sulfuro de hidrógeno del interior de la cúpula. El análisis de los dosímetros se realizó el día siguiente a la recogida de los mismos.

Resultados

En la Tabla F.1 se muestran los resultados de la experiencia para ambas series de dosímetros. En la tercera y quinta columna de la tabla se resumen las concentraciones obtenidas como promedio de los dosímetros (c_d) y con el método de referencia (c_r) acompañadas por el error estándar (σ) asociado a estas.

El coeficiente de variación (CV_d) o desviación estándar relativa, pretende evaluar la magnitud de la dispersión de cada una de las series. En la última columna se observa el error relativo (E_r) existente entre la medida de referencia y los dosímetros pasivos. Se realizó un test de anómalos a los datos, rechazándose, tras la aplicación del ensayo de Dixon, un valor de la serie de dosímetros con filtro.

colección	 					

Tabla F.1 Resultados de la experiencia: Comparación de medios de

Serie	Ν	c _d ± σ (ррb)	CV (%)	c _r ± σ (ррb)	Er (%)
Malla	6	20,8 ± 1,1	13	20,6 ± 0,6	1
Filtro	5	17,9 ± 0,6	4	20,6 ± 0,6	13

Según los resultados obtenidos, los dosímetros que utilizan mallas de acero inoxidable como medio de impregnación poseen un menor error relativo (1%) que los que utilizan un filtro de acetato de celulosa (13%).

Sin embargo, el coeficiente de variación de la serie de dosímetros con filtro es menor que el obtenido para los dosímetros con mallas, presentando los dosímetros con malla una mayor dispersión de las medidas.

Análisis de comparación de medias (análisis-t)

Con la finalidad de comprobar si existen diferencias estadísticamente significativas entre las medias de las dos series de dosímetros, se realizó un análisis de comparación de medias. En la Tabla F.2 se muestran los resultados del análisis realizado con el SPSS.

Prueb para va	a de Levene igualdad de arianzas	Prueba t para igualdad de medias (para series heterogéneas)					
F	p-valor (sig.)	to	Grados de libertad	p-valor (sig. Bilateral)	t _c		
6,062	0,036	2,523	6	0,047	2,447		

 Tabla F.2
 Resumen de la prueba de homogeneidad de Levene y del análisis t para las series de la experiencia

Los resultados del análisis indican, que la t obtenida (t_0) es ligeramente mayor que la t crítica (t_c) , para un intervalo de confianza del 95%, siendo el p-valor de 0,047. Con estos resultados se puede decir, que las dos series de dosímetros poseen diferencias estadísticamente significativas, existiendo una influencia del medio de colección sobre las medidas tomada por el dosímetro.

De los resultados obtenidos tanto de los estadísticos, como del análisis de comparación de medias, se observa que existen diferencias significativas entre las medias tomadas por los dos medios de impregnación, presentando la serie de dosímetros con mallas un menor error relativo respecto del método de referencia.

De estos datos se desprende, que la medida con mallas, aunque presenta un mayor coeficiente de variación, proporciona un menor error relativo respecto a la concentración registrada por el monitor y por tanto una mayor eficiencia en la colección del contaminante.

F.1.2 EVALUACIÓN DE LOS DOSÍMETROS A DISTINTOS TIEMPOS Y CONCENTRACIONES

Dos de las principales variables que pueden influir en el buen funcionamiento de los dosímetros pasivos, son el tiempo de muestreo y la concentración a la que se encuentra expuesta el captador.

Objetivo

Se pretendió comprobar la influencia de las variables tiempo y concentración de exposición, así como la interacción existente entre ellas, en la masa recogida, y por tanto en la concentración final registrada por el dosímetro. Por otra parte se realizó, el cálculo de la incertidumbre del método.

Procedimiento experimental

El procedimiento experimental fue el mismo que el descrito para el apartado anterior.

En este caso solo se realizaron dos ensayos. Uno para las concentraciones de 10, y otro para las de 500 ppb.

Resultados

Experiencia con 10 ppb

En la Tabla F.3 se muestra los resultados obtenidos. Antes de realizar los cálculos de los parámetros, se realizó un test de anómalos a los datos, rechazándose, tras la aplicación del ensayo de Dixon, un valor de la serie de datos de dos días.

Tabla F.3	Resultados de la experiencia con 10 ppb)
	Resultados de la experiencia con 10 ppb	,

Serie	N	c _d ± σ (ррb)	CV₄ (%)	cr ± σ (ppb)	Er (%)
2 días	5	7,4 ± 0,6	2	10,2 ± 0,6	27
8 días	6	10,4 ± 0,6	7	11,1 ± 0,6	6

Como puede observarse en la tabla, los valores registrados por la serie de dos días presentan un error relativo, respecto del método de referencia, mucho más elevado que el de la serie de ocho días.

Esto puede indicar una fuerte dependencia del tiempo de exposición en la medida realizada por los dosímetros.

El coeficiente de variación de la serie de dos días es inferior que para la serie de ocho.

Los errores estándar que presentan los dosímetros poseen el mismo orden de magnitud que los registrados por el método de referencia.

Análisis de comparación de medias (análisis-t)

En la Tabla F.4 aparecen los resultados obtenidos con el SPSS para la prueba de homogeneidad de varianzas de Levene y para el análisis t de las series.

Tabla F.4 Resumen la prueba de homogeneidad de Levene y del análisis t para las series de 2 y 8 días

Pruel Leven iguald varia	oa de e para lad de Inzas	Prueba t para igualdad de medias (para series heterogéneas)					
F	p-valor (sig.)	t _o	Grados de libertad	p-valor (sig. Bilateral)	t _c		
10,087	0,011	1,178	5	0,000	2,571		

El análisis t para series heterogéneas, muestra que existen diferencias estadísticamente significativas entre las medias registradas por las series de datos de 2 y 8 días de exposición (p-valor < 0,05).

El análisis de resultados para las series de ocho y dos días de exposición a una concentración de 10 ppb, indica que existe diferencia entre las concentraciones registradas por ambas series, debidas al tiempo de exposición. Un tiempo de exposición de dos días hace que los dosímetros registren concentraciones con un notable error relativo (27%) respecto al método de referencia, mientras que un periodo de ocho días este error disminuye considerablemente.

Experiencia con 500 ppb

Los resultados obtenidos en esta experiencia están resumidos en la Tabla F.5.

Serie	N	c _d ± σ (ppb)	CV (%)	c _r ± σ (ppb)	Er (%)
2 días	6	314 ± 31	24	434 ± 4	28
8 días	6	402 ± 18	11	482 ± 5	17

Tabla F.5 Resultados de la experiencia con 500 ppb

Los resultados registrados en esta experiencia, presentan unos errores relativos (E_r) y unos coeficientes de variación (CV_d) mayores que los registrados en la anterior experiencia.

Al igual que en el anterior caso, el error relativo obtenido con la serie de dos días es mayor que el obtenido con la serie de ocho días. El coeficiente de variación más elevado, en este caso, lo presenta la serie de 2 días. Las concentraciones obtenidas por los dosímetros pasivos, presentan valores significativamente menores que los registrados por el monitor en continuo.

Análisis de comparación de medias (análisis-t)

Al igual que en el anterior ensayo, se realizó un análisis de comparación de medias para comprobar la existencia de diferencias significativas entre las dos series, debidas a la influencia del tiempo de exposición. En la Tabla F.6 se resumen los resultados obtenidos.

Prue Leven igualo varia	ba de e para lad de inzas	Prueba t para igualdad de medias (para series heterogéneas)					
F	p-valor (sig.)	t _o	Grados de libertad	p-valor (sig. Bilateral)	t _c		
5,051	0,048	2,453	8	0,04	2,306		

Tabla F.6 Resumen la prueba de homogeneidad de Levene y del análisis t para las series de 2 y 8 días

El análisis t para series heterogéneas muestra que existen diferencias estadísticamente significativas (p-valor < 0,05)

entre las medias registradas por las series de datos de 2 y 8 días de exposición.

En la Figura F.1 se representan las barras de concentración media y dispersión para cada una de las series de la experiencia. La línea discontinua representa el valor de la concentración media registrada por el método de referencia. N indica el número de muestras de cada serie.



Figura F.1 Barras de concentración media y dispersión para cada una de las series de las experiencias de 10 y 500 ppb (Fuente: Informe final, convenio I, Estudio del problema de la dispersión de olores en el entorno de una planta de depuración de aguas residuales (CV020157), Capítulo 2)

Se puede afirmar, a partir de los resultados obtenidos con los experimentos, que el tiempo de exposición es una variable significativa desde el punto de vista de las concentraciones registradas por la metodología de medida.

Periodos de medida de dos días presentan errores relativos elevados, mientras que tiempos de ocho días de exposición hacen disminuir estos errores.

Para concentraciones de 500 ppb, la concentración promedio registrada por los dosímetros subestima de manera importante la cantidad de H_2S . Esto también se produce para concentraciones de 10 ppb, aunque en menor proporción.

La subestimación de la concentración, y la incertidumbre ligada al tiempo de exposición llevó a plantear distintos experimentos adicionales con el objetivo de comprobar la influencia determinadas variables.

F.1.3 INFLUENCIA DEL TIEMPO DE TOMA DE MUESTRA

Los resultados obtenidos en los ensayos del anterior experimento, muestran que los valores obtenidos por los dosímetros presentan una fuerte dependencia del tiempo de exposición.

Con objeto de estudiar el comportamiento de los dosímetros ante esta variable, se desarrolló una experiencia en la cual se sometieron varias series de dosímetros a una atmósfera conocida de sulfuro de hidrógeno, durante distintos periodos de tiempo.

Objetivo

El objetivo de esta experiencia fue conocer la relación existente entre la concentración registrada por los dosímetros, para distintos tiempos de exposición frente a la concentración registrada por un método de referencia.

Esta relación nos indica el periodo mínimo de muestreo necesario para que los dosímetros registren valores de sulfuro de hidrógeno con un bajo error relativo, respecto de la concentración de referencia.

Procedimiento experimental

Para la realización de esta experiencia, se fijó una concentración de sulfuro de hidrógeno en la cúpula, a la cual se expusieron varias series de dosímetros, durante distintos periodos de muestreo.

La concentración de H_2S escogida para realizar esta experiencia fue de 10 ppb, considerada como una concentración representativa de los rangos medios en el ambiente dónde se pretende aplicar esta metodología.

Los tiempos de exposición escogidos para las distintas series de dosímetros en la cúpula fueron de 2, 4, 8 y 16 días.

Estos tiempos pretendían abarcar tanto tiempos cortos (2 días) como tiempos largos (16 días) de exposición, valorando también periodos intermedios. De esta manera se aseguraba una serie de medidas que cubrieran el rango espacial de 2-16 días.

En la Tabla F.7 se realiza un resumen del planteamiento experimental de la experiencia:

	Tiempo de exposición (días)	Concentración (ppb)	Número de dosímetros	Número de blancos
Serie 2 días	2	10	6	3
Serie 4 días	4	10	6	3
Serie 8 días	8	10	6	3
Serie 16 días	16	10	6	3

Tabla F.7 Resumen del p	olanteamiento	experimental	de la	experiencia
-------------------------	---------------	--------------	-------	-------------

Cada serie estuvo compuesta por 6 dosímetros y tres blancos, dos de los cuales se expusieron sin abrir a la concentración generada en la cúpula.

En el siguiente esquema (Figura F.2) puede verse el planteamiento temporal del experimento en el cual las series de 8 y 16 días se introdujeron en la cúpula el día de inicio del experimento, mientras que las series de 2 y 4 días se introdujeron el sexto y decimosegundo día respectivamente.

Los análisis de los dosímetros se realizaron en dos tandas: el octavo día de experiencia se extrajeron las series de 2 y 8 días, y el decimosexto día se extrajeron las dos restantes. El análisis de los dosímetros fue realizado el día siguiente de su recogida.



Figura F.2 Esquema del planteamiento temporal realizado ver la influencia temporal de la toma de muestra (Fuente: Informe final, convenio I, Estudio del problema de la dispersión de olores en el entorno de una planta de depuración de aguas residuales (CV020157), Capítulo 2)

Resultados

En la Tabla F.8 se disponen los resultados obtenidos en esta experiencia para las series de 2, 4, 8 y 16 días de exposición.

El test de anómalos realizado a los datos, mediante el ensayo de Dixon, detectó un dato anómalo para cada una de las series de 2 y 16 días, que fue rechazado.

Serie	N	c _d ± σ (ppb)	CV _d (%)	c _r ± σ (ppb)	E _r (%)
Serie 2 días	5	6,9 ± 0,6	8	9,7 ± 0,6	31
Serie 4 días	6	9,5 ± 0,6	11	10,2 ± 0,6	7
Serie 8 días	6	8,6±0,6	6	10,4 ± 0,6	17
Serie 16 días	5	9,6±0,6	9	10,1 ± 0,6	6

Tabla F.8 Resultados de la experiencia: Influencia del tiempo de exposición

De los resultados obtenidos en la experiencia, se observa que la serie con dos días de exposición presenta un elevado error relativo.

Las otras series registran errores relativos menores, aunque la serie de 8 días presenta un error relativo mayor que las de 4 y 16 días.

Los coeficientes de variación de las cuatro series son muy similares, presentando una mayor dispersión de los resultados la serie de cuatro días con un coeficiente de variación del 11%.

El error estándar registrado por los dosímetros, aunque es mayor que el registrado por el método de referencia, posee el mismo orden de magnitud.

Las concentraciones registradas por todas las series de dosímetros, poseen concentraciones ligeramente inferiores a las concentraciones registradas por el método de referencia, excepto la de 2 días dónde las diferencias son mayores.

En la siguiente gráfica (Figura F.3) se representan las barras de concentración media y dispersión para cada una de las cuatro series de la experiencia. La línea discontinua representa el valor de la concentración media registrada por el método de referencia. N indica el número de muestras de cada serie.



Figura F.4 Resultados de la influencia del tiempo de exposición en los dosímetros pasivos (*Fuente: Informe final, convenio I, Estudio del problema de la dispersión de olores en el entorno de una planta de depuración de aguas residuales (CV020157), Capítulo 2)*

Análisis de comparación de varianzas (ANOVA)

Con la finalidad de comprobar si existían diferencias significativas entre las medias registradas por las distintas series de tiempos de exposición, se decidió realizar adicionalmente un análisis de varianzas (Tabla F.9).

	ANÁLISIS DE ANOVA								
	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Media cuadrática	F	p- valor				
Inter- series	23,899	3	7,966	13,760	0,000				
Intra- series	10,421	18	0,579						
Total	34,320	21							

Tabla F.9 Resultados del análisis de varianza para la experiencia obtenidos con el SPSS

El análisis de varianza entre las cuatro series de datos, dio como resultado un p-valor menor de 0,05, indicando la existencia de una diferencia estadísticamente significativa entre las series temporales.

Un resultado positivo de la ANOVA indica que al menos una de las medias de las series es distinta a las demás.

Ante este resultado del análisis de varianzas, se realizó una prueba de análisis para factores no aleatorios (pruebas post hoc), para poder averiguar qué medias formaban grupos siendo iguales entre ellas y distintas a las demás.

En este caso presente se utilizó el ensayo de Tukey (Fowler J. et al., 1992), donde las diferencias significativas entre medias vienen dadas por el p-valor.

En la Tabla F.10 muestra los resultados del ensayo de Tukey obtenidos con el SPSS para las cuatro series temporales de exposición.

Los resultados obtenidos en el ensayo de Tukey, muestran que existen diferencias significativas entre la media de la serie de 2 días y las otras series, por tanto se puede afirmar que las medias de las series de 4, 8 y 16 días no presentan diferencias entre ellas, mientras que la media de la serie de 2 días es distinta a las demás.

Prueba post hoc: Ensayo de Tukey						
Serie A	Serie B	Diferencia de medias (A-B)	p –valor			
2 días	4 días	- 2,7433	0,000			
	8 días	- 1,9267	0,002			
	16 días	- 2,9400	0,000			
4 días	2 días	2,7433	0,000			
	8 días	0,8167	0,259			
	16 días	-0,1967	0,971			
8 días	2 días	1,9267	0,002			
	4 días	-0,8167	0,259			
	16 días	-1,0133	0,145			
16 días	2 días	2,9400	0,000			
	4 días	0,1967	0,971			
	8 días	1,0133	0,145			

Tabla F.10 Resultado del ensayo de Tukey para series con distinto tiempo de exposición

Los resultados obtenidos manifiestan que un tiempo de medida de los dosímetros pasivos de 2 días no es tiempo suficiente para obtener una buena medida de sulfuro de hidrógeno ($E_r = 33\%$), sin embargo a partir de 4 días el error relativo disminuye hasta límites aceptables. Por tanto, se puede afirmar que se requiere al menos, un periodo de medida de cuatro días con los dosímetros para obtener medidas de sulfuro de hidrógeno admisibles.

F.1.4 EVALUACIÓN DE LOS DOSÍMETROS PASIVOS A DISTINTAS CONCENTRACIONES Y CON DIFERENTES PROCESOS DE IMPREGNACIÓN

Una vez comprobada la respuesta de los dosímetros pasivos frente al tiempo, existe incertidumbre sobre su respuesta ante otras variables como son: el comportamiento de los captadores ante distintas concentraciones ambientes de sulfuro de hidrógeno y la influencia del tipo de impregnación de la malla con nitrato de plata sobre la recolección de la masa de sulfuro de hidrógeno en los dosímetros.

Con la finalidad de comprobar el efecto de estas dos variables, se fijó un tiempo de permanencia de los dosímetros en la cúpula, dentro del rango fijado en el anterior experimento, seleccionándose dos concentraciones de sulfuro de hidrógeno a las que fueron expuestos los dosímetros. Para cada una de las dos series de concentraciones se expusieron tres series de dosímetros pasivos impregnados de distinta manera.

Objetivo

Los objetivos que se pretendieron alcanzar con esta experiencia fueron la evaluación de la medida registrada por los dosímetros pasivos en distintos niveles de concentración en un periodo de cuatro días de exposición, y el establecimiento del mejor proceso de impregnación para las mallas.

Procedimiento experimental

Para el desarrollo experimental fue definido un tiempo de exposición de los dosímetros en la cúpula y dos concentraciones de sulfuro de hidrógeno a las que fueron expuestas varias series de dosímetros.

A cada una de las dos concentraciones definidas se expusieron tres series de dosímetros con distintos procesos de impregnación en sus filtros. El periodo de muestreo escogido para realizar la experiencia fue de 4 días.

concentraciones escogidas para estudiar el las comportamiento dosímetros de los ante distintas concentraciones de H₂S fueron, por una parte, 15 ppb como concentración representativa de los rangos medios de concentración que pueden encontrarse en los ambientes dónde se espera aplicar la metodología, y por otra parte, 500 ppb como una concentración elevada de sulfuro de hidrógeno que puede encontrarse presente en ambientes muy contaminados (Tabla F.11).

Las tres series de dosímetros, expuestas a ambas concentraciones, se diferenciaban entre ellas solo por el tipo de impregnación de las mallas contenidas en los dosímetros. Los tipos de impregnación fueron los siguientes: Impregnación A (Dosímetros A): Impregnados con la disolución convencional de AgNO₃ y tapados inmediatamente después de impregnar sin dejarlos secar en la cámara de aire cero.

Impregnación B (Dosímetros B): Impregnados con la disolución convencional de AgNO₃, dejándolos secar antes de taparlos en la cámara de aire cero.

Impregnación C (Dosímetros C): Impregnados con la disolución convencional de AgNO₃, sin glicerina y dejándolos secar antes de taparlos en la cámara de aire cero.

Tabla F.11 Resumen del planteamiento experimental para diferentes tipos de impregnación

	Tipo de impregnación	Tiempo de exposición (días)	Concentración (ppb)	Número de dosímetros	Número de blancos
Exp1	A, B, C	4	15	6	3
Exp2	А, В, С	4	500	6	3

Para cada una de las dos experiencias se prepararon tres series de dosímetros diferenciadas por el tipo de impregnación a las que fueron sometidas.

Cada serie constaba de seis dosímetros y tres blancos, dos de los cuales fueron expuestos a la concentración de sulfuro de hidrógeno del interior de la cúpula. Las tres series de dosímetros (A, B y C) se expusieron en la cúpula simultáneamente, analizándose conjuntamente el día siguiente de su extracción de la cúpula.

Resultados

Los resultados obtenidos en esta experiencia se muestran en la siguiente tabla.

Serie	N	c _d ± σ (ppb)	CV(%)	c _r ± σ (ppb)	E _r (%)
Dosímetros	6	14,0 ± 0,6	9	14,7 ± 0,6	5
A-15 ppb					
Dosímetros	6	13,7 ± 0,7	12	14,7 ± 0,6	7
B-15 ppb					
Dosímetros	6	13,8 ± 0,9	16	14,7 ± 0,6	6
C-15 ppb					
Dosímetros	6	523 ± 6	3	551 ± 6	5
A-500 ppb					
Dosímetros	6	513 ± 10	5	551 ± 6	7
B-500 ppb					
Dosímetros	6	489 ± 17	9	551 ± 6	11
C-500 ppb					

 Tabla F.12
 Resultados de la experiencia para diferentes tipos de concentraciones y modos de impregnación de los dosímetros pasivos

Como se observa de los resultados de la anterior tabla (Tabla F.12), representados en las siguientes gráficas (Figura F.4¹), en todos los casos el error relativo para las dos series de concentraciones y para los tres tipos de impregnación, están generalmente por debajo del 10%, aunque los dosímetros impregnados del modo A presentan menor error relativo que los demás.

Dentro de cada serie de concentraciones, los dosímetros A presentan un coeficiente de variación ligeramente menor al de los otros tipos de impregnación. El error estándar presentado por los dosímetros pasivos, aunque presenta valores mayores que los del método de referencia posee el mismo orden de magnitud. Las concentraciones registradas por los dosímetros son inferiores, en todos los casos, a las medidas con el método de referencia.

¹ Nota: d.p en este caso ha servido para abreviar dosímetros pasivos



Influencia del tipo de impregnación en los d.p.(15ppb)



Figura F.5 Errores relativos de los dosímetros pasivos respecto de cada tipo de impregnación (Fuente: Informe final, convenio I, Estudio del problema de la dispersión de olores en el entorno de una planta de depuración de aguas residuales (CV020157), Capítulo 2)

Análisis de comparación de varianzas (ANOVA)

Se realizaron dos análisis de varianzas (Tabla F.13), uno para las series sometidas a concentraciones de 15 ppb y otro para las que fueron sometidas a 500 ppb. Con el análisis de varianzas se pretende averiguar si existen diferencias estadísticamente significativas debidas al método utilizado para la impregnación de las mallas, entre las medias obtenidas para cada serie de concentraciones.

	Ensayo de	homogeneidad de varianzas							
		Ensayo de Levene							
	p-valor								
Serie	0,600	0.561							
15 ppb									
Serie	3,388	0.061							
500 ppb									

Tabla F.13Análisis de homogeneidad y análisis de varianza para las seriesde 15 y 500 ppb

ANOVA								
	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Media cuadrática	F	p- valor			
Inter- series	0,168	2	8,4					
Intra- series	47,143	15	10,2	0,027	0,974			
Total	47,311	17	3,143					
Inter- series	3577,501	2	1788,751					
Intra- series	12921,617	15	861,441	2,076	0,160			
Total	16499,118	17	1567,657					

Los resultados obtenidos de los análisis de varianzas, tanto para la serie de experimentos de 15 ppb, con un p-valor de 0,974, como para la de 500 ppb, con un p-valor de 0,160, indican que para ninguna de las dos series de concentraciones existe una diferencia significativa entre las medias obtenidas para los distintos tipos de impregnación.

Por tanto de los resultados obtenidos en el ANOVA, se puede asegurar que tanto para la serie de 15, como para la de 500 ppb, las concentraciones promedio registradas por los tres tipos de impregnación (A, B y C), no presentan diferencias estadísticamente significativas. La elección de un método de impregnación respecto a los otros, al no existir diferencias estadísticamente significativas entre ellos, se realizó basándose en razones prácticas.

El proceso de impregnación A ha sido seleccionado como el método más idóneo para la impregnación de las mallas, de entre los tres procesos evaluados. Esta elección se ha basado en razones prácticas de preparación de los dosímetros y en el valor ligeramente inferior del error relativo, presentado por este tipo de impregnación ante las otras dos.

Al igual que en anteriores experiencias, se produce una infravaloración de las concentraciones registradas por los dosímetros respecto del método de referencia. Esta infravaloración viene originada, en su mayor parte, por la baja solubilidad del sulfuro de plata en la disolución de cianuro sódico 0,1M utilizada para la extracción del compuesto de las mallas. A partir de esta experiencia, y tras realizar un estudio de solubilidades, se decidió aumentar la concentración de la disolución de cianuro de sodio a 0.2M, con la finalidad de poder disolver todo el sulfuro de plata formado en el filtro.

F.2 RESULTADOS BRUTOS DE LAS EXPERIENCIAS DE LOS DOSÍMETROS

En los siguientes puntos se resumen los datos (en bruto) obtenidos por los dosímetros pasivos y los estadísticos obtenidos con el monitor en continuo (método de referencia) registrados durante la realización de cada uno de los experimentos en laboratorio.

F.2.1 CÁLCULO DEL LÍMITE DE DETECCIÓN DEL MÉTODO (LDM)

En la siguiente tabla (Tabla F.14) se muestran los valores obtenidos en la experiencia de cálculo del LDM. En la primera columna se enumeran las muestras de cada una de las dos series de dosímetros: blancos de preparación y blancos de exposición.

La segunda columna muestra los valores de masa obtenidos para cada uno de los dosímetros (m_{H2S}).

La tercera columna indican la concentración promedio obtenida para cada serie de dosímetros $(\overline{m_{H_2S}})$ y su desviación estándar (σ).

La cuarta y quinta columna respectivamente muestran el coeficiente de variación (CV) de cada serie, así como el límite de detección del método (LDM) calculado como 3,29 veces la desviación estándar de cada serie.

Antes del análisis de los resultados, se les aplicó el test de anómalos de Dixon (Ramis Ramos G., 2001) a los datos, rechazándose los valores que se señalan en rojo. Estos valores no han sido tenidos en cuenta para el cálculo de los parámetros estadísticos.

Muestras	m _{H2S} (ng)	$\overline{m_{H_2S}}$ (ng) ± σ (ng)	CV (%)	LDM (ng)
	Blan	cos de preparación		
Blanco1	1,9			
Blanco2	1.,9			
Blanco3	2,2			
Blanco4	1,9			
Blanco5	2,0	$1,9 \pm 0,1$	6	0,4
Blanco6	1,8			
Blanco7	1,9			
Blanco8	5,1*			
Blanco9	1,8			
Blanco10	2,0			
	Blar	ncos de exposición		
Blanco1	4,5			
Blanco2	6,4			
Blanco3	4,2			
Blanco4	5,3			
Blanco5	5,9			
Blanco6	5,4	$5,3 \pm 0,7$	13	2,2

Tabla F.14 Resultados de la experiencia del LDM

Blanco7	6,2
Blanco8	51
Diancoo	5,1
Blanco9	5,1
Blanco10	5 2
Diancono	J,Z

* Dato rechazado tras la aplicación del ensayo de Dixon.

F.2.2 EXPERIENCIAS PRELIMINARES: COMPARACIÓN DE MEDIOS DE COLECCIÓN. MALLAS DE ACERO INOXIDABLE .vs. FILTROS DE ACETATO DE CELULOSA

Dosímetros pasivos

La siguiente tabla (Tabla F.15) muestra el valor bruto en unidades de masa (ng) para cada una de las muestras de las series de dosímetros con filtros de acetato de celulosa o mallas de acero inoxidable. También se muestran los valores brutos para los blancos de preparación (B-prep) y blancos de exposición (B-exp). En las últimas columnas se observa la concentración de cada uno de los dosímetros de cada serie (c_{di}), así como su concentración promedio (c_d) con el error estándar (σ) y coeficiente de variación (CV).

Para el cálculo de la concentración de sulfuro de hidrógeno, se ha utiliza la ley de difusión molecular (ley de Fick), cuya formulación es la siguiente (Ecuación F.1):

$$C(ppb) = \frac{M \cdot L}{D \cdot \pi \cdot r^2 \cdot t} \cdot \left(10^{-3} ng / \mu g\right) \cdot \left(10^6 cm^3 / m^3\right) \cdot \frac{1ppb}{1.4\mu g} \frac{T_{amb}(K)}{293K}$$

(Ecuación F.1)

En la que:

M = Masa recogida por el dosímetro (ng)

L = Longitud del dosímetro (7 cm)

D = Coeficiente de difusión molecular (9,6 cm²/ min)

r = Radio del dosímetro (0,5 cm)

T = Tiempo de exposición del dosímetro (min)

 T_{amb} = Temperatura en el ambiente de trabajo (K)

			Valores finales (ppb)					
Muestra	Valor bruto (ng)	T (min)	c _{di} (ng)	c _d (ng)	σ	CV (%)		
	Serie con mallas							
1	144,8	5575	17,2					
2	215,3	5575	24,5		1,1	13		
3	206,2	5575	23,4	20,8				
4	188,3	5575	21,2					
5	164,6	5575	18,4					
6	180,2	5575	20,3					
	Se	erie con	filtros					
1	148,5	5575	17,7					
2	165,1	5575	18,5			4		
3	166,0	5575	18,6	18,5	0,3			
4	152,6	5575	17,0					
5	156,4	5575	17,5					
6	193,4	5575	21,9*					
Blancos								
B1-prep	9,0							
B2-exp.	9,4							
B3-exp.	10,2							

Tabla F.15 Resultados de la experiencia de comparación de los medios de colección

* Dato rechazado tras la aplicación del ensayo de Dixon.

Monitor en continuo

La Tabla F.16 resume el valor promedio registrado por el monitor en continuo durante el desarrollo de la experiencia. Otros parámetros como la desviación estándar (σ) del registro de concentraciones y el valor máximo y mínimo

indican la variabilidad en la concentración existente en la cúpula durante el periodo de realización de la experiencia.

Series	$C_r \pm \sigma$	Valor Máximo	Valor mínimo	
	(ppb)	(ppb)	(ppb)	
Filtros/mallas	20,6 ± 0,6	23,4	12,4	

F.2.3 EVALUACIÓN DE LOS DOSÍMETROS A DISTINTOS TIEMPOS Y CONCENTRACIONES

Dosímetros pasivos

Los resultados brutos obtenidos por los dosímetros en esta experiencia se resumen en las siguientes tablas (Tabla F.17 y Tabla F.18)

Tabla F.17 Resultados de la experiencia de 10 ppb

Muestra	Valor	T (min)	Valores finales (ppb)						
	bruto (ng)		C _{di}	C _d	σ	CV (%)			
Serie de 2 días									
1	31,3	2.860	4,8*						
2	42,1	2.860	7,3						
3	42,4	2.860	7,4	7,4	0,2	1			
4	42,4	2.860	7,4						
5	43,4	2.860	7,6						
6	42,5	2.860	7,4	7,4	0,1	2			
B1-prep	5,5								
B2-exp	11,6								
B3-exp	9,6								
Serie de 8 días									
1	202,1	11315	11,0						
2	181,6	11.315	9,8						
---------	-------	--------	------	------	-----	---			
3	202,6	11.315	11,1	10,4	0,3	2			
4	172,7	11.315	9,3						
5	194,6	11.315	10,6						
6	195,4	11.315	10,6						
B1-prep	6								
B2-exp	15,4								
B3-exp	11,9								

* Dato rechazado tras la aplicación del ensayo de Dixon.

Muestra	Valor	т	Vá	Valores finales (ppb)				
	bruto (ng)	(min)	C _{di}	C _d	σ	CV (%)		
		Serie	de 2 d	ías				
1	1644	2.842	382					
2	1065	2.842	247					
3	1074	2.842	249	314	31	24		
4	1462	2.842	340					
5	1082	2.842	251					
6	1801	2.842	419					
B1-prep	5,2							
B2-exp	5,1							
B3-exp	8,7							
		Serie	de 8 d	lías		1		
1	7769	11.234	458					
2	6655	11.234	392					
3	7242	11.234	427	402	18	11		
4	6387	11.234	376					
5	5694	11.234	335					
6	7260	11.234	428					

Tabla F.18 Resultados de la experiencia de 500 ppb

B1-prep	3,7
B2-exp	19
B3-exp	15,9

Monitor en continuo

La concentración promedio, desviación estándar y el rango de concentraciones registradas por el monitor durante el desarrollo de las experiencias se resume en la Tabla F.19 y en la Tabla F.20 para los ensayos de 10 y 500 ppb.

Tabla F.19 Datos del monitor en continuo para la serie de 10 ppb

Series	es cr±σ Valor Máximo (ppb) (ppb)		Valor mínimo
	(660)	(թիթ)	(000)
2 días	10,2 ± 0,9	12,4	1,1
8 días	11,1 ± 1,8	15,4	1,1

Tabla F.20 Datos del monitor en continuo para la serie de 500 ppb

Series	cr±σ Valor Máximo		Valor mínimo
	(ppb)	(ppb)	(ppb)
2 días	434 ± 22	456	366
8 días	482 ± 59	529	334

Los datos obtenidos por el monitor en continuo poseen un rango lineal de lectura directa hasta 50 ppb de H_2S , debiendo ser corregidos por una curva obtenida a partir de la calibración del monitor, con una botella de H_2S de concentración conocida, para valores de 50 a 1000 ppb. Los datos obtenidos para la serie de 500 ppb del registro de datos del monitor en continuo fueron corregidos según la siguiente ecuación:

$$x = \frac{y+13}{1,36}$$
 (Ecuación F.2)

Dónde:

x = valor de la concentración corregida (ppb).

y = valor de la concentración registrada por el monitor (ppb).

F.2.4 INFLUENCIA DEL TIEMPO DE TOMA DE MUESTRA

Dosímetros pasivos

La Tabla F.21 muestra los valores obtenidos para cada uno de los dosímetros de las cuatro series y la Tabla F.22 muestra los valores obtenidos por el analizador en continuo.

Tabla F.21 Resultados de las series temporales para la experiencia de la influencia del tiempo de toma de muestra

Muestra	Valor bruto	т	Valores finales (ppb)			(ppb)		
	(ng)	(min)	C _{di}	C _d	σ	CV (%)		
	Serie 2 días							
1	35,3	2.880	6,5					
2	49,1	2.880	9,6*					
3	35,6	2.880	6,5	6,9	0,2	31		
4	35,9	2.880	6,6					
5	38,6	2.880	7,2					
6	40,1	2.880	7,6					
B1-prep	4,2							
B2-exp	7,5							
B3-exp	9,9							
	Serie 4 días							
1	86,2	5.560	9,4					
2	80,7	5.560	8,8					

3	100,4	5.560	11,1	9,5	0,4	7
4	83,6	5.560	9,1			
5	93,1	5.560	10,3			
6	77,8	5.560	8,4			
B1-prep	3,3					
B2-exp	9,2					
B3-exp	9					
		Serie 8	días			
1	166,7	11.445	9,2			
2	153,5	11.445	8,5			
3	157,7	11.445	8,7	8,6	0,2	17
4	144,8	11.445	8			
5	163,4	11.445	9			
6	148,6	11.445	8,2			
B1-prep	3					
B2-exp	9					
В3-ехр	10,1					
		Serie 16	días			
1	371,8	22.970	10,4			
2	371	22.970	10,4			
3	310,4	22.970	8,7	9,6	0,4	6
4	330	22.970	9,2			
5	475,9	22.970	13,4*			
6	326	22.970	9,1			
B1-prep	5,3					
B2-exp	12,9					
B3-exp	13,4					

* Dato rechazado tras la aplicación del ensayo de Dixon.

Monitor en continuo

Series	ies c _r ±σ Valor Máximo		Valor mínimo
	(ppb)	(ppb)	(ppb)
2 días	9,1 ± 1,4	12,9	7,1
4 días	10,2 ±0,9	13,6	8,2
8 días	10,4 ±0,6	15	7,1
16 días	10 ± 1	15	7,1

Tabla F.22 Datos del monitor en continuo para las series temporales de la experiencia de la influencia del tiempo de muestra

F.2.5 EVALUACIÓN DE LOS DOSÍMETROS PASIVOS A DISTINTAS CONCENTRACIONES Y CON DIFERENTES PROCESOS DE IMPREGNACIÓN

Dosímetros pasivos

En las siguientes tablas (Tabla F.23 y Tabla F.24) se observan los valores brutos de los tres tipos de impregnación (A. B y C) para concentraciones de 15 y 500 ppb, así como las concentraciones individuales de cada dosímetro (c_{di}) calculadas a partir de la Ecuación F.1 y el valor promedio de cada serie (c_d).

Tabla F.23 Resultados para las series de 15 ppb con diferentes métodos de impregnación

Muestra	Valor bruto	т	Valores finales (ppb)					
	(ng)	(min)	C _{di}	C _d	σ	CV(%)		
Serie de dosímetros A								
1	122,5	5.575	13,9					
2	116,7	5.575	13,2					
3	104,7	5.575	11,8	14	0,5	9		
4	134,3	5.575	15,3					
5	132,6	5.575	15,1					
6	127	5.575	14,4					

B1-prep	4					
B2-exp	6,8					
B3-exp	6,2					
	Serie	e de dos	ímetro	os B		
1	136,6	5.575	15,7			
2	124	5.575	14,2			
3	110	5.575	12,5	13,7	0,7	12
4	99,3	5.575	11,2			
5	129,7	5.575	14,9			
6	121,2	5.575	13,8			
B1-prep	1,8					
B2-exp	7,4					
B3-exp	5,4					
	Serie	e de dos	ímetro	os C		
1	117,7	5.575	13,3			
2	103,6	5.575	11,6			
3	154	5.575	17,6	13,8	0,9	16
4	123,7	5.575	14			
5	103,5	5.575	11,6	-		
6	129,2	5.575	14,7			
B1-prep	4,4					
B2-exp	6,8					
B3-exp	6,3					

Tabla F.24 Resultados para las series de 500 ppb con diferentes métodos de impregnación

Muestra	Valor bruto	т	Valores finales (ppb)					
	(ng)	(min)	C _{di}	Cd	σ	CV (%)		
Serie de dosímetros A								
1	4605,5	5.575	540					
2	4527,1	5.575	538					

3	4319,6	5.575	513			
4	4310,8	5.575	512	523	6	3
5	4262,9	5.575	507			
6	4447	5.575	528			
B1-prep	4,6					
B2-exp	3					
В3-ехр	5,1					
	Seri	e de dos	ímetro	os B	1	
1	4208	5.575	493			
2	4242,8	5.575	504			
3	4216,8	5.575	501	513	10	5
4	4436,5	5.575	527			
5	4679,2	5.575	556	-		
6	4167,8	5.575	495			
B1-prep	5,3					
B2-exp	3,3					
В3-ехр	4					
	Seri	e de dos	ímetro	os C		1
1	4023,8	5.575	471			
2	4739,4	5.575	563			
3	3872,6	5.575	460	489	17	7
4	3815	5.575	453			
5	3989,2	5.575	474			
6	4350	5.575	516			
B1-prep	9,3	_				
B2-exp	7,3	_				
B3-exp	7,6					

Monitor en continuo

En la Tabla F.25 se resume los datos obtenidos por el monitor para esta experiencia tanto para la serie de 15 ppb como para la serie de 500 ppb. La serie de datos obtenidos con el monitor para la experiencia con 500 ppb fueron corregidos según la Ecuación F.2.

Tabla F.25 Datos del monitor en continuo para la series de 15 ppb y 500 ppb respectivamente

Series	c _r ±σ (ppb)	Valor Máximo (ppb)	Valor mínimo (ppb)
15 ppb	14,7 ± 0,7	16,3	10,7
500 ppb	551 ± 60	612	405

F.2.6 EVALUACION DE LA INCERTIDUMBRE: EXPERIMENTO FACTORIAL

Dosímetros pasivos

A continuación se muestran los datos brutos obtenidos para cada una de las series de los ensayos del experimento factorial, para rangos de concentraciones altos y bajos.

Rango bajo de concentraciones

En las siguientes tablas (Tabla F.26, Tabla F.28 y **Tabla F.28**) se resumen los resultados obtenidos con los dosímetros pasivos en los ensayos con 2, 6 y 10 ppb de sulfuro de hidrógeno.

Tabla F.26 Resultados de la experiencia de 2 ppb para las series de 2 y 8 días

Muestra	Valor bruto	т	Valores finales (ppb)		(ppb)		
	(ng)	(min)	C _{di}	C _d	σ	CV (%)	
Serie de 2 días							
1	5,4	2.738	0,5				
2	5,8	2.738	0,6				

3	4,8	2.738	0,4						
4	7,9	2.738	1,1	0,8	0,1	37			
5	6,8	2.738	0,9						
6	6,7	2.738	0,8						
B1-exp 3,3									
Serie de 8 días									
1	31,9	11.188	1,7						
2	26,7	11.188	1,4						
3	28	11.188	1,5	1,5	0,1	19			
4	35,3	11.188	1,9						
5	24,8	11.188	1,3						
6	21,6	11.188	1,1						
B1-exp	2,7								

Tabla F.27 Resultados de la experiencia de 6 ppb

Muestra	Valor bruto	т	Valores finales (ppb		(ppb)				
	(ng)	(min)	C _{di}	Cd	σ	CV (%)			
Serie de 5 días									
1	57,5	7.015	5,2						
2	59,6	7.015	5,4						
3	56	7.015	5,1						
4	64,3	7.015	5,9						
5	48,8	7.015	4,4						
6	61,5	7.015	5,6						
7	65,9	7.015	6						
8	68,6	7.015	6,3	5,7	0,1	11			
9	59,9	7.015	5,5						
10	72,2	7.015	6,6						
11	69,4	7.015	6,4						
12	67	7.015	6,1						
13	66	7.015	6						

14	61,9	7.015	5,6		
15	48,1	7.015	4,3		
16	65,3	7.015	6		
17	59,9	7.015	5,5		
18	65,5	7.015	6		
B1-exp	2,1				

Tabla F.28 Resultados de la experiencia de 10 ppb para las series de 2 y 8 días

Muestra	Valor bruto	т	Valores finales (pp		(ppb)	
	(ng)	(min)	C _{di}	C _d	σ	CV (%)
		Serie de	2 días	S		
1	38,1	2.877	7,6			
2	42,3	2.877	8,6			
3	37,2	2.877	7,4	7,8	0,3	10
4	34,2	2.877	6,7			
5	41,7	2.877	8,4			
6	39,7	2.877	8			
B1-exp	5,1					
		Serie de	8 día	s		1
1	189	11.190	10,9			
2	182,4	11.190	10,5			
3	198,3	11.190	11,4	11	0,2	4
4	194,8	11.190	11,2			
5	184,6	11.190	10,6			
6	203,2	11.190	11,7			
B1-exp	5,9					

Rango alto de concentraciones

Los resultados obtenidos con los dosímetros pasivos para las series de 50, 275 y 500 ppb están representados en la Tabla F.29, Tabla F.30 y Tabla F.31.

Muestra	Valor bruto	т	T Valores finales (ppb)				
	(ng)	(min)	C _{di}	C _d	σ	CV (%)	
Serie de 2 días							
1	183,3	2.855	41,7				
2	174,3	2.855	39,6				
3	168,5	2.855	38,3	37	1,1	7	
4	170,6	2.855	38,7				
5	152,5	2.855	34,6				
6	150,3	2.855	34				
B1-exp	2,6						
		Serie	de 8 días	5			
1	819,4	11.125	48,6				
2	781,2	11.125	46,3				
3	769,6	11.125	45,6	46,4	1,1	6	
4	796,8	11.125	47,2				
5	704,9	11.125	41,7				
6	832	11.125	49,3				
B1-exp	4,9						

Tabla F.29 Resultados de la experiencia de 50 ppb para las series de 2 y 8 días

Muestra	Valor bruto	т	Valores finales (ppb))
	(ng)	(min)	C _{di}	C _d	σ	CV (%)
		Serie	e de 5 días	5		
1	3516	6.685	348			
2	2763	6.685	274			
3	3136	6.685	311			
4	2849	6.685	282			
5	2910	6.685	288			
6	3080	6.685	305			
7	2969	6.685	294			
8	2674	6.685	265			
9	2923	6.685	289			
10	3025	6.685	300	291	5	8
11	2932	6.685	290			
12	3219	6.685	319			
13	2856	6.685	283			
14	3045	6.685	302			
15	2584	6.685	256			
16	2690	6.685	266			
17	2812	6.685	278			
18	610	6.685	<mark>60</mark> *			
B1-exp	5,3					

Tabla F.30	Resultados de	la experiencia	de	275	ppb
					F. F

* Dato rechazado tras la aplicación del ensayo de Dixon.

Muestra	Valor bruto	т	Valores finales (ppb)			b)
	(ng)	(min)	C _{di}	C _d	σ	CV (%)
		Serie d	de 2 días			
1	1528	2.610	388			
2	1932	2.610	490			
3	1983	2.610	503	454	30	15
4	2029	2.610	515			
5	1517	2.610	385			
6	1482	2.610	376			
B1-exp	2,9					
		Serie c	le 8 días			
1	6950	11.075	416			
2	7796	11.075	467			
3	7615	11.075	456	466	13	7
4	8142	11.075	487			
5	8461	11.075	506			
6	7713	11.075	462			
B1-exp	4					

Tabla F.31	Resultados de la experiencia de 500 ppb para las series de 2 y
8 días	

Monitor en continuo

Las siguientes tablas (Tabla F.32 y Tabla F.33) representan el promedio y variabilidad de los valores registrados por el monitor en continuo durante el desarrollo de las experiencias.

Los datos obtenidos por el monitor en continuo para las series de rango alto fueron corregidos con la Ecuación F.3:

 $x = \frac{y + 0.6}{1.08}$

(Ecuación F.3)

Dónde:

- x = valor de la concentración corregida (ppb)
- y = valor de la concentración registrada por el monitor (ppb)

Series	Cr ±σ	Valor Máximo	Valor mínimo
	(ppb)	(ppb)	(ppb)
2 ppb (2 días)	1,4 ± 0,9	3	0
2 ppb (8 días)	2 ± 0,9	3,7	0,1
6 ppb (5 días)	6,2 ± 0,6	7,8	4
10 ppb (2 días)	10,7 ± 1,1	12,8	7,9
10 ppb (8 días)	11,8 ± 1,6	14,6	5,7

Tabla F.32 Datos del monitor en continuo para la series con rangos bajos

Tabla F.33 Datos del monitor en continuo para la series con rangos altos

Series	Cr±σ	Valor Máximo	Valor mínimo
	(ppb)	(ppb)	(ppb)
50 ppb (2 días)	50,7 ± 2,1	53,3	45,2
50 ppb (8 días)	50,4 ± 3,7	59,1	39,2
275 ppb (5 días)	310 ± 6	316	286
500 ppb (2 días)	491 ± 4	588	565
500 ppb (8 días)	490 ± 13	615	607

F.3 CURVA DE SOLUBILIDAD DEL SULFURO DE HIDRÓGENO

En la siguiente gráfica (Figura F.6) se representa la curva de solubilidad resultante para el sulfuro de hidrógeno ante distintas concentraciones y volúmenes de cianuro, para la extracción de los dosímetros pasivos.



Figura F.7 Gráfica de solubilidad para el sulfuro de hidrógeno ante distintos volúmenes y concentraciones

MATERIAL COMPLEMENTARIO G

Modelización de emisiones difusas: Creación del modelo DIMEDAR¹

Se cometen muchos menos errores usando datos incorrectos que no empleando dato alguno

Charles Babbage (1792-1871)

La aplicación DIMEDAR resuelve el problema de la dispersión atmosférica en un emplazamiento con topografía compleja, procedente de emisiones puntuales/superficiales, a partir de información meteorológica muy simple (requiere, como mínimo, medidas de una torre meteorológica en superficie).

La aplicación realizada tiene una organización secuencial, en forma de menús de opciones seleccionables interactivamente por el usuario. Se incorporan tres módulos que constituyen el grueso de la funcionalidad del sistema. A lo largo de la realización de la presente tesis, este software ha estado actualizándose constantemente con objeto de mejorar el rendimiento del modelo y caracterizar mejor el problema que nos ocupa.

El programa corre bajo ventana de comandos (tanto para el sistema operativo DOS, como para Konsola de Linux, aunque este último no está del todo optimizado).

El modelo DIMEDAR no es un modelo pesado ni tiene un consumo excesivo de memoria (se precisan al menos 450 Kb de memoria RAM libre).

Los tiempos de ejecución varían drásticamente según las prestaciones del equipo. El módulo climático resulta prácticamente instantáneo (unos cuantos minutos de espera, según las horas modelizadas), ralentizándose ligeramente en el caso de solicitarse salidas de percentiles o de porcentajes de ocurrencia.

¹ El modelo de dispersión DIMEDAR es un desarrollo interno realizado por el CEAM bajo convenio con la EPSAR (Entidad Pública de Saneamiento de Aguas Residuales). La puesta a punto del modelo fue realizada por Enrique Mantilla (investigador en la Fundación CEAM). El autor se ha limitado a ir optimizando el código, añadirle mayores capacidades y realizando nuevos desarrollos que han ido complementando el desarrollo inicial del modelo.

El módulo mesoescalar consume considerablemente más tiempo: por un lado, la preparación de los campos de vientos es relativamente lenta (depende del criterio de convergencia que se seleccione), y debido a la frecuencia de los accesos a disco es más crítica la rapidez del controlador de dicho periférico que la del propio reloj de la CPU; por otro lado, el algoritmo de dispersión resulta algo más rápido, si bien depende también fuertemente del número de "puffs" en que se segmenta la emisión durante cada hora de simulación. Como tiempos orientativos se puede considerar que una simulación de 24 horas puede tardar entre 2 y tres horas gastando la mayor parte de los recursos de la CPU.

G.1 ORGANIZACIÓN FUNCIONAL

En las cinco figuras siguientes se muestra de manera esquemática los principales aspectos de organización de la aplicación, el control del flujo, las opciones de ejecución, la relación con los ficheros de entrada, etc.

Por su carácter sintético, la comprensión e interpretación completa de los mismos requerirá, en un principio, recurrir a apartados posteriores.

En la primera figura (Figura G.1) se presenta la relación entre los diferentes módulos que componen la aplicación y los ficheros principales de alimentación de datos que utiliza.

La siguiente figura (Figura G.2) presenta un esquema de la organización general de la aplicación, con los tres troncos principales. Se muestra el papel que juega el fichero principal de configuración "DIMEDAR_.CFG" en la coordinación del sistema.

Las tres siguientes figuras (Figura G.3, Figura G.4 y Figura G.5) están dedicadas a cada uno de los tres módulos principales del sistema. En ellas se muestran las opciones que se permiten al usuario a través de los respectivos submenús, el control y chequeo de errores y la línea de flujo normal de los distintos códigos.



Figura G.1 Módulos que componen la aplicación DIMEDAR y ficheros de alimentación que utiliza (Fuente: Manual de usuario de la aplicación DIMEDAR, Fundación CEAM)

Destaca la insistencia en que la aplicación disponga siempre de valores por defecto que guíen al usuario en la preparación de los datos de entrada, disminuyendo la posibilidad de errores de formato.

Se muestra igualmente cómo se ha optado por resolver el proceso de preparación de los datos de entrada a una simple edición de ficheros, descargando en el operador la responsabilidad de su confección.



Figura G.2 Esquema de organización general de la aplicación (Fuente: Manual de usuario de la aplicación DIMEDAR, Fundación CEAM)



Figura G.3 Esquema del módulo climático de la aplicación DIMEDAR (Fuente: Manual de usuario de la aplicación DIMEDAR, Fundación CEAM)



Figura G.4 Esquema del módulo mesoescalar de la aplicación DIMEDAR (Fuente: Manual de usuario de la aplicación DIMEDAR, Fundación CEAM)





Figura G.5 Esquema del módulo de graficación de la aplicación DIMEDAR (Fuente: Manual de usuario de la aplicación DIMEDAR, Fundación CEAM)

G.2 GUÍA DEL USUARIO²

G.2.1 MODULOS EJECUTABLES

La aplicación completa consta de una serie de ejecutables (seis en total), enlazados por un "shell" común que controla el intercambio de información con el usuario, prepara los ficheros de entrada para los distintos módulos, los ejecuta coordinadamente (de acuerdo a las especificaciones seleccionadas por el operador), controla (no muy exhaustivamente) si se produce algún error en el transcurso de las ejecuciones y, finalmente, prepara los resultados para su presentación en pantalla (para ver los códigos fuente de los respectivos módulos, ver Material Complementario).

A continuación (Tabla G.1) se describen brevemente cada uno de dichos ejecutables (todos ellos tienen extensión ".EXE" y se ejecutan bajo los sistemas operativos comentados anteriormente).

Nombre	Fuente	Tamaño (Kb)	Descripción
DIMEDAR	С	81.560	Constituye el "shell" del sistema. Contiene los diferentes menús de opciones. Articula la ejecución de los modelos, actualizando las distintas posibilidades de ejecución, preparando los ficheros de entrada y de salida de resultados, así como del control de la ejecución de los códigos.
DIMEDAR1	С	209.114	Controla las salidas gráficas, de acuerdo a las opciones seleccionadas por el usuario a través de los ficheros de la opción 3 del menú principal ("Salidas Gráficas").
DMDCLIMA	FORTRAN	57.418	Modelo climático. Incorpora todos los aspectos de la dispersión de acuerdo a las condiciones de ejecución seleccionadas. Genera un fichero de salida con los datos de las

Tabla G.1 Descripción de los ejecutables de los que consta el modelo DIMEDAR

² Fuente: Trabajos desarrollados internamente por el CEAM junto a la EPSAR. La fuente principal ha sido Enrique Mantilla y su equipo de investigación (en el que está incluido el autor de esta tesis)

			concentraciones en una matriz rectangular.
DMDVIEN1	FORTRAN	76.358	Modelo meteorológico mesoescalar. Incorpora el proceso de interpolación grosera de los datos iniciales a una matriz tridimensional. Genera varios ficheros de salida que enlazan automáticamente con el módulo DMDVIEN2, transparentemente al usuario.
DMDVI EN2	FORTRAN	94.690	Modelo meteorológico mesoescalar. Ajusta el campo de vientos interpolado por el módulo anterior, teniendo en cuenta la topografía y ajustándolo a un campo no divergente. Genera los ficheros de salida de vientos utilizados por el módulo de difusión mesoescalar.
DMDVEXTR	FORTRAN	40.240	Se encarga de extraer, a partir de las matrices tridimensionales de vientos obtenidas de DMDVIEN2, los valores a un nivel constante sobre el terreno, con el objetivo de proporcionar datos de vectores para las salidas gráficas. Se controla con las variables definidas en el menú 2.1.
DMDMESOP	FORTRAN	170.446	Constituye el modelo de difusión mesoescalar propiamente dicho. A partir de los campos de vientos tridimensionales finales generados por DMDVIEN2, controla la advección y difusión de los "puffs" a lo largo del dominio de trabajo.
DMDGRADS	FORTRAN	82.621	Genera un fichero compacto binario que sirve de entrada al programa gráfico GRADS, con los resultados de las ejecuciones (vientos + concentraciones).

G.2.2 FICHEROS UTILIZADOS POR LA APLICACIÓN

El sistema utiliza un sistema de ficheros como procedimiento de intercambio de información con el usuario y entre las

diferentes partes de la aplicación. Todos los parámetros de configuración, datos del emplazamiento, medidas meteorológicas, etc. se introducen a través de ficheros, nunca interactivamente. Es por lo tanto necesario que estos ficheros existan si se quiere proceder con la ejecución del código. En este sentido, si no existe alguno de los ficheros que el sistema precisa, se crean con valores por defecto, tal y como se detalla en el apartado siguiente.

Estos ficheros pueden tener nombres diferentes y encontrarse en cualquier lugar del ordenador. Únicamente la aplicación requiere la presencia en el directorio de trabajo de un fichero fijo, denominado obligatoriamente "DIMEDAR_.CFG", que también se genera por defecto en caso de no hallarse.

En el mismo se indica al sistema el directorio donde se habrán de buscar los diferentes ejecutables que conforman la aplicación; también se especifican los nombres de los ficheros de trabajo, tanto los de entrada de datos como los de salida de resultados.

Ese fichero se puede modificar una vez creado a través de la opción 4 del menú principal. Mediante este sistema se puede desligar el directorio de trabajo del de los ejecutables, mantener diversas versiones de los mismos, así como conservar en ficheros diferentes distintas configuraciones de datos de entrada y los correspondientes resultados. Estos ficheros variables de lectura y escritura (que se consignan en DIMEDAR_.CFG) pueden tener cualquier nombre válido para cualquier archivo nombrado por consola incluyendo la posibilidad de contener la ruta. Los nombres con palabras sueltas no son bien entendidos en ocasiones por el programa, por lo que se insta al posible usuario a que utilice el símbolo "_" (ejemplo dimedar_cfg). La única restricción estriba en la longitud del nombre, que no deberá superar en ningún caso los 80 caracteres.

Además de estos ficheros el sistema trabaja con otros archivos que se generan temporalmente durante proceso de ejecución, algunos de los cuales son borrados al finalizar la aplicación. Entre ellos se encuentran los ficheros con los campos de vientos, los ficheros con información horaria de concentraciones y "puffs" y los ficheros de errores.

Finalmente cada vez que se presenta un dibujo en pantalla, se crea un archivo que se conserva tras la finalización de la aplicación, el cual es susceptible de reproducirse posteriormente. En lo que sigue se detalla el formato de cada uno de los ficheros utilizados por la aplicación, describiéndose sucintamente las características de los valores de entrada/salida.

G.2.3 FICHEROS DE ENTRADA

En los tres módulos que componen la aplicación (climático, mesoescalar y gráfico) se han agrupado los datos de entrada en tres ficheros respectivamente, siguiendo el mismo esquema de combinación de magnitudes.

En el archivo de parámetros de ejecución se incluyen todas aquellas medidas o condiciones que afectan al modo en que se ejecuta el modelo correspondiente.

En el archivo de datos del emplazamiento se agrupan los valores que afectan a las características del emplazamiento, tanto información geográfica como relativa al foco o a los focos.

Finalmente, en el archivo de datos de entrada se incluyen los parámetros de mayor variabilidad, como son las medidas meteorológicas, los periodos de simulación, etc.

Se describe a continuación con cierto detalle el contenido y alcance de los datos codificados en cada uno de ellos. Se indica el tipo de cada magnitud, distinguiendo entre INT (número entero), REAL (número real) y CHAR (carácter), de acuerdo a la tipología de variables usada frecuentemente en lenguajes de programación, en este caso se utiliza el convenio del lenguaje FORTRAN³ (Tabla G.2).

 $^{{}^3}$ <c> : número de columna; <d> : número de dígitos tras el punto decimal (valores reales); <m> : número mínimo de dígitos mostrados; <n> : número de espacios; <r> : número de veces que se repite un determinado descriptor; <w> : número de caracteres a los que afecta un determinado descriptor

Тіро	Formato	Descriptor		
Enteros (I)	<r>'l'<w.m></w.m></r>	Indica que se van a leer o escribir <r></r>		
		enteros que ocupa <w> caracteres o</w>		
	and IFI and de	columnas		
Reales (F)	<r>`F`<w.d></w.d></r>	<w> el numero total de columnas empleadas en la representación del</w>		
		número v $<$ d $>$ el número de dígitos tras		
		el punto decimal. Por ejemplo `F7.3'		
		implica que el número tiene tres		
		decimales, más el punto decimal		
Reales (E)	<r>'E'<w.d></w.d></r>	El número que multiplica a la potencia de		
(notación		To toma valores entre 0, 1 y 1. Este caso		
científica)		reservar sitio para el exponente. De		
		hecho es necesario un carácter para el		
		punto decimal, otro para `E' (el indicador		
		de exponente, que implica la potencia de		
		diez por la que se multiplica el numero),		
		magnitud del exponente y el signo del		
		exponente		
Lógicos (L)	<r>'L'<w></w></r>	Estos datos solo pueden tomar los		
		valores `TRUE' y `FALSE' y la salida de		
		este descriptor será `T' (verdadero) o `F'		
	<r>'4'<w></w></r>	(Iaiso) En el primer lugar se indica que se		
Caracteres		repiten <r> veces formatos de caracteres</r>		
(A)		con una anchura igual al número de		
		caracteres de los que consta la variable.		
		En el segundo caso la salida tiene una		
	<n>'Y'</n>	Controla el desplazamiento horizontal e		
Х		indica que se escriban <n> espacios en</n>		
		la salida		
т	'T' <c></c>	Controla el desplazamiento horizontal e		
		indica que se salte directamente a la		
		COIUMNA <c></c>		
/	~/~ <c></c>	Envia la salida acumulada nasta el momento a `STDOLIT' y comienza un		
		nuevo registro con un retorno de carro.		
		Este descriptor no necesita ser separado		
		del resto mediante comas.		

Tabla G.2 Descriptores de formato	y su significado en	programación Fortran

Fichero de Configuración General de la Aplicación

Nombre por defecto: DIMEDAR_.CFG N° de registros: 13 Utilizado por: DIMEDAR

Tabla G.3 Fichero de configuración de la aplicación DIMEDAR

N°	tipo	rango	val. def ⁴	contenido
1	CHAR	< A80		Directorio donde residen los ejecutables que se lanzarán desde el "shell" de la aplicación
2	CHAR	< A80	.∖cfgclimdmd	Fichero con los datos de configuración del módulo climático
3	CHAR	< A80	.\cfgmesodmd	Ídem del módulo mesoescalar
4	CHAR	< A80	.\cfggrafdmd	Ídem del módulo gráfico
5	CHAR	< A80	.∖empclimdmd	Fichero con los datos relativos al emplazamiento del módulo climático
6	CHAR	< A80	.\empmesodmd	Ídem del módulo mesoescalar
7	CHAR	< A80	.\empgrafdmd	Ídem del módulo gráfico
8	CHAR	< A80	.∖datclimdmd	Fichero con los datos de ejecución del módulo climático
9	CHAR	< A80	.\datmesodmd	Ídem del módulo mesoescalar
10	CHAR	< A80	.\datgrafdmd	Ídem del módulo gráfico
11	CHAR	< 880	.\climconsal	Nombre del fichero en que se almacenarán los resultados de inmisión del modelo climático
12	CHAR	< A80	.∖mesoconsal	Ídem del modelo mesoescalar

⁴ Val def: valor por defecto

13	CHAR	< A80	.∖mesopufsal	Nombre del fichero en que se almacenarán las salidas sobre las características de los "puffs" activos en la ejecución del modelo
				mesoescalar

Fichero con los Parámetros de Ejecución del Módulo Climático

Nombre por defecto: *CFGCLIM_.DMD* N° de registros: 7 Utilizado por: *DMDCLIMA*

N°	τιρο	RANGO	UNID⁵	VAL. DEF	VARIABLE	CONTENIDO
1	INT	0/1		0	PRESS	Determina si las concentraciones se calculan en condiciones ambiente (0) ó en condiciones estándar (1)
2	INT	0/1		1	IUR	Se utilizan parámetros de dispersión para entorno urbano (0) ó rural (1) [1*]
3	INT	Sin límite		0	ISHORT	Este valor selecciona la ejecución del modelo, diaria (0) ó anual, y el tipo de salida de resultados: [2*] $1 \rightarrow$ valores medios de 1 a 100 \rightarrow percentil correspondiente < 0 \rightarrow % de excedencias de la concentración indicada
4	INT	0/1		1	IBID	Especifica si se considera

Tabla G.4 Fichero de parámetros para el módulo climático

⁵ Unid: unidades

					dispersión por flotación (1) ó bien no (0) [3*]
5	INT	0/1	 1	126	Un valor = 0 fuerza a utilizar un factor 2,4 en sobreelevación estable; mientras que si = 1 se usa 2,6 [4*]
6	INT	0/2	 1	IFR	Selecciona el tipo de sobreelevación según [5*] O: considera sobreelevación transicional siempre 1: sobreelevación NO transicional 2: sobreelevación transaccional solo en caso estable.
7	INT	0/1	 1	DIBUJA_SI NO	Permite realizar las simulaciones sin dibujar al final de las mismas (0) ó bien presentar automática-mente los resultados gráficos obtenidos (1)

- [1*] = En realidad lo que se seleccionan son diferentes esquemas de tratamiento de la estabilidad, y por ende, de aquellos parámetros relacionados con la misma.
- [2*] = Este indicador determina si la ejecución es de largo rango (anual) o de corto rango (24 horas). La elección entre una u otra afecta a la selección de diferentes esquemas de dispersión. En el caso de ejecución anual el programa normaliza la matriz de estabilidades, lo que no se hace en el caso de simulación a corto rango. En el caso de simulación de largo rango, se puede seleccionar como valores de salida de la matriz de inmisiones los promedios de concentración (parámetro igual a 1), los valores de concentración para un percentil dado (parámetro comprendido entre 1 y 100), o bien el porcentaje de superación de situaciones con concentración superior a una dada

(parámetro menor que 0, tomándose como concentración de referencia su valor absoluto).

- [3*] = En caso de seleccionar la opción de dispersión por flotación, introduce un factor en la estimación de la sigma vertical que es función del parámetro de flotabilidad, tal y como se considera en las fórmulas de Briggs de sobreelevación del penacho.
- [4*] = El código original permitía utilizar, tras una revisión técnica, dos posibles coeficientes en las ecuaciones de sobreelevación de Briggs para situaciones estables. Dicha opción se ha mantenido en la adaptación actual.
- [5*] = El modelo permite estimar una sobreelevación final, función de las condiciones ambientales y de las condiciones de emisión (=1), o bien suponer que la sobreelevación es un proceso continuo, función de la distancia del foco al receptor (sobreelevación transicional). En este último caso, da opción a que se utilice dicho esquema en todas las situaciones (=0) o bien sólo en condiciones estables (=2, ya que se supone que en condiciones inestables la sobreelevación final se alcanza ya desde los primeros estadios de emisión).

Fichero con los Datos del Emplazamiento para el Módulo Climático

Nombre por defecto: EMPCLIM_.DMD N° de registros: 13 Utilizado por: DMDCLIMA

N°	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	VAL. DEF	VARIABLE	CONTENIDO
1	INT	=1 (fijo)	s. u. ⁶	1	ISCR	Número de focos a considerar
2	REAL	>=0	g/seg	1200	QSOT	Tasa de emisión
3	REAL	>= 0	m	15	HST	Altura del foco (sobre el terreno)
4	REAL	sin límite	К	300	TS	Temperatura de los gases de salida
5	REAL	> 0	m/s	9	VS	Velocidad de los gases de salida
6	REAL	> 0	m	2	D	Diámetro del foco
7	REAL	> 0	m³/seg	8	VF	Flujo de salida de gases
8	REAL	sin límite	km	763,65	SHOT	Coordenada geográfica X del foco
9	REAL	sin límite	km	4301,62	SVET	Coordenada geográfica Y del foco
10	REAL	>= 0	m	0		Dimensión espacial del foco (si igual a 0 se considera puntual)
11	REAL	>= 0, <0	m	-1	ET	Modo de estimación de la sobreelevación: si es un valor positivo o cero utiliza dicho valor como sobreelevación final; si es negativo (cualquier valor) utiliza las fórmulas de Briggs para la estimación
12	CHAR	< A80		topog.dm d		Nombre del fichero de datos con la topografía (ver descripción)
13	INT	0/1		1	IALTURAS	Indica si se desea hacer uso de la topografía para la estimación del campo de inmisiones (1) o se considera terreno plano (0)

Tabla G.5 Fichero de datos del emplazamiento del módulo climático

⁶ s.u: sin unidades. Adimensional

Fichero con los Datos de Entrada para el Módulo Climático

Nombre por defecto: DATCLIM_.DMD N° de registros: 108 Utilizado por: DMDCLIMA

N°	τιρο	RANGO	UNID	VAL. DEF	VARIABLE	CONTENIDO
1	REAL	sin límite	hPa	870	Р	Presión ambiente
2	REAL	sin límite	К	283	ТМР	Temperatura ambiente
3	REAL	> 0	m	2000	DMIX	Altura máxima de la capa de mezcla diurna
4	REAL	>0	m	500	DMNI	Altura máxima de la capa de mezcla nocturna
5	REAL	>= 0	h	3	HLIFE	Vida media de la especie a dispersar [1*]
6	REAL	>= 0	m/s	2		Valor promedio de la velocidad para la primera clase de estabilidad de la matriz adjunta
7	REAL	>= 0	m/s	3		Ídem para la segunda clase de estabilidad
8	REAL	>= 0	m/s	5		Ídem para la tercera clase de estabilidad
9	REAL	>= 0	m/s	2,5		Ídem para la cuarta clase de estabilidad
10	REAL	>= 0	m/s	2		Ídem para la quinta clase de estabilidad
11	REAL	>= 0	m/s	1,5		Ídem para la sexta clase de estabilidad
12 a 108	REAL	>= 0	%	1		Valores de frecuencia de ocurrencias para cada clase de estabilidad, del rumbo y del rango de velocidad. Se expresan normalizados a 1 [2*]

Tabla G.6 Fichero de datos de entrada para el módulo climático

 $[1^*]$ = Para cada receptor, la concentración resultante se multiplica por un factor del tipo EXP(- K T / V_m), donde K es una constante, T es el tiempo recorrido en función de la distancia y la velocidad media y V_m es la vida media del efluente. No se considera en caso de que sea cero.

[2*] = Se han de incluir en este punto los valores de frecuencia de ocurrencia de la matriz de estabilidades. La dimensión de dicha matriz es siempre fija (6,16,6), correspondiendo el primer índice al rango de estabilidades, el segundo al de rumbos y el último al de velocidades. Su valor multiplica directamente la fórmula gaussiana de concentraciones. Para el caso de ejecuciones de largo rango, el programa fuerza a que la suma de todos los porcentajes valga uno. En el caso de ejecución de corto rango no se normaliza, por lo que el operador habrá de tener en cuenta esta circunstancia.

Utiliza el esquema de clases de estabilidad de Pasquill. En el fichero los valores de la matriz se almacenan en grupos de seis en cada registro, correspondiendo a los rangos de velocidad considerados. Estos registros se agrupan en bloques de dieciséis, cada uno de los cuales corresponde a la misma clase de estabilidad y recorren los diferentes rumbos. Así, se disponen consecutivamente seis de estos bloques de dieciséis registros (6 * 16 = 96 registros), en los que varía la clase de estabilidad que representan.

La lectura de los valores utilizando la sintaxis del lenguaje FORTRAN sería como se presenta a continuación,

```
DO I=1,Num_Estab
DO J=1,Num_Dir
READ(*,*)(SC(I,J,K),K=1,Num_VeI)
ENDDO
ENDDO
```

Donde Num_Estab (=6), Num_Dir (=16) y Num_Vel (=6) representan respectivamente el número de clases de estabilidad, de rumbos y de intervalos de velocidad. SC es la variable cúbica en la que se almacenarían.

Fichero con los Parámetros de Ejecución del Módulo Mesoescalar

Nombre por defecto: CFGMESO_.DMD N° de registros: 22 Utilizado por: DMDCLIMA, DMDVIEN1, DMDVIEN2

Nº TIPO RANGO UNID VAL. VARIABLE **CONTENIDO** DEF SFC_ROUGHT_HGT REAL 1 > 0 m 0,30 Parámetro de rugosidad superficial [1*] 2 Altura de referencia para las REAL > 0 10 **REF_HGT** m medidas de viento [2*] 3 REAL Altura de la > 0 m 1400 **BL_HGT** capa límite planetaria [3*] PWR_LAW_EXPNT 4 REAL -s. u. 0,30 Exponente de extrapolación _SL potencial de los vientos en el estrato superficial [4*] EXTRAP_EXPNT_ 5 REAL s. u. 0,30 Exponente de extrapolación --SAL potencial de los vientos en el estrato superior [5*] MAX_VEER_PARAM Margen de forzamiento de 6 INT 0 a grados 180 _ VERT giro horario [6*] 360 7 REAL 1 SIGMA_VERT Fracción de dispersión > 0 s. u. vertical [7*] CONV_TOLERANCE REAL Parámetro de tolerancia de la 8 0,01 -s. u. convergencia [8*] 9 INT 1500 Número máximo de > 0 **ITER_HALT** s. u. iteraciones permitidas durante el proceso de convergencia del modelo de vientos (evita que se entre en un bucle infinito) 10 INT 1 a 15 s. u. 1 Nivel de referencia de los vientos a dibujar extraídos de la malla tridimensional 11 INT 1 a 25 2 Alternancia en la extracción s. u. de vientos al preparar el fichero ".SFC" para dibujo

Tabla G.7 Fichero de parámetros del módulo mesoescalar

						[9*]
12	REAL	> 0	m	100	SYMAX	Tamaño máximo de la sigma vertical [10*]
13	REAL	>= 0	km	0,2	CDIS	Mínima distancia foco- receptor [11*]
14	INT	0/1		1	LDWSH	Opción de abatimiento por efecto chimenea, (Sí=1/No=def ⁷ .) [12*]
15	INT	0/1		1	LBID	Opción de dispersión por flotación, (Sí=1/No=def) [13*]
16	INT	0/1		1	LDEPS	Opción de deposición, (Sí=1/No=def) [14*]
17	INT	0/1, 2, 3, 			LCMBPF	Opción/Frecuencia de combinación automática de los "puffs", (Sí=1,2,3 /No=0) [15*]
18	INT	> 0	S		ISTEP	Tiempo entre emisión de "puffs". Debe ser un divisor de 3600 (una hora), y supone la emisión de 3600/n "puffs" en cada periodo de simulación
19	REAL		s. u.		SDCMBN	Fracción de dispersión transversal [16*]
20	REAL	>= 0	m/s		DV	Velocidad de deposición
21	REAL	>= 0	m/s		SVV	Velocidad de decantación
22	INT	0/1	s. u.		DIBUJA_SINO	Permite realizar las simulaciones sin dibujar al final de las mismas (0) ó bien engancharse con las salidas gráficas (1)

[1*] = Representa una medida de la rugosidad del terreno, que permite ajustar empíricamente el perfil de velocidades en los niveles inferiores. Se suele tomar como la altura promedio de los obstáculos superficiales dividido por 30.

⁷ Def: opción por defecto
[2*] = Representa la altura común a la que se homogeneizan las alturas de las diferentes torres (en caso de que se incluya más de un punto de medida).

 $[3^*]$ = Representa la altura a la que se puede considerar que el viento por encima es no perturbado por la influencia terrestre (viento geostrófico).

Exponente del ajuste del perfil vertical de [4*] = velocidades en el estrato inferior del dominio, entre el suelo y la altura de la capa límite superficial. La capa límite superficial representa el estrato en el que existe una homogeneidad vertical en los parámetros de transferencia de calor, momento, etc. No se explicita en los ficheros de entrada, considerándose como un 10% del valor de la altura de la capa de mezcla, definida en el fichero de datos meteorológicos. Con ello se permite una variación horaria de este parámetro, lo que resulta bastante realista, siendo menos crítico en las simulaciones incluir la variación diaria de la capa rugosa superficial o la capa límite planetaria (se consideran constantes a lo largo de cada periodo de simulación e iguales a las definidas en el presente fichero).

[5^{*}] = Exponente del ajuste del perfil vertical de velocidades en el estrato superior del dominio, por encima de la capa límite superficial.

[6*] = Este parámetro representa el intervalo angular en el que se fuerza un giro horario al interpolar direcciones de viento en altura. Al obtener valores de dirección en alturas intermedias a dos puntos dados, en general el programa intenta tomar siempre el vector sobre la porción más pequeña de los sectores complementarios determinados por ambas direcciones. No obstante, se forzará a que el vector resultante se sitúe sobre el sector que representa un giro horario al subir en la vertical siempre que dicho sector sea inferior al parámetro definido en este punto. Sólo actúa su carácter restrictivo cuando es mayor de 180 (en caso de ser inferior, el programa ya elige siempre el sector más pequeño).

[7*] = Proporción entre la dispersión vertical y horizontal en el ajuste del campo de vientos. Mediante este valor se controla, de forma empírica, la tendencia del modelo a amortiguar la componente vertical de los vectores, o bien a favorecerla, en los procesos de ajuste al terreno. Valores próximos a cero anulan la velocidad vertical, mientras que valores próximos a uno pesan ambas componentes de igual manera.

[8*] = Parámetro empírico que controla la convergencia del método numérico de ajuste de los vientos. Al reducir su valor aumenta la precisión del método y también el número de iteraciones requeridas (y por tanto el tiempo de ejecución).

[9*] = El número indica que se toma un dato de viento entre cada "n" leídos, tanto por filas como por columnas, y su objeto es no saturar la representación gráfica con vectores de viento.

[10^{*}] = Valor por encima del cual se indica al modelo el uso de los algoritmos para el cálculo de las sigmas características de transporte de larga distancia, en los cuales el crecimiento es función del tiempo transcurrido desde la emisión más que de la distancia.

[11*] = Establece un recorrido mínimo para cualquier "puff" a partir del cual se estiman todas sus propiedades dispersivas. Con ello se evitan problemas de contorno en receptores muy próximos al foco.

[12*] = En caso de seleccionar esta opción, se reduce la altura final de sobreelevación del penacho, en función de la relación entre la velocidad de salida de gases y el viento a la altura de la emisión.

[13*] = Incorpora el efecto de la dispersión inducida por flotabilidad en la estimación de los valores de las sigmas (resultando, lógicamente, en un incremento de las mismas respecto a no seleccionar dicha opción).

[14*] = En caso de seleccionar esta opción, se incorpora un esquema de reducción de las concentraciones por efecto simultáneo de deposición y decantación (gravitacional), utilizando las correspondientes velocidades definidas en registros posteriores de este mismo fichero.

[15*] = Mediante esta opción se indica al modelo si no se desea que se recombinen aquellos "puff" horizontalmente próximos (0), o bien que se proceda a esta recombinación cada 1, 2, 3,... intervalos dentro de cada periodo horario de simulación (tiene relación con el tiempo de emisión de "puffs", recogido en el registro siguiente).

[16*] = En caso de ser seleccionada la opción de combinación de "puffs", esta variable controla las condiciones para que tengan lugar. Se produce sólo entre aquellos "puffs" que participan de las mismas características (no se describen en este manual) y cuyos centros se encuentran a una distancia inferior a un número de sigmas horizontales igual a las expresadas en la presente variable. Si toma un valor cero no se produce combinación de "puffs", y si el valor es negativo se estima automáticamente por el modelo.

Fichero con los Datos del Emplazamiento para el Módulo Mesoescalar

Nombre por defecto: EMPMESO_.DMD N° de registros: 14 Utilizado por: DMDVIEN1, DMDVIEN2, DMDVEXTR, DMDMESOP

Tabla G.8 Fichero con los datos del emplazamiento para el módulo mesoescalar

N°	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	VAL. DEF	VARIABLE	CONTENIDO
1	CHAR	< A80		topog.dmd		Nombre del fichero de datos con la topografía (similar al caso climático)
2	INT	>=1		1	NSOURC	Número de focos
3	REAL	sin límite	km	763,650	XSORC	Coordenada geográfica X del foco
4	REAL	sin límite	km	4301,62	YSORC	Coordenada geográfica Y del foco
5	INT	>= 0	S	0	ISUPDT	Tiempo de actualización de las emisiones [1*]
6	INT	>= 0	s. u.	1	NSRCDS	Número de actualizaciones de los registros de emisión [2*]
7	REAL	>= 0	g/s	1000	QP(IS)	Tasa de emisión [3*]
8	REAL	>= 0	m	15	HPP(IS)	Altura sobre el terreno de las emisiones
9	REAL	sin límite	К	300	TSP(IS)	Temperatura de emisión de los gases
10	REAL	> 0	m	2	DP(IS)	Diámetro de la chimenea
11	REAL	>= 0	m/s	9	VSP(IS)	Velocidad de salida de los gases
12	REAL	>= 0	m ³ /s	15	VFD(IS)	Flujo de salida de los gases
13	REAL	>= 0	m	10	SYOP(IS)	Sigma Y inicia [4*]
14	REAL	>= 0	m	10	SXOP(IS)	Sigma Z inicial [4*]

[1*] = Mediante esta variable y la siguiente es posible definir un esquema de las características de la emisión variable con el tiempo. Este parámetro representa el periodo, en número de segundos, con que se actualizarán los valores de la emisión. Este intervalo ha de ser un múltiplo exacto del tiempo de emisión de los "puffs". Para un régimen constante de emisiones, se codifica con el valor "0".

[2*] = Este parámetro indica el número de veces que se repetirá el conjunto de registros 7 a 14 en los que se actualizan los valores de las características de emisión. Se ha de verificar que el producto de los parámetros 5 y 6 de la tabla anterior (que representa el tiempo total que abarcan las actualizaciones de las condiciones de emisión) coincida con el número de periodos meteorológicos multiplicado por 3600 (el tiempo total de simulación en segundos, teniendo en cuenta que los periodos meteorológicos son horarios). Para un régimen constante de emisiones, se codifica con el valor "1".

[3*] = Se introduce una tasa de emisión variable con el tiempo mediante un factor de emisión que se incorpora al fichero de datos meteorológicos y hace posible su modulación horaria.

[4*] = Estos valores determinan las dimensiones iniciales de las bocanadas emitidas, si se desea que las emisiones tengan ya un cierto tamaño de partida.

Fichero con los Datos de Entrada para el Módulo Mesoescalar

Nombre por defecto: DATMESO_.DMD N° de registros: 4 Utilizado por: DMDVIEN1, DMDVIEN2, DMDMESOP

N°	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	VAL. DEF	CONTENIDO
1a	CHAR	A8		99121000	Fecha (año, mes día y hora) de inicio de las simulaciones.
1b	INT	0 a 3	s. u.	1	Código con el que seleccionan las opciones de ejecución de los distintos códigos del módulo mesoescalar, de acuerdo al criterio: 0 → ejecuta DMDVEXTR

					$\begin{array}{rcccc} 1 & \rightarrow & ejecuta & DMDVIEN1, \\ DMDVIEN2 & y & DMDVEXTR \\ 2 & \rightarrow & ejecuta & DMDVIEN1, \\ DMDVIEN2, & DMDVEXTR & y \\ DMDMESOP \\ 3 & \rightarrow & ejecuta & DMDMESOP \end{array}$
2	INT	> 0	s. u.	5	Número de simulaciones a realizar a partir de la hora anterior (incluida esta)
3	REAL	> 0	m	1000	Altura absoluta a la que se sitúan los datos de viento en altura en el fichero de datos meteorológicos [1*]
4	CHAR	< A80			Nombre del fichero de datos meteorológicos (ver formato más adelante)

[1*] = Los valores correspondientes de viento para esta altura se proporcionan en el fichero de datos meteorológicos (ver descripción). Se supone que a dicha altura el viento es homogéneo en todo el dominio. Dentro del rango de escalas espaciales al que se orienta el modelo, dicha suposición resulta razonable. La altura habrá de tomarse dentro de los límites del dominio vertical de simulación.

Fichero con los Parámetros de Entorno para la Graficación

Nombre por defecto: CFGGRAF_.DMD N° de registros: 31 + número de tramas (10 por defecto) Utilizado por: DIMEDAR1

N°	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	VAL. DEF	CONTENIDO
1	REAL	sin límite	km	756	Coordenada X de la esquina inferior izquierda del área de representación

Tabla G.9 Fichero con los parámetros de entorno para la graficación

-	1	1				
2	REAL	sin límite	km	4290	Coordenada Y de la esquina inferior izquierda del área de representación	
3	REAL	sin límite	km	776	Coordenada X de la esquina superior derecha del área de representación	
4	REAL	sin límite	km	4310	Coordenada Y de la esquina superior derecha del área de representación	
5	INT	> 2	s. u.	4	Número de marcas (con valores) a dibujar en el eje de ordenadas	
6	INT	> 2	s. u.	4	Ídem. para el eje de abscisas.	
7	INT	0/1	s. u.	0	Opción de dibujar retícula (1) ó no (0)	
8	INT	~10 a 180	s. u.	73	Número de puntos en el eje de la malla con la que s dibujarán las isocurvas [1*]	
9	INT	~10 a 180	s. u.	73	Ídem para el eje Y [1*]	
10	REAL	sin límite	s. u.	100	Valor superior de la isocurva a dibujar	
11	REAL	sin límite	s. u.	10	Valor inferior de la isocurva a dibujar	
12	INT	>= 1	s. u.	10	Número de isocurvas a dibujar	
13	INT	>= 1	s. u.	2	Alternancia de isocurvas a rotular con su valor	
14	INT	0/1	s. u.	1	En caso de ser igual a 1 calcula el máximo y mínimo de los valores de la matriz de concentraciones y los considera respectivamente como el máximo y el mínimo de las isocurvas a dibujar	
15	REAL	>= 0	s. u.	1	Valor por el que se multiplican todos los datos de la matriz de concentraciones	
16	REAL	>= 0	s. u.	1	Valor por el que se multiplican todas las	

					velocidades del fichero de vientos
17	REAL	>= 0	s. u.	1	Valor por el que se multiplican (en valor absoluto) los ejes de los "puffs" a representar. En el caso de un valor positivo se utiliza la sigma horizontal para el eje X y la sigma vertical para el eje Y (elipses); si es negativo se usa la sigma horizontal para ambos ejes (circunferencias)
18	INT	0/1	s. u.	1	Dibuja trama de colores (1) ó no (0)
19	INT	0/1	s. u.	1	Dibuja la escala de colores (1), con lo que las isocurvas no se rotulan, ó bien no la dibuja (0), con lo que las isocurvas se rotulan de acuerdo a la alternancia especificada. Este valor sólo actúa si se ha seleccionado el dibujo de la trama de colores
20	REAL	> 0	s. u.	3	Parámetro de tolerancia. Cuando existen pocos datos para que las rutinas dibujen isocurvas, aumentando este valor se pueden evitar los mensajes de error
21	INT	0/1	s. u.	1	En caso de ser igual a 1 suaviza los contornos de las isocurvas
22	INT	0 a 15	s. u.	8	Color del fondo del dibujo
23	INT	0 a 15	s. u.	6	Color por defecto del mapa topográfico
24	INT	0 a 15	s. u.	2	Color de las flechas
25	INT	0 a 15	s. u.	11	Color de los "puffs"
26	INT	0 a 15	s. u.	7	Color de los títulos
27	INT	0 a 15	s. u.	12	Color de los ejes gráficos
28	INT	0 a 15	s. u.	6	Color de los nombres

					toponímicos
29	INT	0 a 15	s. u.	13	Color de las isocurvas
30	INT	0 a 15	s. u.	13	Color del marco externo del dibujo.
31	INT	>0, <100	s. u.	10	Ancho base de las líneas. (El programa proporciona las diferentes líneas del dibujo, tomando este valor como referencia).
32 a 41	INT	-256 a 256	s. u.	174 171 95 71 73 74 69 63 54 53	Código de colores utilizados en el dibujo de las isocurvas cuando se selecciona la opción de tramas. Ver anexo I para código de colores. Se precisan, y el programa los lee, un número de valores igual al de isocurvas requeridas menos uno.

[1*] = La rutina de dibujo de isocurvas utiliza su propia malla de interpolación, que no ha de coincidir necesariamente con la matriz de receptores/topográfica definida para los modelos (aunque sean los datos de inmisión sobre dicha matriz los que se utilizan para dibujar). Cuanto más grandes son dichas dimensiones, con más detalle (no necesariamente con mayor precisión) se dibujan las isocurvas, y al contrario. Si estos valores son excesivamente grandes, puede haber problemas de memoria para presentar en pantalla las figuras (el programa alerta de este hecho). El programa permite dimensiones diferentes en cada eje.

Fichero con los Parámetros del Emplazamiento para la Graficación

Nombre por defecto: EMPGRAF_.DMD N° de registros: 3 Utilizado por: DIMEDAR1

Tabla G.10 Fichero con los parámetros del emplazamiento para el módulo mesoescalar

N°	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	VAL. DEF	CONTENIDO
1	CHAR	< A80		* * *	Nombre del fichero con el logotipo
2	CHAR	< A80		* * *	Nombre del fichero con la topografía
3	CHAR	< A80		* * *	Nombre del fichero con la toponimia

Fichero con los Datos de Dibujo para la Graficación

Nombre por defecto: DATGRAF_.DMD N° de registros: 1 + 8 x número_de_dibujos Utilizado por: DIMEDAR1

Tabla G.11 Fichero con los datos de dibujo dentro del módulo de graficación de la aplicación DIMEDAR

N°	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	VAL. DEF	CONTENIDO
1	INT	> 0	S. U.	1	Número de bloques de dibujo (como el que sigue) que vienen a continuación
2	CHAR	< A80		* * *	Nombre del fichero de concentraciones
3	CHAR	< A80		* * *	Nombre del fichero de vientos
4	CHAR	< A80		* * *	Nombre del fichero de "puffs"

5	С	HAR	< A80	 APLICACIÓN DIMEDAR	Título superior (principal)
6	С	HAR	< A80	 #Versión X.X#	Título superior (secundario)
7	С	HAR	< A80	 ##	Título inferior
8	С	HAR	< A80	 #CEAM 2015#	Título izquierdo
9	С	HAR	< A80	 ##	Título derecho

La impresión gráfica de los títulos admite los siguientes caracteres de control, que actúan sobre la cadena comprendida entre ambos:

# CADENA #	dibuja los caracteres con trazo fino
[CADENA]	dibuja los caracteres como superíndice
] CADENA [dibuja los caracteres como subíndice

Fichero con los Datos Topográficos

Nombre por defecto: TOPOG.DMD Utilizado por: DMDCLIMA, DMDVIEN1, DMDVIEN2, DMDVEXTR, DMDMESOP

Tanto el código climático como los que constituyen el módulo mesoescalar utilizan las medidas topográficas residentes en un fichero con la misma estructura (puede ser el mismo o no). No obstante, el módulo mesoescalar tiene la restricción de que las dimensiones han de ser necesariamente de 50 x 50 valores.

Los datos topográficos que se necesitan en el caso de ambos códigos consisten en una matriz rectangular de valores de alturas, consignados en metros.

La aplicación precisa la existencia de este fichero necesariamente para continuar con las ejecuciones (en el caso de la opción climática es posible no tenerlas en cuenta (topografía plana) dependiendo del valor de la variable IALTURAS, en el fichero de configuración.

En caso de no hallarse el fichero topográfico la aplicación lo genera por defecto, con todos los valores igual a 0., y alerta de este hecho al usuario, permitiendo continuar o interrumpir la ejecución.

Tabla	G.12	Fichero	de datos	topográfico
				topog. anoo

N°	VARIABLE	CONTENIDO
1	Cadena de Caracteres	Comentario literal para identificar el fichero, no es considerado por el sistema
2	NUMXREC, NUMYREC	Número de valores en el eje de ordenadas y de abscisas, respectivamente (enteros)
3	XGRDSW, XGRDNE	Mínimo y máximo valores del eje de abscisas en kilómetros
4	YGRDSW, YGRDNE	Mínimo y máximo valores del eje de ordenadas en kilómetros
5	ZGRDSW, ZGRDNE	Mínimo y máximo valores del eje vertical en metros. En el módulo mesoescalar se fijan aquí las dimensiones verticales de la malla tridimensional, que tendrá 15 niveles
6 al final (2500 valores en el caso mesoescalar)	ZREC(x,y) (se mueve más rápido el índice x)	Valores de las alturas de la malla topográfica, en metros. Se almacena un dato en cada registro, correspondiendo el primero a la esquina inferior izquierda de la ventana de trabajo, recorriéndose a continuación cada uno de los valores de las filas, de izquierda a derecha y estas de abajo a arriba.

Fichero con los Datos Meteorológicos (módulo mesoescalar)

Nombre por defecto: no tiene Utilizado por: DMDVIEN1, DMDMESOP

Los valores meteorológicos horarios que proporcionan valores de entrada a los diferentes códigos del módulo mesoescalar se han de codificar en un fichero especial. En él se reunirán todas las medidas en superficie que se utilizarán para las simulaciones, así como la velocidad y dirección en altura (para el nivel de referencia establecido en la variable **bl_hgt** del fichero de configuración)

El fichero se puede confeccionar o bien por el usuario o de una forma semi-automática de acuerdo a las condiciones que aquí se describe. La opción 4 del submenú del módulo de ejecución mesoescalar de la aplicación proporciona únicamente la posibilidad de editar este fichero. En próximas versiones se desarrollará en este punto un procedimiento automatizado de preparación de las medidas a partir de los valores meteorológicos disponibles.

La aplicación requiere disponer de este fichero para poder ejecutar la simulación mesoescalar, chequeando su existencia. En el caso de no encontrarlo se alerta de este hecho y se interrumpe la ejecución.

La estructura del fichero se ha de ceñir a los siguientes condicionantes:

N°	VARIABLE	CONTENIDO				
1	N_Est	Número de estaciones en superficie que componen el fichero de datos				
2 a N_Est	Xi, Yi, Zi	Coordenadas horizontales de las distintas estaciones en kilómetros y la altura sobre el terreno en metros				
resto	ver descripción Tabla G.13	Promedios horarios de las magnitudes meteorológicas de cada estación y en altura				

En cada uno de los registros se contendrán todas las medidas correspondientes al intervalo de una hora (se suponen valores promedio).

La estructura de cada registro es la siguiente:

VARIABLES: FECHA, N_Est (VEL, DIR, TEMP, HLIM, IESTAB, SGHOR, SGVER), VELALT, DIRALT, FACTOR

FORMATO: A8, N_Est (1X, F4.1, 1X, F4.0, 1X, F5.1, 1X, F5.0, 1X, I1, 1X, F4.1, 1X, F4.1), 1X, F4.1, 1X, F4.0, 1X, F4.1

Donde el grupo central de variables se repiten N_Est veces (dependiendo del número de estaciones en superficie disponibles). La descripción de las variables es la siguiente (Tabla G.13):

VARIABLE	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	CONTENIDO
FECHA	CHAR	A8	AAMMDDHH	Fecha absoluta de la medida (año, mes día y hora), recorriendo las horas de 00 a 23
VEL	REAL	>= 0	m/s	Velocidad del viento a la altura de la estación
DIR	REAL	0 a 360	grados	Dirección del viento a la altura de la estación
TEMP	REAL	sin límites	° C	Temperatura ambiente a la altura de la estación
HLIM	REAL	>= 0	m	Altura de la capa de mezcla en la estación [1*]
IESTAB	INT	1 a 7		Valor de la estabilidad atmosférica en la estación. [2*]
SGHOR	REAL	>= 0	m	Sigma horizontal de salida de los "puffs"
SGVER	REAL	>= 0	m	Sigma vertical de salida de los "puffs"
VELALT	REAL	>= 0 a 360	m/s	Velocidad del viento en altura
DIRALT	REAL	>=0	grados	Dirección del viento en altura

Tabla G.13 Variables usadas en el fichero meteorológico

FACTOR	REAL	sin límites	 Factor variació	de n hora	emisión ria. [3*]	con

[1*] = Este valor de la capa de mezcla es utilizado por el modelo de ajuste del campo de vientos para estimar la altura de la capa superficial, que se toma como un 10% de aquella. También por el modelo de dispersión, en el que la difusión atmosférica, el crecimiento de los "puffs", etc. es diferente en los estratos situados por encima y por debajo de dicho nivel.

[2*] = Utiliza el esquema de clases de estabilidad de Pasquill con siete clases (desdoblada la D en día-noche)

[3*] = Factor introducido hora a hora, que se emplea según se actualizan las emisiones a lo largo de la ejecución del modelo. Toma valores positivos (o nulos) y se encuentra normalizado para todo el muestreo. Es adimensional y multiplica la tasa de emisión que se lee desde el fichero de datos del emplazamiento para el módulo mesoescalar (EMPMESO_.DMD).

Fichero Topográfico para Dibujo

Nombre por defecto: no tiene Utilizado por: DIMEDAR1

En este fichero se incluye la información topográfica que se puede representar en las salidas gráficas. Tiene un formato vectorial y su propósito es exclusivamente gráfico, por lo que no debe confundirse con el fichero topográfico descrito anteriormente (con formato matricial) que sirve de alimentación a los códigos de simulación.

La codificación del mismo se realiza en forma de vectores multipunto, constituidos por conjuntos de pares de coordenadas geográficas, que se unen sucesivamente mediante una línea de trazo con características diferentes. El primer y último punto no se cierra, por lo que deberán ser iguales en el caso de desear un polígono cerrado. Cada uno de estos vectores se almacena de acuerdo al siguiente criterio (Tabla G.14):

N°	VARIABLE	ΤΙΡΟ	CONTENIDO
1	COD N_Punt	REAL INT	Código de tipo de línea Número de puntos del vector
2	X1 Y1	REAL	Primer par de coordenadas geográficas del vector
3	X2 Y2 REAL		Segundo par de coordenadas geográficas del vector
N_Punt	XN_Punt YN_Punt	REAL	Último par de coordenadas geográficas del vector

Tabla G.14	Fichero	topográfico de	l módulo de	e graficación
rabia o.i i	1 101101 0	topogranoo ao	i inioaano a	granoaoion

Mediante el valor de la variable COD se codifican los siguientes aspectos con los que se dibujará el vector. Para ello:

- Las dos cifras enteras menos significativas (unidades y decenas) representan el color del trazo (0 a 15).
- Las siguientes dos cifras (centenas y millares) representan el tipo de línea (1 a 9).
- Las siguientes dos cifras (decenas y centenas de millar) representan el grosor de la línea (0 a 50).

En el caso de que algunos de los valores estén fuera del rango definido, se utilizarán los valores por defecto dados para el resto de la aplicación (fichero de configuración del módulo gráfico).

Así, un valor de COD = 200209 significaría una línea azul brillante (9), punteada (2) y de grosor igual a 20 unidades.

Los códigos de colores y tipos de línea son los contemplados en este trabajo son los empleados por las librerías de graphic C.

Este módulo de graficación permite además el "externalizar" la graficación fuera de la aplicación DIMEDAR usando GrADS (Grid Analysis and Display System), el cual se presentará posteriormente de una manera breve.

Fichero Toponímico para Dibujo

Nombre por defecto: no tiene Utilizado por: DIMEDAR1

Las opciones gráficas de la aplicación permiten representar cadenas alfanuméricas en posiciones geográficas concretas del área de trabajo. Resulta útil para situar poblaciones o puntos de referencia de interés sobre el mapa. Esta información ha de encontrarse en un único fichero, con cuatro columnas, de acuerdo al criterio que se describe más abajo. En cada registro se contiene la información relativa a la presentación de cada uno de los elementos toponímicos.

VARIABLES: COD, YCOORD, YCOORD, NOMBRE **FORMATO:** formato libre, separados por blancos;

VARIABLE	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	CONTENIDO
COD	INT	0 a 16	s. u.	Código del símbolo. Si es negativo, no dibuja ninguno
XCOORD	REAL	sin límites	km	Coordenada X en que se sitúa el símbolo anterior
YCOORD	REAL	sin límites	km	Ídem. coordenada Y
NOMBRE	CHAR	> A40		Cadena de caracteres que se presentan

La descripción de las variables es la siguiente:

Las cadenas con el nombre o etiqueta no podrán contener ningún espacio en blanco. El símbolo se sitúa siempre en el punto indicado por las coordenadas, mientras que la cadena literal se presenta ligeramente por encima y su comienzo ligeramente desplazado hacia la izquierda.

En el caso de que no se dibuje el símbolo (código < 0), el inicio de la cadena se sitúa justo en el punto de las coordenadas. Sólo los puntos cuyas coordenadas se sitúan dentro del área de trabajo serán representados. En caso de que las coordenadas estén dentro de la ventana pero la cadena salga fuera de los límites, el sistema intenta cambiar

la posición de la misma a fin de que no se superponga sobre el borde del gráfico.

Fichero Logotipo para Dibujo

Nombre por defecto: no tiene Utilizado por: DIMEDAR1

El sistema permite insertar un dibujo en la esquina superior derecha de las gráficas, a modo de logotipo. Este dibujo debe tener un formato similar a los que contienen las salidas gráficas que genera la propia aplicación, pudiendo pues utilizarse una de estas, que sería mostrada con tamaño reducido en una esquina. Se incluye un fichero con el logotipo de la Entidad de Sanejament d'Aigües, denominado "EDAR.LOG".

G.2.4 FICHEROS DE SALIDA

Fichero con los Resultados de la Ejecución del Módulo Climático

Nombre por defecto: CLIMCON_.SAL

El modelo climático produce un único fichero con los resultados, que se almacena bajo el nombre establecido en el fichero general de configuración (DIMEDAR_.CFG).

El fichero contiene cuatro columnas de datos, correspondiendo cada registro a la siguiente estructura:

VARIABLES: XCOORD, YCOORD, ALTURA, CONC FORMATO: F6.1, 1X, F6.1, 1X, I5, 1X, F9.2

La descripción de las variables es la siguiente (Tabla G.15):

VARIABLE	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	CONTENIDO
XCOORD	REAL	sin límites	km	Valor de la coordenada X del nodo i-ésimo de la malla
YCOORD	REAL	sin límites	km	Valor de la coordenada Y del nodo i-ésimo de la malla
ALTURA	INT	>=0	m	Altura topográfica del nodo
CONC	REAL	>=0	μg/m3	Concentración predicha por el modelo a nivel del suelo en el mismo nodo

Tabla G.15 Fichero de salida del módulo climático

El modelo produce la estimación de concentraciones sobre una malla rectangular, que coincide con la determinada por el fichero topográfico. Si aquel no está presente, se genera por defecto con las dimensiones 50 x 50.

En el fichero no se distingue si las concentraciones obtenidas son los valores medios, los percentiles o los porcentajes de ocurrencias.

Las concentraciones se obtienen multiplicadas por un factor de corrección respecto al valor de la tasa de emisión considerado. Habitualmente se expresa aquella en g/s.

Ficheros con los Resultados de la Ejecución del Módulo Mesoescalar

De la ejecución del módulo mesoescalar se obtienen diferentes tipos de ficheros de resultados:

- Datos de viento interpolados y ajustados sobre una matriz tridimensional (ficheros tipo 1).
- Datos de viento sobre una matriz plana obtenidos a una altura constante del terreno (ficheros tipo 2).

- Valores de concentración a nivel del suelo para cada uno de los nodos de la red cartesiana y para cada periodo horario de simulación (ficheros tipo 3).
- Valores de la posición y características de los "puffs" presentes al final de cada periodo horario de simulación (ficheros tipo 4).

Los *ficheros de tipo 1* corresponden a las salidas sucesivas de los códigos DMDVIEN1 y DMDVIEN2. Contienen valores representativos de cada una de las horas de simulación y se nombran de acuerdo al criterio:

AAMMDDHH.UVW

donde el nombre se compone de los dígitos del año (AA), mes (MM), día (DD) y hora (HH, 00 a 23), mientras que la extensión es fija (".UVW").

El formato de los datos en cada registro es el siguiente:

VARIABLES: UVEL, VVEL, WVEL FORMATO: F5.1, 1X, F5.1, 1X, F5.2

La descripción de las variables es la siguiente (Tabla G.16):

VARIABLE	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	CONTENIDO
UVEL	REAL	sin límites	m/s	Componente X del viento en el nodo i, j, k
VVEL	REAL	sin límites	m/s	Componente Y del viento en el nodo i, j, k
WVEL	REAL	sin límites	m/s	Componente Z del viento en el nodo i, j, k

Tabla G.16 Fichero de salida tipo 1 del módulo mesoescalar: Vientos interpolados ajustados a la matriz tridimensional

La matriz de vientos tridimensional tiene unas dimensiones fijas de 51 x 51 x 15 nodos. Los vientos están definidos en los vértices de la malla topográfica (de ahí que exista un

valor más en cada eje respecto a aquella). Por lo tanto estos ficheros contienen un total de 39.015 registros con datos interpolados de viento.

Los valores en cada registro, corresponden a un nodo de la malla tridimensional (i, j, k), según los ejes X, Y y Z respectivamente, variando más rápidamente los índices más a la izquierda. Así, se archivan sucesivamente los nodos (1,1,1), (2,1,1), (3,1,1), ... (51,1,1), (1,2,1), (2,2,1), ... (51,2,1), ... (51,51,1), (1,1,2), (2,1,2), ... (51,51,15).

Con objeto de poder referenciarlos en el espacio, al final del fichero se añaden 9 registros que contienen los siguientes valores:

registro nº 39016 :	número de nodos en el eje X
registro nº 39017 :	número de nodos en el eje Y
registro nº 39018 :	número de nodos en el eje Z
registro nº 39019 :	coordenada X del origen
registro nº 39020 :	coordenada Y del origen
registro nº 39021 :	coordenada Z del origen
registro nº 39022 :	paso de malla en el eje X
registro nº 39023 :	paso de malla en el eje Y
registro nº 39024 :	paso de malla en el eje Z

Los *ficheros de tipo 2* corresponden a los campos de vientos sobre una matriz bidimensional obtenidos del código DMDVEXTR.

Se extraen a partir de los ficheros anteriores para cada hora de simulación, y se nombran con el mismo criterio, utilizando la extensión fija ".SFC".

Las variables definidas en los registros décimo y décimo primero del fichero de configuración condicionan el contenido de estos archivos.

La primera de ellas define la altura (número de nodos verticales, 1 a 15) sobre el terreno del campo de vientos a extraer.

El código DMDVEXTR extrae de la matriz tridimensional de vectores aquellos correspondientes a una malla horizontal, que se sitúan a una misma altura sobre el terreno (igual al número de nodos especificado).

La segunda variable controla el número de alternancias en la extracción de las medidas. Si es igual a 1, se guardarían todos los vientos sobre la matriz 51 x 51; si es igual a 2 se almacenaría sólo uno de cada dos datos, obteniéndose una

matriz de 25 x 25; si igual a 3 se obtendría una matriz de 17 x 17, etc.

El propósito de estos ficheros es únicamente proporcionar valores de viento para la salida gráfica, por lo que el programa se encarga de transformar las componentes horizontales del viento en velocidad y dirección, así como de calcular las coordenadas de cada vector.

El formato de los datos en cada registro es el siguiente:

VARIABLES: XCOORD, YCOORD, VEL, DIR FORMATO: F8.3, 1X, F8.3, 1X, F4.1, 1X, F5.1

La descripción de las variables es la siguiente (Tabla G.17):

Tabla G.17 Fichero de salida tipo 2 del módulo mesoescalar: Vientos interpolados sobre la matriz bidimensional

VARIABLE	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	CONTENIDO
XCOORD	REAL	sin límites	Km	Valor de la coordenada X del nodo i-ésimo
YCOORD	REAL	sin límites	km	Valor de la coordenada Y del nodo i-ésimo
VEL	REAL	>= 0	m/s	Velocidad del viento en dicho nodo
DIR	REAL	>= 0	grados	Dirección del viento en dicho nodo

Los *ficheros de tipo 3* corresponden a los resultados de las concentraciones al nivel del suelo predichas por el modelo de dispersión.

De dicho modelo se obtiene realmente un único archivo, cuyo nombre se define en el fichero de configuración (DIMEDAR_.CFG) y que por defecto se nombra como MESOCON_.SAL. En el mismo se contienen los 50 x 50 valores de inmisión calculados por el modelo sobre los nodos y a las alturas determinadas por el fichero topográfico, correlativamente para cada periodo horario de simulación (se pueden considerar como valores promedios horarios). Entre cada grupo de valores se inserta un registro que indica el periodo de simulación desde el comienzo, de tipo "# *Periodo de Simulación: n.*".

Para cada uno de los periodos, en cada registro se guardan las coordenadas horizontales, altura y valor de inmisión de cada uno de los nodos, uno por registro, de forma similar a como se describió para la salida del modelo climático.

Con objeto de poder graficar horariamente los resultados del modelo, desde el "shell" se parte el fichero anterior en archivos horarios, en los que se guarda solamente el resultado de cada uno de los periodos de simulación, sin variar el contenido ni el formato de salida. Estos archivos se nombran con el mismo criterio que los ficheros de viento, usando la extensión fija ".CON":

AAMMDDHH.CON

Los *ficheros de tipo 4* corresponden a la información sobre los "puffs" activos al final de cada periodo de simulación. Con criterio similar al caso anterior, el modelo de dispersión produce un único fichero de salida, en el que se agrupan todos los resultados de todos los periodos de simulación.

Su nombre se define en el fichero de configuración (DIMEDAR_.CFG) y por defecto se almacenan en MESOPUF_.SAL.

Al principio de cada periodo se inserta un registro identificativo " *# Periodo de Simulación: n, Número Puffs Activos: m*", en el que se hace referencia al número del periodo y al número de "puffs" activos que se mantienen al final del mismo.

Para cada periodo se almacena en cada registro información de cada uno de los "puff", con el siguiente contenido y formatos:

VARIABLES: XPUFF, YPUFF, ZPUFF, ALT, SY, SZ, TIEMPO, QPUFF, TDIS, KEYP

FORMATO: F8.3, F9.3, F6.0, F6.0, F6.0, F6.0, I6, F12.3, F9.3, I2

La descripción de las variables es la siguiente (Tabla G.18):

VARIABLE	ΤΙΡΟ	RANGO	UNID	CONTENIDO (referidos a cada "puff")
XPUFF	REAL	sin límites	km	Valor de la coordenada X
YPUFF	REAL	sin límites	km	Valor de la coordenada Y
ZPUFF	REAL	>= ALT	m	Altura absoluta del centro
ALT	REAL	>= 0	m	Altura del suelo situado bajo el que se sitúa
SY	REAL	>= 0	m	Sigma horizontal
SZ	REAL	>= 0	m	Sigma vertical
TIEMPO	INT	> 0	min	Tiempo transcurrido desde su emisión
QPUFF	REAL	>= 0	Kg	Masa asociada al "puff"
TDIS	REAL	>= 0	km	Distancia recorrida
ΚΕΥΡ	INT	1 a 6		Clave de codificación de sus características

 Tabla G.18
 Fichero de salida tipo 4 del módulo mesoescalar: información sobre los "puffs"

Nuevamente con objeto de permitir una graficación horaria de los resultados, el programa "shell" se encarga de partir el archivo anterior en ficheros horarios individuales, en los que se guarda solamente el resultado de cada uno de los periodos de simulación, sin variar el contenido ni el formato de salida. Estos archivos se nombran con el mismo criterio que los ficheros de viento, usando la extensión fija ".PUF":

G.2.5 SALIDAS GRÁFICAS CON GrADS

En apartados anteriores comentamos la posibilidad de "externalizar" de la aplicación DIMEDAR la graficación de los resultados de éste mediante el software GrADS.

GrADS (Grid Analysis and Display System) es una herramienta de escritorio interactivo que se utiliza para

facilitar el acceso, manipulación y visualización de datos de ciencias de la tierra.

Presenta dos modos de graficación: el modo retrato ("portrait") de dimensiones 8,5 x 11 pulgadas y el modo paisaje ("landscape") de dimensiones 11 x 8,5 pulgadas. Posee además dos maneras diferentes de manejar los datos: datos en malla (en una cuadrícula de "x" dimensiones) o bien datos en estación (datos puntuales en diferentes puntos del espacio). Es compatible con muchos formatos de archivos de datos, incluyendo binario (corriente o secuencial), GRIB (versión 1 y 2), NetCDF, HDF (versión 4 y 5), y BUFR (para datos de la estación).

GrADS se ha implementado en todo el mundo en una variedad de sistemas operativos de uso común y se distribuye gratuitamente a través de Internet.

Utiliza un entorno de datos 5-Dimensional: las cuatro dimensiones convencionales (longitud, latitud, nivel vertical, y tiempo) más una quinta dimensión opcional para mallas que se implementa generalmente pero está diseñado para ser utilizado para conjuntos. Los conjuntos de datos se colocan en el espacio 5-D mediante el uso de un archivo descriptor de datos.

GrADS maneja redes que son regulares, no linealmente espaciadas, gaussianas, o de resolución variable. Los datos de los diferentes conjuntos de datos pueden ser gráficamente superpuestos, con registro espacial y la hora correctas.

Las operaciones se ejecutan de forma interactiva mediante la introducción de expresiones FORTRAN en la línea de comandos (pues no dispone de una interfaz gráfica del tipo Matlab, Visual C++,...

El programa proporciona un rico conjunto de funciones integradas, pero los usuarios también pueden añadir sus propias funciones como rutinas externas escritas en cualquier lenguaje de programación.

Los datos pueden visualizarse utilizando una variedad de técnicas gráficas: de línea y gráficos de barras, gráficos de dispersión, contornos suavizados, contornos sombreados, racionalizaciones, vectores de viento...

El formato de salida de gráficos es PostScript, pero el usuario puede seleccionar otros formatos de imagen.

GrADS proporciona valores predeterminados geofísicamente intuitivos, pero también existe la opción de controlar todos los aspectos de la producción gráfica. Quizás una de las características más interesantes de GrADS y que le dota de una amplia versatilidad, haciéndole extremadamente potente es la utilización de secuencias de comandos para mostrar botones y una interfaz programable que permite el análisis y la visualización de aplicaciones más sofisticadas.

Destacar que GrADS puede ejecutarse en modo "batch", lo que facilita el uso del programa para hacer largos trabajos por lotes durante la noche.

Para la generación de salidas gráficas con GrADS desde la aplicación DIMEDAR se distinguen dos partes; por un lado, se debe obtener el fichero con los datos agrupados de cada simulación con el programa DMDGRADS.EXE, y por otro lado se crea un fichero de configuración con extensión 'CTL' que permite la lectura de la serie de datos de cada simulación y su respectiva representación. Este archivo de extensión CTL es imprescindible pues da las órdenes precisas de configuración al programa.

El programa DMDGRADS requiere la entrada del fichero de concentraciones compacto MESOCON_.SAL y un fichero que incluye una lista de todos los vientos generados en la simulación.

Este paso no es directo, puesto que el GrADS usa archivos de tipo binario, por lo hay que pasar los ficheros de resultados de la aplicación DIMEDAR a formato binario. Sin embargo esto no ha supuesto un excesivo problema, puesto que se ha automatizado todo el proceso, por lo que el usuario final no tiene que realizar este tipo de modificaciones.

Fichero con los Datos de Entrada al programa GrADS

El fichero de datos para que pueda ser leído por GrADS debe tener el formato adecuado. Las variables se almacenan en acceso directo en mallas horizontales con la misma dimensión que la dimensión empleada en las simulaciones (correspondiente a las concentraciones) y según el orden que se muestra a continuación.

Las variables corresponden a las alturas de nivel y concentraciones horarias en superficie agrupadas en el fichero MESOCON_.SAL, así como los ficheros horarios de vientos, que incluyen las componentes u, v y w en 15 niveles, todas ellas leídas en la forma usual en que se lee en Fortran.

Formato de los serie de datos generados DMDGRADS.DAT

Time 1, Level 1000, Variable alt (ALTURA) Time 1, Level 1000, Variable con (CONCENTRACIÓN) Time 1, Level 1000, Variable u (COMPONENTE U) Time 1, Level 950, Variable u then levels 900, 850, 800, 750, 700, 650 then levels 600, 550, 500, 450, 400, 350, then Time 1, Level 300, Variable u Time 1, Level 1000, Variable v (COMPONENTE V) Time 1, Level 950, Variable v then levels 900, 850, 800, 750, 700, 650 then levels 600, 550, 500, 450, 400, 350, then Time 1, Level 300, Variable v Time 1, Level 1000, Variable w (COMPONENTE W) Time 1, Level 950, Variable w then levels 900, 850, 800, 750, 700, 650 then levels 600, 550, 500, 450, 400, 350, then Time 1, Level 300, Variable w Time 2, Level 1000, Variable alt Time 2, Level 1000, Variable con Time 2, Level 1000, Variable u Time 2, Level 950, Variable u then levels 900, 850, 800, 750, 700, 650 then levels 600, 550, 500, 450, 400, 350, then Time 2, Level 300, Variable u Time 2, Level 1000, Variable v Time 2, Level 950, Variable v then levels 900, 850, 800, 750, 700, 650 then levels 600, 550, 500, 450, 400, 350, then

Time 2, Level 300, Variable v Time 2, Level 1000, Variable w Time 2, Level 950, Variable w then levels 900, 850, 800, 750, 700, 650 then levels 600, 550, 500, 450, 400, 350, then Time 2, Level 300, Variable w

N_horas de simulación

Ejemplo fichero de configuración de entrada a GrADS: DMDGRADS.CTL

DSET ^DMDGRADS.DAT TITLE Sample Model Data -99.9 UNDEF XDEF 50 linear 0 0.08 YDEF 50 linear 0 0.08 ZDEF 1000 950 900 850 800 750 700 650 15 LEVELS 600 550 500 450 400 350 300 TDEF 144 linear 00z15may03 1HR VARS 5 alt 0 99 alturas con 1 99 concentracion u 15 99 U ComponenteX (m/s) v 15 99 V ComponenteX (m/s) w 15 99 W ComponenteX (m/s) **ENDVARS**

Para graficar los datos se emplea un 'script' que facilita las representaciones de las variables, a saber, topografía,

concentración y tres componentes de la velocidad en quince niveles, junto con la toponimia. Para la correcta realización del script hay que tener en cuenta ciertos aspectos:

Tanto la posición de la EDAR, como la posición de los nodos se sitúan en relación al tamaño virtual de las salidas de la simulación; sus posiciones deben quedar dentro del tamaño real de la página de las salidas de GrADS, en nuestro caso 11x8,5, pudiéndose modificar en cualquier momento.

La generación de salidas gráficas hora a hora se puede realizar en formato 'GMF', pudiendo visualizarlas con programas como el GV32.EXE incluido dentro del paquete GrADS. Se pueden transformar también a un formato más portable en Windows (WMF). Por otro lado el programa permite englobar en un solo fichero una simulación completa (en este caso lo que obtenemos no es un fichero de imagen sino una animación en un formato de video).

G.2.6 FICHEROS TEMPORALES

La aplicación DIMEDAR utiliza ficheros temporales durante la ejecución de los diferentes módulos, que se borran al finalizar la sesión, por lo que no resultan visibles al usuario.

Estos ficheros se crean en el directorio de trabajo, y sólo son accesibles si se produce una interrupción traumática de la aplicación.

A continuación (Tabla G.19) se presenta exclusivamente una relación de los mismos.

MÓDULO	FICHEROS TEMPORALES DE TRABAJO
DIMEDAR	
DIMEDAR1	DMDSALnn.OFF
DMDCLIMA	DMDCLIMRES, DMDCLIMERR
DMDVIEN1	DMDVIE1ERR, UOP.MAT, VOP.MAT, ICELLDS.MAP
DMDVIEN2	DMDVIE2ERR, UO.MAT, VO.MAT, UU.MAT, VV.MAT, WW.MAT, XSIDES.MAT,

Tabla G.19	Ficheros	temporales	creados al	eiecutar	la a	aplicación	DIMEDAR
rabia o. i /	110110105	tomportatos	or ou dos ur	Globara	i a c	aphodolori	DIMEDIAL

	YSIDES.MAT, ZSIDES.MAT, ORIG.MAT, PRECOND.MAT, ICCG.MAT, LAM.MAT, AP.MAT, P.MAT, UP.MAT, VP.MAT, WP.MAT, UPIC.MAT, VPIC.MAT, WPIC.MAT
DMDVEXTR	DMDVEXTERR
DMDMESOP	DMDMESORES, DMDMESOERR; DMD_ <i>nnnn</i>

G.2.7 FICHEROS DE ERRORES

Los diferentes módulos incorporados en la aplicación realizan un cierto control de posibles errores (en los datos de entrada y a lo largo de los cálculos), generando un fichero con el resultado de la ejecución.

Este control es limitado, por lo que compete al usuario poner el mayor cuidado en la preparación de los datos de entrada con el fin de que se eviten errores ocasionales.

Estos ficheros se borran al finalizar la aplicación, por lo que son transparentes al usuario.

Se nombran con el propio nombre del ejecutable que los genera, cambiando el último carácter por un guion bajo ("_"), y con extensión ".ERR" (ej. el modelo DMDMESOP genera el fichero de errores DMDMESO_.ERR).

Los ejecutables escriben tres tipos de comentarios en estos ficheros:

- un mensaje iniciado por el carácter "#" cuando se produce un error fatal en la ejecución que imposibilita su progreso
- un mensaje iniciado por el carácter "@" cuando se produce una alerta que no impide la continuación de la ejecución
- un registro con el nombre del ejecutable, en caso de que se haya finalizado la ejecución correctamente.

El "shell" de la aplicación (DIMEDAR) chequea la presencia de este fichero de errores tras la finalización de cada uno de los módulos y antes de lanzar el siguiente. La interpretación y posibilidades que pueden darse son las siguientes (Tabla G.20).

CASOS POSIBLES	SIGNIFICADO	ACTUACIONES DEL SISTEMA
No se encuentra el fichero de errores	No se llegó a lanzar el ejecutable	Alerta del error e interrumpe la ejecución, devolviendo el control al "shell"
Se encuentra al menos una línea encabezada por el carácter "#"	Se produjo un error controlado que interrumpió la ejecución	Alerta del error, permite visualizar el fichero de errores e interrumpe la ejecución, devolviendo el control al "shell"
Se encuentra al menos una línea encabezada por el carácter "@" pero no con "#", ni se encuentra el nombre del ejecutable	Se detectó una posible anomalía, pero no se llegó a finalizar la ejecución	Alerta del error, permite visualizar el fichero de errores e interrumpe la ejecución, devolviendo el control al "shell"
Se encuentra al menos una línea encabezada por el carácter "@" pero no con "#", y sí se encuentra un registro con el nombre del ejecutable	Se ha detectado una posible anomalía, si bien se finalizó la ejecución controladamente	Alerta del error, permite visualizar el fichero de errores y da la opción de proseguir la simulación o bien devolver el control al "shell"
Se encuentra solamente el nombre del ejecutable	Se finalizó correctamente la ejecución	No se genera ningún mensaje y la simulación progresa normalmente.
Existe el fichero de errores pero no se dan los casos anteriores	Se produjo un error en tiempo de ejecución del programa	Alerta del error e interrumpe la ejecución, devolviendo el control al "shell"

Tabla G.20 Posibles tipos de error de la aplicación DIMEDAR

Sólo se ha mostrado los tipos de error generados por la aplicación. No se presenta en este trabajo todos los mensajes de error posibles que genera la aplicación DIMEDAR por cuestiones obvias.

G.2.8 CONFIGURACIÓN DE PERIFÉRICOS

Mediante la opción 4 del submenú del *módulo de salidas gráficas* se pueden adaptar controladores para diferentes periféricos de pantalla e impresión, de manera que las salidas gráficas pueden soportar una amplia gama de dispositivos.

El programa carga los "drivers" adecuados a cada configuración, de manera que las salidas gráficas pueden visualizarse o imprimirse con independencia del dispositivo de salida presente, sin necesidad de tener que generarlas de nuevo.

Esta es una característica del software de dibujo utilizado más que de la propia aplicación. La selección y adaptación de estos "drivers" se realiza mediante una llamada al programa "EQUIP", que se distribuye con las rutinas gráficas (se ejecuta desde el menú principal de la aplicación).

El programa ofrece diferentes opciones de configuración, bien documentadas y auto explicativas, por lo que no se tratarán en el presente punto. Con las opciones seleccionadas se genera un pequeño fichero de configuración "CONFIG.GPC".

Para que estén operativos los recursos gráficos, es necesario que en el momento de dibujar el sistema tenga acceso a este fichero de configuración y a los ficheros que contienen los "drivers" (extensión ".drv") y los "fonts" (extensión ".fnt"). Estos archivos pueden residir en el propio directorio de trabajo, o bien en un directorio aparte, habiéndose de definir en este caso la variable del sistema "GPC" con el nombre de dicho directorio (ej. "SET GPC = C:\DIMEDAR\DRV").

G.2.9 INSTALACIÓN

La instalación del sistema no requiere una configuración especial. Tan sólo habrá de tenerse en cuenta algunos aspectos básicos de funcionamiento del sistema:

- Se puede arrancar la aplicación desde cualquier punto del sistema de directorios, teniendo en cuenta que el programa intentará buscar en el directorio de arranque el fichero DIMEDAR_.CFG, creándolo en el caso de que no se encuentre.
- En dicho fichero de configuración general (DIMEDAR_.CFG) se especifica el directorio en el que se buscarán el resto de los ejecutables de la aplicación (partiendo del directorio actual en el caso de que la ruta que se especifique no sea absoluta).
- Las salidas gráficas requieren tener acceso a ciertos ficheros (CONFIG.GPC, ficheros con los "drivers", ficheros de "fonts", ...) que deberán residir en el fichero actual desde el que se ejecuta la aplicación, o bien en un directorio definido en la variable del sistema GPC.

La aplicación incluye un procedimiento de instalación automatizado (DMDINST) que se encarga de realizar de forma automática el volcado de la aplicación y ejecutables al disco duro. El usuario ha de proporcionar únicamente el nombre completo del directorio base en que se desea que resida la aplicación (por defecto se considera "C:\DIMEDAR"). El procedimiento chequea si existe ya dicho directorio (confirma antes de proseguir) o bien lo crea. A continuación se descomprimen y copian las diferentes partes de la aplicación sobre la siguiente estructura (Tabla G.21):

~	Directorio_Base ∖ :	Ejecutable principal (DIMEDAR.EXE), fichero de configuración general (DIMEDARCFG),fichero topográfico y fichero con datos meteorológicos
~	Directorio_Base\ FUENTES \ :	Códigos fuente de los diferentes módulos
~	Directorio_Base \ EXEC \ :	Ejecutables de los diferentes módulos de la aplicación (el "path" se indica en el fichero de configuración)
~	Directorio_Base \ UTILS \ :	Ficheros de configuración de la aplicación ("*.DMD")

Tabla G.21 Directorios que crea la aplicación DIMEDAR durante su instalación

~	Directorio_Base \ DRIVERS \ :	Ficheros con los "drivers", "fonts" y otros elementos de configuración de los
		recursos gráficos

Finalizada la instalación, el programa establece automáticamente la variable "*GPC=Directorio_Base\UTILS*" y la añade al fichero "AUTOEXEC.BAT" en el directorio raíz, a fin de que se mantenga en futuras ejecuciones. Puede que existan problemas para que la aplicación reconozca dicha variable si no se reinicia el sistema.

Finalmente se lanza el programa EQUIP para configuración de periféricos. Es imprescindible configurar al menos el monitor si se quiere que el módulo de presentaciones gráficas funcione correctamente en pantalla.

Relación de ficheros distribuidos

:\DIMEDAR_V7.0\ DMDINST.EXE

:\DIMEDAR_V7.0\ DIMEDAR.EXE, DIMEDAR1.pdf, DIMEDAR_.CFG, MET_.MET, TOPOG.DMD

:\DIMEDAR_V7.0\CFG\ CFGCLIM_.DMD, CFGGRAF_.DMD, CFGMESO_.DMD, DATCLIM_.DMD, DATGRAF_.DMD, DATMESO_.DMD, EMPCLIM_.DMD, EMPGRAF_.DMD, EMPMESO_.DMD

:\DIMEDAR_V7.0\DRIVERS\ 640X400.DRV, BJC800.DRV, BLOCK.FNT, CALCOMP.DRV, CANLBP.DRV, CANONBJ.DRV, CGA.DRV, CGM.DRV, COMPLEX.FNT, CONFIG.GPC, CONFIG.PEN, DGIS.DRV, EGAVGA.DRV, EPSON24.DRV, EPSONHI8.DRV, EQUIP.HLP, GEM.DRV, HERCULES.DRV, HPGL.DRV, LASERJET.DRV, MATRIX.FNT, MESSAGES.DAT, MESSAGES.TAB, OKI192.DRV, OKIDATA9.DRV, PAINTJET.DRV, PIC.DRV, PLOTTERS.DRV, POSTSCR.DRV, PRINTER1.PRN, PROWRITR.DRV, PRTR_SET.SCR, QUADLASR.DRV, SCODL.DRV, SIMPLEX.FNT, TECMARGM.DRV, TEK4696.DRV, THINKJET.DRV, TIFF.DRV, TIGA.DRV, TOSHIBA.DRV, TRIPLEX.FNT, VGA256.DRV

:\DIMEDAR_V7.0\EXEC\

DIMEDAR1.EXE, DMDCLIMA.EXE, DMDMESOP.EXE, DMDVEXTR.EXE, DMDVIEN1.EXE, DMDVIEN2.EXE, SECUENC.EXE, EQUIP.EXE, PLAY.EXE

:\DIMEDAR_V7.0\FUENTES\ DIMEDAR.C, DIMEDAR1.C, DMDCLIMA.FOR, DMDMESOP.FOR, DMDVEXTR.FOR, DMDVIEN1.FOR, DMDVIEN2.FOR

:\DIMEDAR_V7.0\UTILS\ EDAR.LOG, DIMEDAR.ICO, EDAR00.TPN, EDAR01.TOP, PATTERN.TKF

G.3 LIMITACIONES DE LA VERSION ACTUAL

Al hablar de las limitaciones de una herramienta como la que se describe en el presente trabajo, se pueden distinguir tres aspectos conceptualmente diferentes: las referidas al enfoque metodológico elegido (por ejemplo, optando por un modelo de bocanada frente a un modelo de penacho); las introducidas en el desarrollo concreto de la aplicación (por ejemplo, permitiendo un arrastre vertical de las emisiones por el campo de vientos o suponiendo sólo advección horizontal); y finalmente, las debidas al ajuste parcial del modelo (por ejemplo, tomando valores de ciertos parámetros procedentes de la literatura 0 bien ajustándolos experimentalmente en el entorno de aplicación).

De ellos, el primero y tercero competen al usuario final, en cuanto debe ser el que valore la adecuación del modelo a sus necesidades y la necesidad de adecuar el modelo a las mismas (mediante realización de calibraciones y análisis de sensibilidad).

Sólo nos referiremos a la segunda, en cuanto refleja aquellas limitaciones introducidas en el proceso de desarrollo y adaptación de los códigos. Cabe citar las siguientes como más importantes:

- Contempla una única fuente puntual o extensa en el caso climático.
- Realiza un control limitado de errores. En el caso del factor de emisión variable introducido cabría hacer también un control de posibles errores, como por ejemplo, que no tome valores negativos. Sin

embargo, no es crítico ya que los datos meteorológicos se preprocesan antes de introducirlos al modelo.

- Añadir otras prestaciones en las representaciones gráficas con GRAD's, como puede ser la posición de los "puffs", perfiles verticales de vientos a distancias de la fuente y algunas mejoras en las salidas gráficas. Debido a la gran versatilidad de GRAD's se podrán añadir en un futuro otro tipo de aplicaciones que proporcionen o complementen una mayor información sobre el impacto olfativo.
- La versión mesoescalar trabaja sobre una malla fija de 51 x 51 x 15 nodos (eje X, eje Y y eje Z respectivamente). Se pretende incorporar para próximas actualizaciones un aumento de la resolución, que incrementará la flexibilidad del modelo.
- No se contempla sobreelevación transicional en el caso del modelo mesoescalar.
- > La visualización de los campos es bidimensional.

G.4 OTRO MATERIAL

G.4.1 EJEMPLO DE FICHERO DE DATOS METEOROLÓGICOS PARA EL MODELO MESOESCALAR (con dos emplazamientos de medida en superficie)

2												
763.65 43	01.62 15.											
760.00 43	00.00 25.											
99060100	0.6 335.	12.0	150.	3 1.0	1.0	0.6 335.	12.0	150. 3	1.0	1.0	1.6 335.	2
99060101	0.2 300.	12.0	150.	3 1.0	1.0	0.2 300.	12.0	150. 3	1.0	1.0	1.2 300.	
99060102	1.0 281.	12.0	150.	3 1.0	1.0	1.0 281.	12.0	150. 3	1.0	1.0	2.0 281.	ŝ.
99060103	0.1 332.	12.0	150.	3 1.0	1.0	0.1 332.	12.0	150. 3	1.0	1.0	1.1 332.	2
99060104	0.1 332.	12.0	150.	3 1.0	1.0	0.1 332.	12.0	150. 3	1.0	1.0	1.1 332.	
99060105	0.6 335.	12.0	150.	3 1.0	1.0	0.6 335.	12.0	150. 3	1.0	1.0	1.6 335.	ä.
99060111	0.3 313.	12.0	150.	3 1.0	1.0	0.3 313.	12.0	150. 3	1.0	1.0	1.3 313.	
99060112	1.0 320.	12.0	150.	3 1.0	1.0	1.0 320.	12.0	150. 3	1.0	1.0	2.0 320.	ġ.
99060113	0.6 315.	12.0	150.	3 1.0	1.0	0.6 315.	12.0	150. 3	1.0	1.0	1.6 315.	8
99060114	0.5 318.	12.0	150.	3 1.0	1.0	0.5 318.	12.0	150. 3	1.0	1.0	1.5 318.	
							• • • • • • • •			••• •		
	1					1				1	1	ĺ
	59 1830		12521 (122)	120248	j	9). 10		1989/05/1987	193222	- 4	Second	ŝ
	Da	tos Empl	azamie	nto 1		E	atos Em	plazamie	nto 2	1	Datos Altura	а

Figura G.6 Fichero de datos meteorológicos suministrados por dos torres simultáneamente (Fuente: Aplicación DIMEDAR)

G.4.2 EJEMPLO DE FICHERO DE DATOS METEOROLÓGICOS PARA EL MODELO MESOESCALAR PARA EL CASO DE EMISIONES VARIABLES

2	01 62 15																
760.00 43	00.00 25.																
99060100	0.6 335.	12.0	150.	з	1.0	1.0	0.6	335.	12.0	150.	3	1.0	1.0	1.6	335.	0.5	
99060101	0.2 300.	12.0	150.	з	1.0	1.0	0.2	300.	12.0	150.	3	1.0	1.0	1.2	300.	0.5	
99060102	1.0 281.	12.0	150.	з	1.0	1.0	1.0	281.	12.0	150.	3	1.0	1.0	2.0	281.	0.5	
99060103	0.1 332.	12.0	150.	з	1.0	1.0	0.1	332.	12.0	150.	3	1.0	1.0	1.1	332.	0.5	
99060104	0.1 332.	12.0	150.	з	1.0	1.0	0.1	332.	12.0	150.	3	1.0	1.0	1.1	332.	0.5	
99060105	0.6 335.	12.0	150.	з	1.0	1.0	0.6	335.	12.0	150.	3	1.0	1.0	1.6	335.	1.5	i
99060111	0.3 313.	12.0	150.	з	1.0	1.0	0.3	313.	12.0	150.	3	1.0	1.0	1.3	313.	1.5	
99060112	1.0 320.	12.0	150.	3	1.0	1.0	1.0	320.	12.0	150.	3	1.0	1.0	2.0	320.	1.5	
99060113	0.6 315.	12.0	150.	з	1.0	1.0	0.6	315.	12.0	150.	3	1.0	1.0	1.6	315.	1.5	
99060114	0.5 318.	12.0	150.	3	1.0	.1.0	.0.5	318.	. 12.0	150.	. 3	1.0	1.0	1.5	318.	1.5	
				1.72		••••											
	•••••	• • • • • •	• • • • •	17.	• • • • •	••••	••••	•••••	•••••	• • • • •	••••	••••	••• •	•••••	•••	••••	
	1						/\						/	١		Λ	1
		Datos	Emplaz	am	iento 1			Ľ	atos Emp	olazam	ien	to 2	D	atos A	lltura	Fact em	or de isión

Figura G.7 Fichero de datos meteorológicos al que se le ha introducido una variación horaria en la emisión (Fuente: Aplicación DIMEDAR)

G.4.3 MENUS DE LA APLICACIÓN

Aplicación DIMEDAR – Ver 7.0 –– Fundación CEAM 10/07 – EMMI	

Figura G.8 Menú de inicio de la aplicación (Fuente: Aplicación DIMEDAR)
MODULO DE EJECUCION CLIMATICA	
 1) Edición Parámetros de Ejecución. 2) Edición Datos del Emplazamiento. 3) Edición Datos de Entrada. 4) Ejecución del Modelo (I). 5) Ejecución del Modelo (II). 6) Volver al Menú Principal. Elegir una Opción 	D I M E D A R
Aplicación DIMEDAR – Ver 7.0 –– Fundación CEAM 10/07 – EMMI	

Figura G.9 Menú de opciones del módulo climático (Fuente: Aplicación DIMEDAR)



Figura G.10 Menú de opciones del módulo mesoescalar (Fuente: Aplicación DIMEDAR)

MODULO DE SALIDAS GRAFICAS	
 1) Edición Parámetros de Entorno. 2) Edición Parámetros del Emplazamiento. 3) Edición Datos de Dibujo. 4) Inicialización de Periféricos. 5) Generación Salidas Gráficas. 6) Volver al Menú Principal. Elegir una Opción 	D I M E D A R
Aplicación DIMEDAR - Ver 7.0 Fundación CEAM 10/07 - EMMI	

Figura G.11 Menú de opciones del módulo de salidas gráficas (Fuente: Aplicación DIMEDAR)



Figura G.12 Menú de opciones complementarias (Fuente: Aplicación DIMEDAR)



Figura G.13 Final de la aplicación (Fuente: Aplicación DIMEDAR)

MATERIAL COMPLEMENTARIO H

Modelos preliminares de emisión variable para la estimación de tasas de emisión

Hoy los datos de la ciencia crecen con tal abundancia que hay que usar la inteligencia para ocultar la ignorancia

Salvador Euras Ribas (lectura de un volatín dedicado a la mano izquierda)

En las primeras etapas de desarrollo de la aplicación DIMEDAR, las tasas de emisión utilizadas por el modelo propuesto se habían considerado constantes, lo cual no es previsiblemente cierto, con lo que variaciones en la intensidad de las emisiones a lo largo del día conducirían a una distribución de las concentraciones según un patrón diferente al obtenido en un estado estacionario (respecto a las emisiones).

Por ello se optó por desarrollar una tasa de emisión capaz de variar a lo largo del día y en función de ciertos parámetros tanto ambientales como operacionales de la planta depuradora.

Con esta nueva adaptación del código se consiguió poder variar la tasa que emite la depuradora horariamente. La corrección consistió (como se comentó en el capítulo IV de la presente tesis) en la aplicación de un factor directamente proporcional a la tasa de emisión constante que se suministraba como parámetro de entrada al modelo.

Al poder ejecutar el modelo mediante una tasa con variabilidad horaria se planteó realizar un primer análisis de sensibilidad, evaluando las posibles variaciones que se introducirían en el entorno de las depuradoras al considerar distintas condiciones de emisión.

En el estudio de las tasas de emisión de una E.D.A.R se tuvo que tener en cuenta las variables que más pudieran afectar a dichas emisiones, siendo éstas una combinación de parámetros de la planta y parámetros ambientales. A la hora de la elección del factor de emisión se tuvo que ser cuidadoso, pues había que encontrar un factor que diera cuenta de los principales procesos de las estaciones de depuración de aguas residuales. De la experiencia adquirida en el estudio de procesos que tienen lugar en las estaciones de tratamiento de aguas residuales se detectaron que los principales focos susceptibles de emitir olor son por una parte, el pretratamiento de las aguas residuales de entrada, el bombeo de las aguas residuales, las operaciones de desbaste y desarenado y de desarenado-desengrasado.

Y por otra parte la línea de tratamiento de fangos y la concentración, estabilización, deshidratación y evacuación de éstos.

Otras operaciones susceptibles emitir sulfuro de hidrógeno (aunque en menor cantidad que las descritas anteriormente) son los decantadores primarios (declarados como potencial emisor de nivel medio); los decantadores biológicos (considerados emisores potenciales de nivel medio/bajo) y los decantadores secundarios (considerados emisores de nivel bajo).

Como paso previo para proponer dicho factor o factores de emisión con dependencia temporal, se estudiaron alguno de los procesos físicos que pudieran estar involucrados en la emisión de olor.

En una primera aproximación, se trató la generación de olor como un proceso físico de evaporación de los compuestos de interés (en este caso sulfuro de hidrógeno) desde el seno del medio líquido hacia la atmósfera. Partiendo de esta base se propuso como fase inicial, y a modo ilustrativo, la simulación de dos casos muy sencillos, consistentes respectivamente en una variación horaria del factor de forma correspondiente a una emisión preferente durante las horas centrales del día (emisión diurna), y a una emisión originada principalmente en las horas centrales de la noche (emisión nocturna).

Esta variación diurna/nocturna se consiguió utilizando una función escalón centrada en las horas centrales del día si se trataba de una emisión diurna o centrándola en las horas centrales de la noche si se quería hacer el estudio dando una mayor relevancia a una emisión nocturna.

El siguiente paso fue buscar una dependencia del factor de modulación de la tasa mediante parámetros ambientales. A este efecto se realizaron dos simulaciones más, una con un factor dependiente de la temperatura y otra posterior con un factor dependiente de la intensidad del viento. Es bien sabido que la tasa de evaporación, como proceso físico, depende fuertemente de la intensidad del viento, de la temperatura ambiente (en contraste con la temperatura del agua) y del grado de humedad (concentración en el aire de la especie tratada). Puesto que el grado de humedad en este caso se referiría al sulfuro de hidrógeno, y por tanto podría considerarse cero en todos los casos, serían la temperatura ambiente y la velocidad del viento los principales factores condicionantes del paso del sulfhídrico en disolución al medio atmosférico. La disponibilidad de medidas horarias de ambas magnitudes para el periodo de trabajo, propició la utilización de una función directa (proporcional) de ambas magnitudes como representación de la variación temporal de la tasa de emisión de la planta.

En último término se consideraron factores de emisión variable a partir de una combinación de magnitudes ambientales según diferentes esquemas de evaporación. Muchos de ellos condujeron a valores muy similares, por lo que se incluyeron sólo aquellos bien diferenciados.

En una segunda fase se propuso incluir factores que recogiesen la contribución debido a la operación de la planta (a través de alguna magnitud como caudal, disponibilidad de materia orgánica, temperatura del agua, etc.). La lenta variabilidad de estos parámetros (a veces días o semanas) hacía que el modelo "no sintiera" una gran influencia de estos parámetros en los cálculos, ello, unido a la dificultad de conseguir datos fiables de los explotadores de las estaciones de depuración de aguas residuales, hizo que esta línea de investigación se quedara en un segundo plano con un desarrollo posterior muy discreto, por lo que se centró prácticamente todos los esfuerzos en considerar modelos de emisión que tuvieran en cuenta solamente parámetros ambientales.

Al estudiar la variación horaria de la tasa de emisión en función de distintas teorías de evaporación se revisó gran parte de la bibliografía existente y trabajos actuales realizados por otros grupos de investigación (Martínez Álvarez et al., 2005; Winter et al., 1995; Meyer 1999).

En una primera revisión se desecharon los modelos de evaporación referentes a balances de energía. Ello fue debido a que dichos modelos aplican ecuaciones muy complicadas y necesitaban parámetros no disponibles con frecuencias y precisiones difíciles de conseguir de forma sistemática por lo que se incluía más incertidumbre y error en los resultados que hacía difícil evaluarlos de forma objetiva. Este tipo de modelos también fueron excluidos por motivos de variabilidad de los parámetros utilizados en dichas ecuaciones (del mismo modo que los referentes a parámetros de funcionamiento de la planta). Las simulaciones expuestas en el presente trabajo transcurren en periodos de 5-6 días por lo que parámetros que no tengan una variabilidad dentro de ese intervalo no afectarán en exceso a los resultados que se obtuviesen.

Otro tipo de teorías que se estuvieron barajando fueron los modelos de transferencia de masa, a priori mucho más precisos y específicos del compuesto. Por último se trabajó con ecuaciones semiempíricas. Tanto los modelos de transferencia de masa, como las ecuaciones semiempíricas no aportaron ningún parámetro ambiental que no estuviera ya incluido en el abanico de ecuaciones y métodos elegidos anteriormente ni un resultado mejor del obtenido hasta el momento.

H.1 PREPARACIÓN DE LOS FACTORES DE SIMULACIÓN

De acuerdo a los presupuestos anteriores, se realizaron las correspondientes ejecuciones para una campaña experimental (en concreto se tomó como ejemplo la campaña realizada en la EDAR del Grao de Castellón) y los diferentes esquemas de emisión considerados¹.

Se muestran en las siguientes figuras (Figura H.1, Figura H.2 y Figura H.3), los diferentes esquemas propuestos (Winter et al.,1995; Rosenberry et al., 2007; Donald et al., 2007) en comparación con las condiciones ambientales para dicho periodo.

¹ En las figuras se muestra la palabra QP (factor de emisión), seguido de un acrónimo que indica el esquema de emisión considerado. Así por ejemplo QP VEL, significaría el factor de emisión según un esquema de emisión directamente proporcional a la velocidad del viento.



Figura H.1 Diferentes factores de emisión para la realización de las ejecuciones para la campaña 1 en la depuradora de Castellón



Figura H.2 Factores de emisión usados en las ejecuciones para la primera campaña en la E.DA.R de Castellón



Figura H.3 Comparación de distintos factores de emisión

Por motivos de recursos se decidió lanzar sólo aquellas simulaciones que pudieran aportar información complementaria a las simulaciones ya realizadas.

En la Figura H.3 se observa que la onda de la intensidad del viento dada por la ecuación de Pasquill y el parámetro intensidad del viento tiene la misma forma y amplitud. Lo mismo sucede con las ecuaciones de De Bruin, Penman y Priestly-Taylor. Esto llevó a desechar previamente las ejecuciones con factores de emisión muy parecidos o que aportaran información redundante.

A este efecto, después de un primer análisis exhaustivo, se desecharon los factores de evaporación correspondientes a las ecuaciones de Pasquill, De Bruin y de Priestley-Taylor. También se desecharon algunos parámetros ambientales por la misma razón, estos fueron la radiación y la presión de vapor saturante.

Las ejecuciones que se realizaron finalmente correspondieron a los siguientes casos (Tabla H.1):

 Tabla H.1
 Esquemas de emisión que fueron finalmente simulados para la búsqueda de un modelo de emisiones variable

TIPO DE FACTOR	ESQUEMA DE EMISIÓN	
QP	Emisión constante	
QP DI URNA	Onda diurna	
QP NOCTURNA	Onda nocturna	
QP DI URNO AMPLIFICADO	Onda diurna amplificada	
Emisión en función de parámetros ambientales directos		
QP VEL	Intensidad del viento	
QP TEMP	temperatura	
Emisión en función de métodos de evaporación		
QP PENMAN	Ecuación de Penman (variación horaria)	
QP PAPADAKIS	Ecuación de Papadakis (variación diaria)	

H.2 MODELO DE EMISIÓN ELEGIDO: ECUACIÓN DE PENMAN PARA EVAPORACIÓN EN SUPERFICIES EXTENSAS

Finalizados los trabajos de simulación de los distintos esquemas propuestos, se optó por la utilización de la ecuación de Penman. Este método añade un término energético consistente que completa nuestra visión aerodinámica del problema.

La ecuación expuesta tiene unidades de milímetros/día de cantidad evaporada.

La ecuación H.1 resulta de la combinación de dos términos:

$$ETo = \frac{\left(\left(\frac{PCS}{PCS + sigma}\right)(Rn - G) + \left(\frac{sigma}{PCS + sigma}\right)f(u)(Eso - Esd)\right)}{L}$$

(Ecuación H.1)

El primer término de la ecuación es función de (Rn –G). Dicho valor representa la evaporación adicional debido a la energía entrante en la superficie. Donde Rn es la radiación total neta (W/m^2) y G es el flujo de calor en el suelo (W/m^2) .

Existe un segundo término en función $(E_{SO}-E_{sd})$, que nos representa la fracción de evaporación debida a parámetros ambientales. En donde E_{SO} es la presión de vapor saturante (mmbar) y E_{sd} la presión de vapor saturante diaria (mmbar).

La presente ecuación asume el hecho que la evaporación enfría la superficie; por tanto a temperaturas superficiales más bajas se reduce la evaporación.

Para el cálculo de los diferentes términos de la ecuación H.1, se emplearon las siguientes expresiones:

VAR ²	SIGNIFICADO	EXPRESIÓN	UNI D ³
L	Calor latente de vaporización	L=2,50025-0,002365*Tm	cal/g
PCS	Pendiente de la curva de saturación presión de vapor- temperatura	PCS=2504* exp[17,27*T _m /237,3+T _m)]/(237,3+T _m) ²	
Sigma	Constante psicométrica		
f(u)	Función del viento	f(u)=a'+b'(u)=17,8636+0,0440*u	m/s
Ed	Presión de vapor diaria actual	E _d =(RH/100)*0,611*exp(17,27*T/(T+237,3)	mmbar

 Tabla H.2
 Expresiones para el cálculo de las diferentes variables que aparecen en la ecuación de Penman modificada

² Var: variable

³ Unid: unidades

Eo	Presión de vapor diaria media a la temperatura media diaria	E _o =0,611*exp[17,27*T _m /(T _m +237,3)]	mmbar
T _{av}	Temperatura promedio de los tres días previos		° C
T _m	Temperatura media del día		° C

MATERIAL COMPLEMENTARIO I

Consideraciones teóricas modelo DIODISP

Comprender las cosas que nos rodean es la mejor preparación para comprender las cosas que hay más allá

Hipatía (370-415)

I.1 ALGORITMOS DE DISPERSIÓN

Podría situarse el arranque del estudio de la dispersión atmosférica en los trabajos de G. I. Taylor de principios del siglo XX, en los que se analizaba la redistribución del calor en una corriente fluida.

Surge así el concepto de difusión por un movimiento continuo, sugiriéndose que la posición final de una partícula elemental emitida en un medio turbulento podría determinarse a partir del conocimiento de las velocidades turbulentas actuantes sobre la misma en su desplazamiento desde el punto de origen hasta su destino.

De esta forma, el conocimiento de las propiedades estadísticas del estado turbulento atmosférico actual podría ser utilizado para reproducir la evolución temporal de las concentraciones de una especie gaseosa liberada a la atmósfera.

Ya desde los primeros experimentos se puso de manifiesto la tendencia a una distribución gaussiana de las concentraciones a lo largo de los cortes transversales a diferentes distancias (viento abajo) del punto de emisión.

No obstante, no existe un modelo físico que describa de manera exclusiva los procesos difusivos en la atmósfera.

Cualquier formulación deberá respetar que las concentraciones sean proporcionales a la tasa de emisión del foco e inversamente proporcionales a la velocidad media. El modelo también habrá de incluir una función que refleje el grado de mezcla atmosférica (como medida de la turbulencia). Dado que la difusión turbulenta es un proceso aleatorio pueden aplicarse los principios de la teoría estadística de la turbulencia atmosférica, de manera que los procesos turbulentos pueden describirse mediante una función de distribución con ciertas características estadísticas. Así, la concentración de una especie viene descrita por una expresión del tipo (Ecuación I.1):

$$\bar{C} = \frac{Q}{\bar{u}}(DF)$$
 (Ecuación I.1)

Donde

$$\begin{split} \bar{C} &= \text{Concentración promedio (g)} \\ \text{Q} &= \text{Tasa de emisión de la fuente (g/s)} \\ \bar{u} &= \text{Velocidad media del viento (m/s)} \\ (DF) &= \text{Función de distribución (de acuerdo a los principios} \\ & \text{de la teoría estadística de la turbulencia (m)} \end{split}$$

En cada caso la función '(DF)' puede adoptar la forma que más se ajusta a la realidad física en concreto. Una restricción habitual consiste en que DF sea una función explícita de la dirección transversal del viento (habitualmente representada por el eje 'y') y de la vertical (eje 'z'), y solo una función implícita de la distancia viento abajo (habitualmente representada por el eje 'x') (Ecuación 1.2).

$$\bar{C} = \frac{Q}{\bar{u}} [D(y)F(z)] \qquad (\text{Ecuación I.2})$$

Para el caso de un foco puntual continuo (Ecuación I.3) se puede asumir que tanto D(y) y F(z) se distribuyen según sendas funciones gaussianas (Figura I.1):

$$\bar{C} = \frac{Q}{2\pi\bar{u}\sigma_y\sigma_z} exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2 + \left(\frac{z-z_0}{\sigma_z}\right)^2\right]\right\}$$
(Ecuación I.3)

Donde

z₀ = Altura efectiva de emisión





Figura I.1 Modelo general del esquema de dispersión gaussiana (en la figura para una emisión continua y elevada). Fuente: Turner, 1970

En su desplazamiento y difusión, las emisiones desde cierta altura alcanzarán eventualmente el suelo, que constituirá una barrera para el proceso dispersivo. Entendiendo que no se debe producir una pérdida de masa (no se introduce aún el concepto de deposición) habitualmente esta situación se gestiona suponiendo que la masa "rebota" sobre el terreno.

Formalmente es lo mismo que suponer una fuente virtual, con las mismas características que la real, pero situada por debajo del terreno, en una imagen especular. En cada punto, la concentración será la debida a ambos focos (Ecuación I.4).

$$\bar{C} = \frac{Q}{2\pi\bar{u}\sigma_y\sigma_z} exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \left\{ exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H}{\sigma_z}\right)^2\right] + exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\sigma_z}\right)^2\right] \right\}$$
(Equation 1.4)

La formulación gaussiana de la dispersión resulta atractiva por su simplicidad y fácil implementación en los modelos numéricos, ajustándose al comportamiento estocástico de los procesos atmosféricos, a la vez que se ajusta aceptablemente a las evidencias experimentales.

En su defecto presenta la exigencia de tiempos y distancias mínimas (desde el momento y punto de emisión) para su aplicación, así como la dificultad para representar los procesos turbulentos. Tampoco se gestionan bien con este esquema la presencia de cizalladuras intensas en el terreno, situaciones de calma, la topografía compleja, los obstáculos del terreno o las fuentes extensas.

I.2 PARÁMETROS DISPERSIVOS

Los focos más habitualmente considerados en los estudios de dispersión se refieren a fuentes puntuales instantáneas y fuentes puntuales continuas.

El primero de los casos se refiere emisiones de corta duración (bocanadas), aunque con dimensión naturalmente finita. En su desplazamiento, esta emisión individualizada se va dispersando bajo la influencia de las perturbaciones turbulentas características de la atmósfera en ese momento.

En caso de que los remolinos sean en general pequeños respecto al de la muestra, esta se irá dispersando uniformemente, haciéndose más grande a medida que se produce una mezcla con el aire del entorno a través de sus bordes.

Si los remolinos turbulentos resultan ser por el contrario muy grandes, la bocanada experimentará un transporte siguiendo una trayectoria ondulada determinada por la sucesión de estos remolinos, pero la dilución neta no será muy importante.

Si el tamaño de la turbulencia es del mismo orden que la emisión, la bocanada será a la vez transportada y deformada.

En la atmósfera real, una emisión estará siempre sometida a la presencia de remolinos de tamaño inferior al de la nube, y por tanto sometida a procesos de dispersión turbulenta.

Una fuente continua emite un penacho que puede considerarse como una sucesión de un número infinito de

bocanadas emitidas sucesivamente a intervalos también infinitesimalmente cortos.

Las dimensiones del penacho perpendicularmente a la dirección de su propio eje se determinan habitualmente mediante la desviación estándar (típica) de la distribución de la concentración media (y que como se ha señalado anteriormente se ajustan aceptablemente a una forma gaussiana).

De manera instantánea la distribución de un penacho presenta un patrón tortuoso, que se va ensanchando al alejarse de la fuente. Para tiempos medios más largos la imagen se va suavizando.

No obstante, a distancia crecientes del foco los remolinos resultan cada vez más grandes, por lo que la pluma no llega a adquirir una distribución suavizada más que para tiempos grandes de promedio.

De manera análoga a lo que se comentó para el caso de una emisión puntual, los remolinos de tamaño superior al del penacho tienden a transportar este intacto, mientras que los más pequeños tienden a dispersarlo.

A medida que el penacho se ensancha, también son los remolinos más grandes los más eficaces en la dispersión del mismo.

También la concentración central va disminuyendo con la distancia recorrida, con una tasa de decaimiento que depende de las condiciones atmosféricas (perfil de velocidades y estabilidad atmosférica).

La mayor parte del estudio teórico de penachos basados en la teoría de Gauss ha girado en torno a la expresión funcional correcta de las sigmas, en dependencia de la distancia viento abajo de la fuente, de manera que resultados numéricos y medidas experimentales de concentración en suelo se ajustasen.

En el esquema gaussiano, los parámetros σ_y y σ_z son los que incorporan el efecto de la mezcla turbulenta en la difusión de las emisiones (controlan la "apertura" del penacho).

En ausencia de medidas directas de la turbulencia (complejas y costosas), las investigaciones se han dirigido a la determinación de dependencias respecto a la estabilidad atmosférica.

Surgen de esta manera diferentes clasificaciones del grado de estabilidad, a partir de medidas experimentales simples (y en muchas ocasiones rutinarias). Desde los trabajos iniciales de Pasquill, y posteriormente refinados por Turner, se ha estandarizado una clasificación de la estabilidad atmosférica en seis clases (de la 'A' a la 'F', de más inestable a más estable), para cuya determinación existen a su vez diferentes esquemas o procedimientos.

Una primera aproximación consiste en la utilización directa de las sigmas de las medidas de velocidad horizontal y vertical (σ_x y σ_w) como medidas de la turbulencia. Otros esquemas utilizan el gradiente vertical ($\Delta T/\Delta z$) como medida de la estabilidad, o bien el número de Richardson (R_i) o la longitud de Monin-Obukov (L), estos últimos algo más complejos, en los que se incluyen tanto factores determinantes de turbulencia mecánica como relativos a las fuerzas de flotación.

El uso de las clases de estabilidad para parametrizar la difusión debido a la turbulencia atmosférica está aun ampliamente extendido en los modelos numéricos, debido posiblemente a la sencillez de implementación y a la facilidad de resolver mediante información habitual y rutinaria.

No obstante, un tratamiento más representativo de la dispersión turbulenta en la atmósfera debería contemplar un esquema en el que se incluyese:

• El parámetro de rugosidad (z_0) y la velocidad de fricción (u^*), como medidas de la turbulencia de origen mecánico.

- La altura de la capa de mezcla (h_x) , la longitud de Monin-Obukov (L) y/o el flujo de calor (H), como medida de la turbulencia convectiva.

•La velocidad del viento (v) y las fluctuaciones (σ_{ϑ}) de la dirección como medidas de la advección y de la apertura transversal de las emisiones (σ_y).

Algunas experiencias realizadas en los años 50/60 han dado base a la gran mayoría de esquemas para el cálculo de σ_y y σ_z en función de la distancia a la fuente viento abajo ('x').

Uno de los modelos más ampliamente utilizados se debe a Briggs, quien propone el conjunto de ecuaciones de la Tabla 1.1 para la estimación de las correspondientes sigmas.

Clase de estabilida d	σ _y (m)	σ _z (m)		
Entorno rural				
А	0,22x(1+0,0001x) ^{-1/2}	0,20x		
В	0,16x(1+0,0001x) ^{-1/2}	0,12x		
С	0,11x(1+0,0001x) ^{-1/2}	0,08x(1+0,0002) ^{-1/2}		
D	0,08x(1+0,0001x) ^{-1/2}	0,06x(1+0,0015) ^{-1/2}		
E	0,06x(1+0,0001x) ^{-1/2}	0,03x(1+0,0003) ^{-1/2}		
F	0,04x(1+0,0001x) ^{-1/2}	0,016x(1+0,0003) ⁻¹		
Entorno urbano				
A-B	0,32x(1+0,0004x) ^{-1/2}	0,24x(1+0,0001x) ^{-1/2}		
С	$0,22x(1+0,0004x)^{-1/2}$	0,20x		
D	0,16x(1+0,0004x) ^{-1/2}	0,14x(1+0,0003x) ^{-1/2}		
E-F	0,11x(1+0,0004x) ^{-1/2}	0,08x(1+0,00015x) ^{-1/2}		

Tabla I.1 Formulas recomendadas por Briggs para el cálculo de $\sigma_y(x)$ y $\sigma_z(x)$ para distancias entre 100 metros y 10 kilómetros

Para situaciones de terreno complejo los valores de las sigmas presentan un grado adicional de complejidad, y en general se apartan de las fórmulas propuestas para terreno llano, que parecen infravalorar las cantidades reales en un factor del orden de 2 a 10.

A pesar de que resulta recomendable el uso medidas directas de la turbulencia atmosférica para estimar la difusión, las clases de estabilidad son aún muy utilizadas en la evaluación de la capacidad dispersiva de la atmósfera.

I.2.1 EFECTOS AERODINÁMICOS

Cuando los puntos de emisión de los efluentes se encuentran a poca altura respecto el tamaño de obstáculos próximos (por ejemplo en el caso de emisiones superficiales), los patrones de dispersión se pueden ver fuertemente modificados por influencia de aquellos. Los efectos aerodinámicos debido a la presencia de obstáculos producen una separación del flujo general, afectando a la pluma de contaminantes en dos sentidos. Por un lado, al modificar las líneas de corriente varía las trayectorias de las especies transportadas. Por otro lado, se intensifican los procesos de mezcla turbulenta en los remolinos generados a sotavento de la barrera (Figura 1.2).

La separación de flujos en torno a elementos insertos en una corriente fluida, generando diferentes capas límite, viene controlado tanto por la geometría del objeto (en cuyo caso las perturbaciones suelen mostrar patrones estacionarios en torno al mismo) como por la aerodinámica (con lo que se producen variaciones a la vez que varían las características del caudal general).

En un modelo clásico, la perturbación incluye una zona de desplazamiento viento arriba en la que la corriente comienza a ser modificada por la presencia del obstáculo, de manera que las trayectorias tratan de superar el mismo tanto por arriba como por los lados, registrándose variaciones en la velocidad y dirección del movimiento. Al aproximarse al obstáculo se produce una disminución de la velocidad, aumentando la presión, más intensamente con la altura, lo que provoca una componente neta hacia abajo del viento delante del obstáculo. Ello fuerza a parte del flujo a escapar lateralmente, formándose remolinos en la parte inferior del frontal, que se propagan por los lados hacia sotavento. La presencia del obstáculo genera unas capas límite insertadas en la corriente fluida, que se dejan sentir en forma de estela hasta cierta distancia a sotavento del mismo, introduciendo una fuerte cizalladura en las propiedades del flujo.



Figura 1.2 Ejemplo de diferentes tipos de distorsiones en el flujo ocasionados por un obstáculo sobre una corriente (en el presente caso por un edificio rectangular), en un corte bidimensional (arriba) y en una imagen en tres dimensiones (abajo). Fuente: Hosker, 1979

Dependiendo de la longitud y geometría del obstáculo se puede producir un reajuste de la circulación a lo largo de su contorno, con una separación de flujos en la parte trasera del mismo, con la eventual aparición de una zona de recirculación desacoplada de la corriente general. A sotavento se manifiesta así una región depresionaria, con una elevada intensidad turbulenta, vientos más flojos y en general tiempos de residencia mayores de las partículas fluidas. Entre esta región límite en torno al objeto físico y la corriente general que se ve obligada a desviar su trayectoria en torno al mismo, se establece una interacción continuada, con intercambio de materia (entrañamiento), que se traduce en fluctuaciones en la onda de cavitación. En general los formulismos que describen su alcance y desarrollo presuponen condiciones estacionarias.

Para un obstáculo de dimensiones 'H' (altura), 'L' (anchura longitudinal al viento) y 'W' (anchura transversal), el tamaño máximo ' x_r ' de la perturbación vendría dado por ecuaciones del tipo siguiente (en el caso de obstáculos alargados, es decir, el ratio $L/H \ge 2$) (Ecuación 1.5).

$$\frac{x_r}{H} = \frac{L}{H} + \frac{A\left(\frac{W}{H}\right)}{1 + B\left(\frac{W}{H}\right)}$$
(Ecuación I.5)

Siendo 'A()' y 'B()' funciones del tipo (Ecuación I.6) y (Ecuación I.7) :

$$A = -2 + 3.7 \left(\frac{L}{H}\right)^{\frac{1}{3}}$$
 (Ecuación I.6)

$$B = -0.15 + 0.305 \left(\frac{L}{H}\right)^{\frac{1}{3}}$$
 (Ecuación I.7)

Para el caso de edificios altos, la perturbación es independiente de la razón 'L/H', representándose por la Ecuación 1.8.

$$\frac{2x_r}{H} = \frac{1.75 \left(\frac{W}{H}\right)}{1+0.25 \left(\frac{W}{H}\right)}$$
(Ecuación I.8)

La extensión transversal '*yr*' de la perturbación viene representada por la Ecuación I.9.

$$\frac{2y_r}{W} = 1,1 + 1,7 \exp\left(-0,55\frac{W}{H}\right)$$
 (Ecuación I.9)

De manera similar, la máxima altura de la perturbación 'zr' de la perturbación viene representada por una expresión del tipo (Ecuación I.10):

$$\frac{2z_r}{W} = 1 + 1,6exp\left(-1,3\frac{L}{H}\right) \quad (\text{Ecuación I.10})$$

Una consecuencia de la formación de esta región depresionaria a sotavento de un obstáculo es el efecto de succión que se produce sobre el flujo, y que en el caso de la dispersión de contaminantes conduce al fenómeno denominado como "*downwash*".

La interacción con un obstáculo contribuye por lo tanto a aumentar la mezcla atmosférica en sus alrededores, que localmente conducen a un incremento de la concentración junto al suelo debido a los efectos aerodinámicos (resulta especialmente evidente en el caso de emisiones por una chimenea elevada, en que bajo vientos intensos los efluentes ven reducida la altura efectiva de emisión).

Como regla general se evitará el tumbamiento de las emisiones debido a la estela de la chimenea si la velocidad de salida de los gases (V_s) supera a la del viento medio (\overline{u}) en un factor 1.5 (Ecuación I.11).

$$V_s \ge 1,5\overline{u}$$
 (Ecuación I.11)

De manera equivalente, para evitar que las emisiones sean atrapadas en la estela de un edificio, la altura efectiva de salida debe ser al menos 2/3 de la altura del edificio (A) para evitar su atrapamiento en el remolino delantero, mientras que deberá producirse a unos 2,5 la altura del obstáculo (B) para que no se vea afectada por la perturbación introducida (Ecuación I.12 y VIII.13)

$$h_s < \frac{2}{3}h_b$$
 (A) (Ecuación I.12)

$$h_s < 2,5h_b$$
 (B) (Ecuación I.13)

Experimentos de laboratorio muestran una modificación de las concentraciones (Ecuación I.14) dentro de la estela del obstáculo que se ajustaría a la siguiente dependencia con el viento (\bar{u}) y el área eficaz del obstáculo (A_p)

$$\bar{C} = \frac{KQ}{\bar{u}A_P} \quad (\text{Ecuación I.14})$$

con valores típicos de 'K' en el rango de 10 a 100 sobre la superficie del techo y entre 0,2 y 2 dentro de la región de cavitación.

Para emisiones no completamente atrapadas en la estela, la expresión gaussiana se ve modificada (Ecuación 1.15) en los siguientes términos (expresión para el caso del eje del penacho y altura superficial)

$$\bar{C} = \frac{Q}{\bar{u}(\pi\sigma_y\sigma_z + cWH)}$$
 (Ecuación I.15)

con el parámetro '*c*' en un rango típico de 0,5 a 2, y donde las correspondientes sigmas (σ_y , σ_z) necesitarían ajustarse a la realidad de la dispersión en el seno de una estela.

Para emisiones a sotavento del obstáculo, algunos trabajos afirman que no es esperable una perturbación significativa de la difusión si la emisión se produce a distancias superiores a ' 3δ ' (donde ' $\delta = min(H, W)$ ').

A distancias menores, la eficacia de la mezcla dependerá de la altura sobre el suelo y la intensidad turbulenta (a través de la constante 'c' de la expresión anterior).

I.2.2 TOPOGRAFÍA COMPLEJA

El terreno complejo distorsiona tanto la trayectoria como la difusión de una masa de efluentes, con consecuencias sobre la intensidad del impacto superficial.

En general se pueden identificar efectos que contribuirían tanto al incremento como a la disminución de las concentraciones. Entre los primeros cabría destacar:

- La reducción de la altura efectiva respecto al suelo del penacho, lo que puede incrementar sensiblemente las concentraciones por intercepción del terreno.
- La posibilidad de separación de flujos, con la posible ocurrencia de situaciones de estancamiento al abrigo de los valles.

Entre los factores que contribuirían a moderar los niveles de concentración superficiales:

- El aumento importante de la difusión turbulenta (y por tanto de la mezcla de las emisiones).
- La tendencia del flujo atmosférico a bordear los obstáculos, ajustándose a la orografía del terreno, lo que reduce el impacto directo sobre los accidentes montañosos.

En todo caso, la modificación de los patrones de flujo en presencia de terreno complejo requiere una comprensión específica en cada situación, que puede alterar drásticamente las predicciones cuantitativas de cualquier modelo de dispersión.

Estudios experimentales han reportado incrementos de la desviación típica de la dirección en un factor de más de 2,5, con valores superiores durante situaciones de vientos flojos y condiciones estables (nocturnas), precisamente debido a este efecto orográfico.

Posiblemente el mayor efecto de la topografía vendría por la distorsión de las trayectorias y la intensidad del viento en las capas superficiales, que perturbaría el patrón de impactos de la pluma de contaminantes respecto a una situación de terreno llano.

Este efecto es más importante cuando el flujo está estratificado, apareciendo fenómenos de bloqueo, ondas de sotavento, rotores y estelas entre los elementos perturbadores.

En este punto se suele utilizar el número de Froude como parámetro para determinar el grado de estabilidad atmosférica. Se trata de un parámetro adimensional, en el que se tienen en cuenta el equilibrio entre las fuerzas de inercia y las de flotación. El número de Froude viene definido mediante la (Ecuación I.16).

$$F_r = rac{U}{NH}$$
 (Ecuación I.16)

donde 'U' representa la velocidad del viento no perturbada, 'H' la altura del obstáculo y 'N' es la frecuencia de Brunt-Väisälä, que representa la frecuencia natural de oscilación de un paquete fluido desplazado verticalmente desde su posición de equilibrio, debido a las fuerzas de flotación, definida como (' θ ' es la temperatura potencial) (Ecuación I.17).

$$N = \frac{g}{T} \left(\frac{\partial \theta}{\partial z}\right)^{1/2} \quad \text{(Ecuación I.17)}$$

Una de las consecuencias de emisiones en terreno complejo es la reducción en la altura efectiva de la pluma de contaminantes (*h*), que oscilaría entre '*h*_t-*H*', en el caso de que el flujo no experimente ninguna deflexión al paso sobre el obstáculo, o '*h*_t+*H*', en el caso de que se adapte perfectamente a su contorno (siendo '*h*_t' y '*H*' la altura de sobreelevación del penacho y la del obstáculo respectivamente).

Se sugiere que esta reducción de la altura efectiva debería ser la correspondiente al menor valor entre '*H*' y ' $h_t/2$ ' (en algunos casos se utiliza también el valor de '*H*/2' en lugar de '*H*'), dependiendo siempre de la estabilidad atmosférica.

En todo caso el efecto es el de un incremento de las concentraciones junto al suelo sobre la superficie de un terreno elevado.

Otro aspecto a tener en cuenta es la presencia de elementos orográficos viento arriba del foco.

Una pendiente pronunciada puede estimular el hundimiento de las emisiones ('downwash'), y en caso de tratarse de un corte abrupto, aquellas podrían quedar atrapadas en el vórtice desacoplado de sotavento.

En ocasiones se utiliza el artificio de la reflexión (fuente virtual) para modelizar la intensificación de las concentraciones en terreno complejo.

En el caso de la difusión en valles, esta se empieza a ver limitada para anchuras (*W*) del orden de $2\sigma_v$.

En condiciones de estabilidad (por ejemplo durante la noche) las emisiones pueden llenar la cuenca del valle, de manera que las máximas concentraciones registradas sobre sus paredes vendrían dadas por la (Ecuación 1.18).

$$C = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{Q}{\sigma_z uW} \quad \text{(Ecuación I.18)}$$

Durante la mañana la fumigación de los estratos estancados a cierta altura sobre el valle van incrementando las concentraciones junto al suelo a medida que se desarrolla la capa de mezcla por calentamiento. Las concentraciones alcanzan valores máximos que se reflejarían en la Ecuación I.19 (siendo '*h*' la altura del estrato sobre el fondo del valle y las condiciones prevalecientes durante la noche).

$$C = \frac{Q}{huW}$$
 (Ecuación I.19)

I.2.3 MECANISMOS DE ELIMINACIÓN

Los contaminantes atmosféricos son eliminados de la atmósfera a partir de diferentes mecanismos, siendo transportados hacia la superficie terrestre, acuosa y/o vegetal, o bien transformándose químicamente en otros compuestos.

A su vez la transferencia neta hacia otros medios puede realizarse por vía seca o bien húmeda, a través de la precipitación e interacción con las gotas de agua de las nubes.

En el caso del material particulado, aquellas partículas con radios (*r*) por encima de los cinco micrómetros presentan velocidades de deposición gravitacionales importantes, siendo este el mecanismo de eliminación preferente.

Para partículas típicamente entre 10 y 30 micrómetros ' V_t ' representa la velocidad terminal, dependiendo de la densidad y características del aire (Ecuación I.20).

$$V_t = \frac{2r^2g\rho_p}{9\mu}$$
 (Ecuación I.20)

donde ' ρ_p ' es la densidad de la partícula, ' μ ' la viscosidad dinámica del aire.

Cuando $V_t > 100 \text{ cm/s}$ (ó $r > 100 \mu m$) la influencia de la turbulencia es menor y la trayectoria de las partículas responde a un tiro balístico.

 $V_t < 100 \text{ cm/s}, C_t = f(C(x, y, 0)), \text{ que representa la masa de contaminante depositada por unidad de superficie y tiempo (donde 'C' sería la concentración ambiente).$

Bajo este comportamiento, un penacho de partículas se ve desviado hacia abajo, con la altura (h) de su eje que se comporta como se describe en la Ecuación I.21.

$$h = h_0 - x \frac{V_t}{u}$$
 (Ecuación I.21)

Siendo 'V_t' la velocidad de deposición, 'u' el viento horizontal, 'h' la altura efectiva de emisión y 'x' la distancia al foco.

Para una distancia a la fuente igual a $h_0 \frac{u}{v_t}$ aproximadamente la mitad de las partículas habrían sido eliminadas.

Las partículas muy pequeñas y los gases se depositan como consecuencia de la difusión turbulenta y movimiento browniano, que provocan impactos sobre las superficies en las que por alguna razón quedan retenidos.

La velocidad de deposición seca (V_d) suele formularse en función de una tasa de deposición empírica (w), con la concentración (C_0) típicamente medida a un metro (Ecuación 1.22).

$$V_d = \frac{w}{c_0}$$
 (Ecuación I.22)

Una forma de incorporar la deposición a un modelo gaussiano es permitir que el término fuente varíe (disminuya) con la distancia (Ecuación 1.23), de manera que se puede escribir como:

$$\frac{\partial Q}{\partial x} = \int_{-\infty}^{\infty} w(x, y) dy = -\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{V_d Q}{u\sigma_z} e^{\frac{-h^2}{2\sigma_z^2}} \quad (\text{Ecuación I.23})$$

lo que conduce a la expresión (Ecuación 1.24).

$$Q(x) = Q(0) \left[exp\left(\int_0^x \frac{dz}{\sigma_z \exp\left(\frac{h^2}{2\sigma_z^2}\right)} \right) \right]^{-\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{V_d}{u}\right)}$$

(Ecuación I.24)

que proporciona una dependencia del decaimiento de la tasa de emisión inicial con la distancia longitudinal al foco (x), en función de las condiciones atmosféricas (introducidas a través de la formulación de ' σ_z ').

El valor de 'Q(x)' estimado por la anterior fórmula es el incorporado a la expresión de la dispersión gaussiana, en lugar del término habitualmente constante 'Q'.

Existen otras formas de introducir el efecto de la deposición seca. Una segunda opción es la llamada "*reflexión parcial*", en la que el término reflejado de la ecuación gaussiana es afectado por un coeficiente $\alpha(x_G)$ que determina la porción eliminada por deposición (Ecuación 1.25):



(Ecuación I.25)

donde se incorpora también la opción de deposición gravitacional a través de la velocidad V_t . El factor de decaimiento viene expresado por la Ecuación I.26.

$$\alpha(x) = 1 - \frac{2V_d}{V_t + V_d + (uh - xV_t)\sigma_z^2 \left(\frac{d\sigma_z}{dx}\right)}$$

(Ecuación I.26)

El modelo anterior elimina materia de la parte inferior del penacho debido a la deposición seca, a la vez que dobla su eje hacia el suelo debido al efecto de la velocidad terminal.

En todos los casos el conocimiento de esta velocidad de deposición seca (V_d) es fundamental para la incorporación al modelo, obteniéndose de manera experimental o bien teórica.

Una formulación muy extendida para su cálculo consiste en aplicar una analogía con el comportamiento de la corriente eléctrica a su paso a través de una resistencia.

De esta forma, la velocidad de deposición resulta inversamente proporcional a la suma de las diferentes resistencias que presenta el proceso dispersivo para su transferencia a lo largo de los diferentes medios.

la deposición En caso de húmeda, el aunque conceptualmente se distingue entre eliminación en la nube ('rainout'), por efecto de la presencia de gotas de agua, y eliminación por lavado ('washout'), debido al efecto de precipitación, durante un episodio de arrastre su tratamiento suele formularse conjuntamente.

Una simulación simple considera un decaimiento exponencial de las concentraciones con el tiempo 't' desde que se inicia la Iluvia (Ecuación 1.27)

$$C(t) = C(0)e^{-\delta t}$$
 (Ecuación I.27)

donde ' δ ' es el coeficiente de lavado.

De acuerdo a este proceso, se establece un flujo neto de masa eliminada que viene representado por Ecuación 1.28.

$$F_h = \int_0^{z_h} \delta C dz$$
 (Ecuación I.28)

donde $'Z_h'$ es el espesor del penacho bajo la acción del lavado. Para el caso de que toda la pluma gaussiana esté siendo sometida a este proceso de eliminación, el flujo de masa (Ecuación I.29)

$$F_{h} = \frac{\delta Q}{(2\pi)^{\frac{1}{2}} \sigma_{y} u} exp\left(-\frac{y^{2}}{2\sigma_{y}^{2}}\right) \quad \text{(Ecuación I.29)}$$

Parte de las dificultades del método se direccionan hacia la aplicabilidad del coeficiente ' δ ' para las diferentes especies y condiciones.

Presenta una dependencia con el tamaño de las gotitas de la nube, de las propiedades físico-químicas de las partículas o del gas efluente y, en general, de la intensidad de la precipitación.

Una formulación alternativa a la deposición húmeda se formula (Ecuación 1.30) mediante los llamados ratios de lavado (W_r), definido como la razón entre la concentración de efluente presente en la lluvia (k_0) y en el aire ambiente (C_0).

$$W_r = \frac{k_0}{C_0}$$
 (Ecuación I.30)

Pudiendo definirse un flujo de deposición (Ecuación I.31) en función de la propia intensidad de la lluvia (' J_0 ' en mm/h).

$$F_h = k_0 J_0 = C_o W_r J_0$$
 (Ecuación I.31)

Ello permite definir una velocidad de deposición húmeda (V_h) , de manera similar a como se hizo con la seca (Ecuación 1.32),

$$V_h = W_r J_o$$
 (Ecuación I.32)

con lo que puede utilizarse, por similitud, en los mismos esquemas de eliminación presentados anteriormente.

Otra forma de que ciertos compuestos emitidos directamente a la atmósfera (primarios) sean eliminados de la misma es mediante su transformación química en otras especies (contaminantes secundarios).

Con frecuencia se asume un modelo de deposición química (Ecuación 1.33) en el que la concentración decae de manera exponencial con el tiempo.

$$\frac{C(t)}{C(0)} = e^{-t/T_c ln2} \quad (\text{Ecuación I.33})$$

donde ' T_c ' representa la vida media del compuesto , siendo ' $T_c ln2$ ' el tiempo necesario para que la concentración inicial se reduzca a la mitad.

Una formulación más ajustada a la realidad de las transformaciones químicas se puede obtener a partir de las velocidades cinéticas de reacción (k_i) para el conjunto de reacciones involucradas en la conversión.

Este tratamiento resulta especialmente apropiado en el caso del *smog fotoquímico*, en donde llegan a intervenir decenas de transformaciones químicas.

I.3 MODELOS NO GAUSSIANOS

Otras formulaciones se han presentado como alternativa al modelo gaussiano, entre las que cabe destacar la teoría estadística de la dispersión, los modelos de similitud y la teoría K.

Modelos estadísticos

Los *modelos estadísticos* surgen del hecho de que la difusión turbulenta tiene una fuerte componente aleatoria, de manera que la trayectoria de una partícula fluida podría ser descrita por una función estocástica.

Si el movimiento fuese puramente aleatorio (los paquetes fluidos en cada momento se desplazarían al azar, sin ninguna dependencia de estados anteriores) un simple modelo de difusión estocástica (de tipo 'Monte Carlo') sería suficiente para describir el comportamiento del sistema (este es el caso de la difusión molecular).

Sin embargo, esta aproximación no es válida para la difusión atmosférica (dominada por procesos turbulentos en los

estratos superficiales) en la que la velocidad turbulenta v'(t) para un tiempo dado está fuertemente correlacionada con la velocidad en un tiempo ' $\Delta t'$ posterior $v'(t+\Delta t)$ para intervalos inferiores a varios minutos (en el caso de márgenes muy pequeños v'(t) y $v'(t+\Delta t)$ son prácticamente idénticas).

Se introduce así, como medida de esta dependencia, un coeficiente de autocorrelación (Ecuación 1.34).

$$R(\Delta t) = \frac{\overline{v'(t)v'(t+\Delta t)}}{\sigma_v^2}$$
 (Ecuación I.34)

donde la barra indica promedio.

El comportamiento de la función de autocorrelación viene dado por la Ecuación 1.35 y la Ecuación 1.36.

$$R(\Delta t) \xrightarrow{\Delta t \to 0} 1 \quad (\text{Ecuación I.35})$$
$$R(\Delta t) \xrightarrow{\Delta t \to \infty} 0 \quad (\text{Ecuación I.36})$$

Las velocidades v'(t) se refieren a las correspondientes velocidades lagrangianas de las partículas fluidas (que difieren de las habituales medidas eulerianas).

Siendo la magnitud 'y' la desviación transversal respecto al eje lagrangiano de la partícula debido al desplazamiento turbulento v'(t) en un instante dado.

La tasa de variación transversal debido a este desplazamiento ($\sigma_Y^2 = \overline{y^2}$) vendrá dada por la (Ecuación 1.37).

$$\frac{d\sigma_y^2}{dt} = \frac{\overline{dy^2}}{dt} = 2y\frac{\overline{dy}}{dt} = 2\overline{yv'} = 2\int_0^t \overline{v'(t)v'(t+t')dt'}$$
(Ecuación 1.37)

En el supuesto de que la turbulencia fuera homogénea y estacionaria, de la integración de la expresión anterior se obtiene la formulación del teorema de Taylor de la difusión

turbulenta, en función del coeficiente de autocorrelación '*R*' (Ecuación 1.38).

$$\sigma_y^2 = 2\sigma_v^2 \int_0^t \int_0^{t'} R(t') dt' dt \quad \text{(Ecuación I.38)}$$

Para tiempos muy pequeños (t→0)

$$R(t) \rightarrow 1 \implies \sigma_y^2 \approx \sigma_v^2 t^2 \implies \sigma_y \propto t$$
 (Ecuación I.39)

Para tiempos grandes $(t \rightarrow \infty)$

$$R(t) \rightarrow 1 \implies \sigma_y^2 pprox 2\sigma_v^2 T_t \implies \sigma_y \propto t^{1/2}$$
 (Ecuación I.40)

Donde, $T = \int_0^t R(t')dt'$ es una constante denominada 'escala de tiempo' que depende de la propia naturaleza y características de la turbulencia (Ecuación I.39 y Ecuación I.40).

Una consecuencia directa es que a medida que pasa el tiempo, la tasa de difusión de un penacho decrece, y se aproxima a un proceso puramente estocástico, $\sigma_y \propto t^{1/2}$, en el que no existe "memoria" en las partículas en movimiento respecto a su estado de movimiento inicial.

Se han propuesto diferentes soluciones a la ecuación anterior. Una de ellas (Ecuación I.41) consiste en una simple representación exponencial.

$$R(t) = exp\left(-\frac{t}{T}\right)$$
 (Ecuación I.41)

que conduce a una solución tipo la Ecuación 1.42.

$$\sigma_y^2(t) = 2\sigma_v^2 T^2 \left[\frac{t}{T} - 1 + exp\left(-\frac{t}{T}\right)\right] \quad (\text{Ecuación I.42})$$

Otra posible solución a la ecuación de Taylor puede ser la introducción de alguna característica física de medio

atmosférico (' ϑ ' = viscosidad) como se muestra en la Ecuación I.43.

$$R(t) = \left(\frac{\vartheta}{\vartheta + v_v^2 t}\right)^n \ con \ (0 < n < 1) \quad (\text{Ecuación I.43})$$

Un resultado de esta formulación es (como se señaló anteriormente) que la difusión turbulencia decrece con el tiempo.

La interpretación física supone que la contribución de los pequeños remolinos a la dispersión de los efluentes resulta importante en los primeros estados, cuando la pluma aún se mantiene estrecha.

Por contra, cuando aquella se va haciendo progresivamente más extensa, buena parte de la turbulencia de estos pequeños remolinos se pierde en su interior, sin contribuir a la expansión general del penacho, a la vez que van adquiriendo más importancia los remolinos mayores.

Modelos de similitud

Los modelos de similitud se basan en los conceptos derivados del análisis dimensional, y parten del principio de que es posible alcanzar una representación de los procesos de difusión a partir del conocimiento de ciertas magnitudes macroscópicas fundamentales que gobiernan el sistema. Suponen que algunos parámetros de escala se mantendrán constantes con independencia del tiempo y el espacio.

El desarrollo de un modelo de estas características parte de la identificación de las principales magnitudes que intervienen en el problema (' G_i ', con i=1,n), representadas mediante '*m*' unidades físicas diferentes.

Ello supone que se pueden formar '*n-m*' grupos adimensionales como combinaciones de aquellas, y que describirán el problema (en general es necesario proponer un modelo que se ajuste a las evidencias experimentales de las medidas).
Si ocurre que 'n-m=1' la solución quedará determinada a falta de una constante.

Un ejemplo de cómo se derivan estos modelos puede ser el caso simple del comportamiento de la altura de una emisión continua superficial en condiciones neutras.

La búsqueda de magnitudes que permanezcan constantes sugieren el uso de la velocidad de fricción (u^*) .

Existen diferentes propuestas en la bibliografía. Se ha optado por la Ecuación 1.44 que describe este comportamiento en base a la altura media (*z*):

$$\frac{dz}{dt} = cu^*$$
 (Ecuación I.44)

Si se divide por la velocidad del viento y se tiene en cuenta el perfil logarítmico de la velocidad, $u = \frac{u^*}{k} ln\left(\frac{z}{z_0}\right)$, se llega a la Ecuación 1.45.

$$\frac{d\bar{z}}{dx} = \frac{k'}{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right)} \quad \text{(Ecuación I.45)}$$

que integrada adecuadamente y de forma de que estén ajustada experimentalmente las constantes, proporciona un modelo de evolución espacial de la altura de las emisiones como muestra la Ecuación 1.46.

$$\frac{\bar{x}}{z_0} = 6,26 \left[\frac{\bar{z}}{z_0} ln\left(\frac{\bar{z}}{z_0} \right) - 1,58 \frac{\bar{z}}{z_0} + 1,58 \right]$$
(Ecuación I.46)

En el caso de trabajar con condiciones fuera del estado neutro, habrá de incluirse algún parámetro que represente la inestabilidad atmosférica en la descripción del sistema ('z/L', donde 'L' es la altura de Monin-Obukov).

La ecuación anterior de partida se modifica quedando la expresión de la Ecuación I.47.

$$\frac{d\bar{z}}{dt} = cu^* f\left(\frac{z}{L}\right) \quad \text{(Ecuación I.47)}$$

donde nuevamente existen diferentes expresiones para la función f().

Otro ejemplo de aplicación de la teoría de similitud al problema de la difusión atmosférica procede de las experiencias del comportamiento de emisiones en la capa de mezcla diurna, cuando se encuentran bien mezcladas en todo el espesor.

Experimentalmente parece que los parámetros importantes para el escalado del problema son el espesor de la capa de mezcla (z_i), y la escala de velocidad convectiva (w^*), definida como la Ecuación 1.48.

$$w^* = \left(\frac{g\overline{w'T_0z_l}}{T}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(-\frac{z_i}{0,4L}\right)^{\frac{1}{2}} u^* \quad (\text{Ecuación I.48})$$

proponiéndose la Ecuación I.49, válida para tiempos inferiores a la escala de tiempo lagrangiana y C=0,56.

$$\frac{\sigma_y}{z_i} = \frac{Cw^*t}{z_i} \quad (\text{Ecuación I.49})$$

Modelos de gradiente o teoría K de la difusión

Los *modelos de gradiente o teoría K de la difusión* parten de una formulación de la difusión turbulenta paralela a la difusión molecular.

Para llegar a una descripción somera del tratamiento, la ecuación central del balance de masa para un compuesto en concentración 'C' en la atmósfera se describe con la Ecuación 1.50.

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\delta C}{\delta t} + u \frac{\delta C}{\delta x} + v \frac{\delta C}{\delta y} + w \frac{\delta C}{\delta z} = R \quad \text{(Ecuación I.50)}$$

donde 'R' representa el balance de flujos y sumideros.

La Ecuación 1.51 representa la conservación de la masa, y su correspondiente versión para el caso de considerarse un fluido incompresible (aproximación de Boussinesq).

$$\frac{1}{\rho}\frac{d\rho}{dt} + \frac{\delta u}{\delta x} + \frac{\delta v}{\delta y} + \frac{\delta w}{\delta z} = 0; \quad \frac{\delta u}{\delta x} + \frac{\delta v}{\delta y} + \frac{\delta w}{\delta z} = 0 \quad (\text{Ecuación I.51})$$

Permiten reformular la ecuación anterior de la siguiente forma (Ecuación 1.52).

$$\frac{dy}{dx} = \frac{\delta y}{\delta x} + \overrightarrow{\nabla(\overrightarrow{VC})} = R \quad (\text{Ecuación I.52})$$

En un fluido turbulento las propiedades de cualquier variable asociada al mismo en un punto dado fluctúan en general rápidamente debido al sucesivo paso de remolinos de diferentes tamaños.

Así, para obtener valores representativos de las propiedades del mismo ha de promediarse durante intervalos de tiempo suficientemente largos como para eliminar dichas perturbaciones.

En general se puede suponer que una magnitud viene dada por la suma de dos componentes: una componente promedio, de lenta evolución, y una componente turbulenta, en rápida variación. Realizando varios reajustes (que no se explicitan porque no se ha considerado oportuno), se llega a una expresión como la Ecuación 1.53a y Ecuación 1.53b.

$$\frac{d\bar{c}}{dt} = \frac{\delta(c+c')}{\delta t} + \frac{\delta(c+c')(u+u')}{\delta x} + \frac{\delta(c+c')(v+v')}{\delta y} + \frac{\delta(c+c')(w+w')}{\delta z} = R$$
(Ecuación 1.53a)

$$\frac{d\bar{C}}{dt} = \frac{\delta\bar{C}}{\delta t} + \frac{\delta\overline{uC}}{\delta x} + \frac{\delta\overline{vC}}{\delta y} + \frac{\delta\overline{wC}}{\delta z} + \frac{\delta\overline{u'c'}}{\delta x} + \frac{\delta\overline{v'c'}}{\delta y} + \frac{\delta\overline{w'c'}}{\delta z} \\ = \frac{\delta\bar{C}}{\delta t} + \overline{\nabla(VC)} + \frac{\delta\overline{u'c'}}{\delta x} + \frac{\delta\overline{v'c'}}{\delta y} + \frac{\delta\overline{w'c'}}{\delta z} = R$$

(Ecuación I.53b)

Los términos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c}$ y $\overline{w'c}$ (denominados generalmente como esfuerzos de Reynolds), y más concretamente sus correspondientes gradientes espaciales, constituyen la contribución turbulenta a la difusión, y representan el transporte neto de masa debido a las fluctuaciones del campo de vientos y del campo de concentraciones. Así como estas variaciones de cada una de las magnitudes independientemente se compensan y anulan para un promedio temporal suficiente, el producto cruzado de las mismas no necesariamente lo hace, jugando un papel importante en este transporte de la especie contaminante.

Estas nuevas incógnitas que aparecen en las ecuaciones aumentan la dimensión del problema numérico, a la vez que resultan difíciles de determinar experimentalmente.

Una manera habitual de aproximarse consiste en suponer que el transporte turbulento actúa de manera similar a la difusión molecular (Ecuación 1.54), de manera que el flujo de una determinada magnitud es proporcional al gradiente de su valor medio (de ahí el nombre genérico de *teoría del* gradiente):

$$\overline{u'c'} = -K_m^x \left(\frac{\delta \bar{c}}{\delta x}\right); \quad \overline{v'c'} = -K_m^y \left(\frac{\delta \bar{c}}{\delta y}\right); \quad \overline{w'c'} = -K_m^z \left(\frac{\delta \bar{c}}{\delta z}\right)$$
(Ecuación 1.54)

siendo los parámetros ' K_m^{x,y,z_1} los denominados coeficientes de difusividad turbulenta (lo que también es el origen de la denominación de la *teoría K*).

Se puede escribir como la Ecuación I.55. Esta expresión se conoce con el nombre de *ecuación semiempírica de la difusión atmosférica*:

$$\frac{\delta\bar{c}}{\delta x} + \overline{\nabla(VC)} = \frac{\delta}{\delta x} K_m^x \left(\frac{\delta\bar{c}}{\delta x}\right) + \frac{\delta}{\delta y} K_m^y \left(\frac{\delta\bar{c}}{\delta y}\right) + \frac{\delta}{\delta z} K_m^z \left(\frac{\delta\bar{c}}{\delta z}\right) + R$$
(Ecuación 1.55)

La Ecuación I.55 no tiene una solución analítica general. Si se supone que la turbulencia es estacionaria y homogénea, resultará que los coeficientes de difusión turbulenta serán iguales y constantes en el tiempo, con lo que

 $K_m^x = K_m^y = K_m^z = K_m = constante$ (Ecuación I.56)

Y la expresión general se simplifica a la Ecuación I.56.

$$\frac{\delta \bar{c}}{\delta x} + \overline{\nabla(VC)} = K_m \left(\frac{\delta^2 \bar{c}}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 \bar{c}}{\delta y^2} + \frac{\delta^2 \bar{c}}{\delta y^2} \right) + R \quad (\text{Ecuación I.56})$$

Para el caso simple unidimensional en que el viento es uniforme, la turbulencia homogénea y estacionaria y las concentraciones varían solo con el tiempo y en la dirección 'x', la expresión anterior se reduce a la Ecuación 1.57.

$$\frac{\delta C}{\delta t} = K_m \frac{\delta^2 C}{\delta x^2}$$
 (Ecuación I.57)

Con las condiciones de contorno siguientes:

 $C \to 0 \text{ para } t \to \infty$ en todo el espacio 'x' $C \to 0 \text{ para } t \to 0$ en todo el espacio 'x' excepto en x = 0 $\int_{-\infty}^{\infty} C = Q'$ Q' es la tasa de emisión instantánea de la fuente

Se trataría del caso de una emisión puntual de una extensa fuente superficial plana, con una solución igual a la Ecuación I.58.

$$C = \frac{Q}{\left(4\pi K_m t\right)^{1/2}} exp\left(-\frac{x^2}{4K_m t}\right) \quad \text{(Ecuación I.58)}$$

que corresponde a la fórmula gaussiana con una desviación estándar de la forma $\sigma = (2Kt)^{1/2}$, y en la que la dependencia de la dispersión resulta del tipo $\sigma \propto t^{1/2}$, igual a la prevista por la teoría de Taylor para tiempos grandes.

La hipótesis de una turbulencia constante en el tiempo no es muy sostenible en la naturaleza. Suponiendo la anterior dependencia temporal, se puede obtener una formulación para estos coeficientes de difusión turbulenta descrita como la Ecuación 1.59.

$$K_m = \sigma_v^2 T$$
 (Ecuación I.59)

donde '*T* representa la escala de tiempo lagrangiana. Extrapolando el tratamiento anterior para el caso de las tres dimensiones, se obtiene Ecuación 1.60.

$$C = \frac{Q'}{(4\pi t)^{1/2} (K_m^x K_m^y K_m^z)^{1/2}} exp\left[-\frac{1}{4t} \left(\frac{x^2}{K_m^x} + \frac{y^2}{K_m^y} + \frac{z^2}{K_m^z} \right) \right]$$
(Ecuación 1.60)

siendo las correspondientes desviaciones típicas $\sigma_x^2 = 2K_m^x t$; $\sigma_y^2 = 2K_m^y t$; $\sigma_z^2 = 2K_m^z t$.

I.4 EFECTOS PRODUCIDOS DE PROMEDIAR EN EL TIEMPO

Las fórmulas gaussianas propuestas como solución a la dispersión de contaminantes representan el resultado de procesos promediados en el tiempo.

Las concentraciones calculadas dependerán de los parámetros dispersivos utilizados (y su adecuación a los tiempos de trabajo).

El viento tiende a describir meandros (mucho más intensamente en la horizontal que en vertical), lo que conduce a valores superiores para las sigmas (de manera más importante para la ' σ_y ' que para las ' σ_z ') al incrementarse el tiempo de trabajo, por lo que finalmente se establecieron en diez minutos el promedio válido de las parametrizaciones.

En sus propuestas de modelización con fines reguladores, la Agencia Americana de Medioambiente (EPA) especificaba que el tiempo de promedio sería de una hora en entornos rurales (en consistencia con los tiempos de persistencia del viento en espacios abiertos).

La influencia de la variación del viento y su efecto para otros intervalos de trabajo no es muy evidente en las medidas experimentales. Si se pretende aplicar el modelo para otros periodos de tiempo medios fuera de los inicialmente previstos, se puede utilizar una función potencial, tipo la Ecuación 1.61 como posible regla de conversión de las concentraciones.

$$\overline{C}_s = \overline{C}_k \left(\frac{t_k}{t_s}\right)^P$$
 (Ecuación I.61)

donde ' $C_{s/k}$ ' representa la concentración para el tiempo ' $t_{s/k}$ ' (con $t_s > t_k$), y 'P' el valor de la potencia, en un rango típico entre 0,17 y 0,75 (sugerido 0,17).

Para la extrapolación del formulismo gaussiano para periodos promedio muy grandes, la ecuación general se integra a lo largo de la dirección transversal de transporte ('y'), obteniéndose la expresión (Ecuación 1.62).

$$\overline{C_L} = \frac{\sqrt{2Q}}{\sqrt{\pi \overline{v}} \sigma_z} exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{H}{\sigma_z}\right)^2\right] \quad \text{(Ecuación I.62)}$$

Esta expresión se utiliza como base para los modelos climáticos, en los que una emisión continua durante largos periodos, pudiendo estimarse los promedios mensuales, anuales, de concentración.

Para ello es necesario disponer de la *matriz de estabilidades* $f(\Theta, V, E)$ que recoge la frecuencia de ocurrencia del viento para los distintos intervalos de dirección ' Θ ', intensidad del viento 'V' y clase de estabilidad 'E'.

Siendo ' $\Delta\theta$ ' la anchura en radianes de sector en que se divide el círculo completo, la concentración para cada una de las clases de la matriz 'f()' vendrá dada por la expresión (Ecuación 1.63).

$$\overline{C_L}(\Delta\theta, V, E) = f((\Delta\theta, V, E) \frac{\sqrt{2Q}}{\sqrt{\pi \overline{v}} \sigma_z(x(\Delta\theta))} exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{H}{\sigma_z}\right)^2\right]$$
(Ecuación 1.63)

La estimación anterior es válida para el eje central de los diferentes sectores considerados. Sin embargo se registra una transición abrupta en la separación entre sectores adyacentes. Se define así una función de suavizado, '*WS*', definida como (Ecuación 1.64).

$$WS = \begin{cases} \frac{(\Delta\vartheta|\theta_{ad} - \theta|)}{\Delta\vartheta} & |\theta_{ad} - \theta| \le \Delta\vartheta\\ 0 & |\theta_{ad} - \theta| > \Delta\vartheta \end{cases}$$
(Ecuación 1.64)

donde ' θ_{ad} ' es el ángulo, en radianes, desde el norte del eje del sector, y ' θ ' el ángulo desde el norte al punto de estimación. La concentración se escribe entonces como (Ecuación 1.65).

$$\overline{C_L}(\Delta\theta, V, E) = f(\Delta\theta, V, E) \frac{\sqrt{2Q^*WS}}{\sqrt{\pi}\overline{u}\sigma_z(x\Delta\theta)} exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{H}{\sigma_z}\right)^2\right]$$

(Ecuación I.65)

de manera que la concentración neta se obtiene como suma para las diferentes categorías (Ecuación 1.66).

$$\overline{C_{TOTAL}} = \sum_{\theta} \sum_{V} \sum_{E} \overline{C_L} \left(\Delta \theta, V, E \right) \quad \text{(Ecuación I.66)}$$

I.5 MÉTODOS DE INTEGRACIÓN NUMÉRICA

La resolución del problema de la distribución de los efluentes emitidos desde un foco extenso precisa la integración de las ecuaciones que rigen la dispersión atmosférica sobre toda su superficie/línea.

De acuerdo a la Figura I.3, cada elemento diferencial del foco emisor contribuiría a un punto dado del espacio (X_r, Y_r) con una aportación de masa que sería función de las condiciones dispersivas y la correspondientes distancias X e Y, a lo largo de la dirección del viento (U) y perpendicular a la misma respectivamente.

En el caso presente se trata de integrar la ecuación de dispersión atmosférica en dos dimensiones (caso de foco superficial) o solo una (foco lineal).

El procedimiento consistirá en el caso más general (bidimensional), inicialmente en encontrar las funciones que definen los límites de integración (Ecuación I.67).

$$I = \int \int dx dy f(x, y) \rightarrow I = \int_{x_0}^{x_1} dx \int_{y_0(x)}^{y_1(x)} dy f(x, y)$$
(Ecuación 1.67)

Se define entonces una función H(x) como la descrita en la Ecuación 1.68.

$$H(x) = \int_{y_0(x)}^{y_1(x)} dy f(x, y)$$
 (Ecuación I.68)

cuya integración proporcionará a su vez el resultado final (Ecuación 1.69).

$$I = \int_{x_0}^{x_1} dx H(x) \quad \text{(Ecuación I.69)}$$

De esta forma, mediante un esquema básico de integración unidimensional, invocado recursivamente, se puede resolver eficientemente el problema.

La solución de "*I*" mediante un algoritmo iterativo implica a su vez la aplicación del mismo en cada paso para obtener la función "*H*".



Figura 1.3 Contribución al nivel de concentración en un punto (X_r, Y_r) debido a la emisión de un elemento diferencial de superficie de una fuente genérica bajo un viento "U"

Para obtener la integral en una dimensión se dispone de diferentes algoritmos, que partiendo de una interpretación geométrica, básicamente tratan de estimar el área que se encuentra debajo de la función a integrar, comprendida entre aquella, el eje de abscisas y los límites de integración.

El procedimiento más simple es el conocido método de los trapecios, mejorado por el también popular método de Simpson.

En el presente trabajo se incorporó un esquema de integración denominado *cuadratura de Romberg*.

Sin entrar en detalles sobre el método, indicar tan solo que se trata de un refinamiento de los procedimientos anteriores que presenta una gran ventaja para su programación, por tratarse de un método iterativo, que se puede repetir hasta alcanzar la precisión que se desee.

Como se indicó en apartados anteriores, el código contempla únicamente cinco tipos de geometrías de focos, con los que se considera que se puede representar satisfactoriamente cualquier planta de depuración de aguas. Se corresponden a focos circulares (por ejemplo decantadores), rectangulares (como pueden ser las balsas de almacenamiento), poligonales irregulares (como caso general de los rectangulares), lineales (sería el caso de conducciones abiertas) y focos puntuales (donde entrarían elementos como las arguetas).

De acuerdo al esquema propuesto, la mayor dificultad a la hora de implementar el procedimiento de integración consiste en determinar, en el caso de los focos superficiales, las expresiones que definen los límites de integración de las funciones intermedias.

En los apartados en que se trata la funcionalidad del sistema propuesto, se describe la manera en que se caracteriza geométricamente cada uno de los cinco tipos de focos.

Las Figuras I.4 a I.8 reflejan sucintamente algunos de los aspectos relacionados con los esquemas de integración aplicados a cada uno de las distintas morfologías de focos, en consonancia con la aproximación general descrita anteriormente.



Figura 1.4 Integración sobre una superficie circular; se ha trabajado sobre un sistema cartesiano, donde los límites de integración vienen dados por las funciones: $y_0(x) = -\sqrt{R^2 - x^2}$; $y_1(x) = \sqrt{R^2 - x^2}$



Figura 1.5 Integración sobre una superficie rectangular; la referenciación sobre el plano viene dada por las coordenadas de su lado inferior $(X_0, Y_0)/(X_1, Y_1)$ y la distancia de su diagonal D[$(X_0, Y_0)/(X_3, Y_3)$]; los límites de integración vienen definidos por:

$$y_0(x) = Y_0 + (X - X_0) \left(\frac{Y_1 - Y_0}{X_1 - X_0}\right) \quad ; \quad y_1(x) = Y_2 + (X - X_2) \left(\frac{Y_3 - Y_2}{X_3 - X_2}\right)$$



Figura 1.6 Integración sobre una superficie poligonal irregular; en este caso general la integración se realiza descomponiendo el polígono en los triángulos constituyentes, sumándose los resultados individuales para cada uno de ellos.



Figura 1.7 Integración sobre una línea, definida como un vector plurinodal; la integración se realiza a lo largo de cada tramo $(X_i, Y_i)/(X_{i+1}, Y_{i+1})$, de acuerdo a la restricción $y(x) = Y_i + (x - X_i) \frac{(Y_{i+1} - Y_i)}{((X_{i+1} - X_i))}$



Figura 1.8 Representación de la contribución de un foco puntual a los niveles de inmisión en un punto (X_p, Y_p) , bajo un viento "Vel"

MATERIAL COMPLEMENTARIO J

Funcionalidades del modelo DIODISP

¿Por qué las cosas son como son y no de otra manera?

Johannes Kepler (1531-1630)

J.1 FUNCIONALIDAD DE LA APLICACIÓN

La aplicación se arranca mediante llamada al programa 'DIODISP.EXE', que precisa encontrar en el mismo directorio de trabajo el fichero de configuración 'DIODISP_.CFG' (genera un modelo con valores por defecto en caso de no encontrarlo).

Se accede entonces al menú principal de opciones (Figura J.1) que direcciona a los grandes bloques de actuación posibles: preparación de los ficheros de entrada, ejecución de las simulaciones y visualización de los resultados.

Adicionalmente se permite la salida temporal de la aplicación (se recupera la posibilidad de ejecutar directamente algún comando posteriormente) y, mediante la opción 4, se editan los principales archivos que conforman la operatividad del modelo, y que son los definidos en el fichero de configuración general ('*DIODISP_.CFG*'):

./Fichero con las condiciones generales de ejecución.

./Fichero descripción de los focos.

./Fichero meteorológico.

./Fichero de configuración de las salidas gráficas.

./Fichero con resultados anteriores.

./Fichero de salida de las nuevas simulaciones del modelo.



Figura J.1 Pantalla de arranque con el menú principal de la aplicación DIODISP

En el mismo fichero de ejecución se define el directorio en el que se encuentran los tres ejecutables que configuran la aplicación (puede ser el propio directorio de trabajo), cuya existencia y presencia se verifica y exige para poder proseguir con las diferentes opciones.

La incorporación al sistema (y gestión) de la información necesaria para su correcto funcionamiento, de diferente naturaleza y origen, se resuelve a partir del submenú de *entrada de datos* cuyas opciones se muestran en la Figura J.2, y que básicamente controla el ejecutable *'DiodispE.exe'*.

La Figura J.3 muestra el aspecto de la pantalla que controla esta acción. El programa pide siempre confirmación de los cambios y, en caso afirmativo, se edita el correspondiente archivo (para revisar la oportunidad de los cambios introducido) a la vez que se actualiza adecuadamente el fichero general de configuración (*'DIODISP_.CFG'*).



Figura J.2 Interfaz de las diferentes opciones de definir y/o modificar los parámetros de entrada al modelo

PROGRAMA DE SIMULACIÓN DE LA DISPERSIÓN DE OLORES EN UNA E.D.A.R.							
ARCHIVOS GENERALES DE CONFIGURACION							
FICHEROS ACTUALES: >>> TURIA.ejc >>> TURIA.T.FOC >>> TURIA_DB.CFG >>> TURIA_DB.CFG	Cond. Ejecución:	TURIA.ejc					
	Fichero Focos :	TURIA_T.FOC					
	Fich. Meteorol.:	turia.MET					
>>> Resulta.dos	Cond. Graficac.:	TURIA_DB.CFG					
	Fich. Resultado:	\$100622a.sal					
	Fichero Salidas:	Resulta.dos					
	SALVAR LOS RES	ULTADOS (SI=S/NO=def): _					
DIODISP.C Ver 1.0 (03/2011) E.M.M.I. 'Ctrl E': edición; 'Esc': salir.							

Figura J.3 Pantalla de actualización interactiva de los principales ficheros utilizados por el modelo

Las *opciones de ejecución* se refieren a los valores que definen el entorno y otros elementos espaciales sobre el que realizar la simulación.

Tal y como se muestra en la pantalla de la Figura J.4, se definen los límites del área de trabajo (que habrán de ser compatibles con otros descriptores del sistema, como la relación de focos, fichero topográfico, toponimia,...), el tamaño de la malla sobre la que evaluar la dispersión, la relación de los receptores y algunos parámetros que controlan la resolución numérica de los cálculos.



Figura J.4 Pantalla de actualización interactiva de los principales parámetros que definen el entorno de ejecución

En concreto se precisa indicar el número máximo de iteraciones en el proceso de integración numérica y el grado de sensibilidad exigida.

Ambos valores, si superados, interrumpen el proceso de convergencia numérica de los cálculos, por lo que controlan el grado de aproximación de la solución.

En caso de resultar excesivamente exigentes puede retardar considerablemente el tiempo de resolución o bien impedir el alcanzar una solución, por lo que el programa entrará en un bucle indefinido.

El sistema proporciona valores por defecto que pueden ser aceptables en un amplio rango de situaciones. Los valores de este apartado se almacenan en el correspondiente fichero (en el ejemplo se incluye como '*TURIA.ejc*') consignado en el archivo de configuración general, y cuyos valores por defecto se muestran en la Tabla J.1.

Para valorar la bondad del método iterativo, desde el menú principal y mediante las teclas "Control T" se fuerza a resolver numéricamente y por el mismo algoritmo iterativo, el valor del área de los diferentes focos definidos, pudiendo compararse con las superficies proporcionadas analíticamente por las correspondientes fórmulas.

Número de registro	Valor por defecto	Descripción del contenido				
1	****	Registro informativo (archivo con las condiciones de ejecución)				
2	-160	Coordenada X del vértice inferior izquierdo de la malla de simulación				
3	-20	Coordenada Y del vértice inferior izquierdo de la malla de simulación				
4	200	Coordenada X del vértice superior derecho de la malla de simulación				
5	80	Coordenada Y del vértice superior derecho de la malla de simulación				
6	35	Número de nodos de la malla en el eje X				
7	35	Número de nodos de la malla en el eje Y				
8	-150	Coordenada X del punto de simulación individual				
9	30	Coordenada Y del punto de simulación individual.				
10	0	Altura (Z) del punto de simulación individual				
11	RCP.DAT	Fichero con las coordenadas de los nodos				
12	15	Número máximo de iteraciones en el proceso de integración				
13	0,001	Sensibilidad del proceso iterativo (%)				

Tabla J.1 Contenido y valores por defecto del archivo con las condiciones de ejecución de la aplicación

La opción 3 del submenú de entrada de datos permite la manipulación del fichero con las características de los focos.

Tal y como se muestra en la Figura J.5, el cuadro a la izquierda resume la relación de focos definidos, mientras que en la derecha se presentan las características de los mismos, revisables sucesivamente mediante las flechas. El proceso permite 'activar' o 'desactivar' los diferentes focos, de manera que solamente aquellos consignados como 'activos' participan en la simulación como emisores de hecho.

PROGRAMA DE SIMULACIÓN D	DE LA DISPERSIÓN DE OLORES EN UNA E.D.A.R.
FICHERO ACTUAL: >>> TURIA_T.FOC Focos descritos: 13 Nº/Act (2/ 0) tipo Circular; (5/ 3) tipo Rectangular; (1/ 0) tipo Poligonal; (1/ 0) tipo Lineal; (4/ 4) tipo Puntual;	ACTUALIZACION INFORMACION SOBRE LOS FOCOS. NODO 6. Balsa (RECTANGULAR 6). Tipo RECTANGULAR (activo). Tasa de emision: 0.10 (modo 0); Alturas del foco: 1.0, 2.5; Coordenadas: 54.370, 19.890; 90.040, 19.890; Diagonal : 38.780; SGLVAR LOS RESULTADOS (S(-S/ND-def)):
DIODISP.C Ver 1.0 (03/2011)	E.M.M.I. (+,+); ESC : CAMDIO ESTAdo; Q: SAIIr

Figura J.5 Pantalla de actualización interactiva del archivo de definición de los focos (permite seleccionar aquellos focos activos en la ejecución entre los previamente definidos)

La aplicación contempla la gestión de fuentes puntuales, lineales y extensas.

Una fuente lineal viene determinada por una línea quebrada, definiéndose como una colección ordenada de puntos.

Las fuentes extensas pueden ser a su vez circulares, rectangulares o poligonales en general.

Se permite un número ilimitado de cada uno de los tipos (el número de focos aumenta necesariamente el tiempo de ejecución).

Geométricamente los diferentes tipos de focos se caracterizan por sus coordenadas y una o dos alturas desde el suelo (que determinan la posibilidad de que el nivel del líquido esté por debajo de los límites del contendor).

Puntos, líneas y polígonos vienen definidos por sus vértices. Un rectángulo precisa las coordenadas de uno de los lados y la longitud de la diagonal. Las geometrías circulares se definen mediante las coordenadas del centro y la longitud del radio.

Las unidades deberán estar expresadas siempre en metros.

Cada foco tiene asignado un valor individualizado de emisión, así como un modo de emisión. La tasa de emisión representa el valor medio y uniforme de masa liberada a la atmósfera por unidad de tiempo (y de distancia o superficie, en el caso de tratarse de focos lineales o extensos) específico de cada emisor.

Otra posibilidad del presente submenú de entrada de datos, la adaptación automática de archivos meteorológico en formato DMDMETEO a los requerimientos del modelo de simulación (Tabla J.2).

Tabla J.2	Modelo de	e archivo	meteorológico	adaptado a	a las	necesidades	de
entrada de	la aplicaci	ón					

N°	Descripción del contenido ¹						
Registro							
1	Archivo con la información meteorológica						
2	AAMMDD	HHMM	Vel	Dir	Estab	F.E	Medida
3	100404	1220	4	30	1	1	11,4
4	100404	1230	4,1	40	1	0,5	15,2
5	100404	1240	4,2	50	1	0,3	9,1
6	100404	1250	4,3	60	1	1,6	6,6
7							

Este fichero de entrada contiene un listado secuencial de los parámetros meteorológicos necesarios para la simulación de los procesos dispersivos. Cada periodo temporal se consigna en un registro independiente, incluyendo valores de cinco magnitudes: intensidad y

¹ Descripción de los distintos elementos – AAMMDD (Año, Mes, Día); HHmm (Hora, Minuto); Vel (velocidad del viento); Dir (dirección del viento); Estab (clase de estabilidad según Pasquill-Guifford); F.E (factor de emisión).

dirección del viento, estabilidad, factor de emisión y concentración. Para los cálculos de dispersión se precisa conocer en cada momento la clase de estabilidad (A-F=1-6).

También en este punto se contempla la posibilidad de modular las emisiones mediante un factor genérico que en cada intervalo de tiempo afecte a todos los focos por igual y que introduciría la posibilidad de una cierta variación temporal (por defecto toma el valor constante 1).

Con ello se podrían incorporar fácilmente modulaciones debido a factores ambientales (por ejemplo debido al viento, la evaporación,...) y de operación (así se podrían distinguir horas con más carga de entrada o días con más/menos intensidad de trabajo, mantenimiento,...).

Estos factores, que serían elaborados 'a priori', si se normalizan no se vería afectada la emisión global total de cada foco durante el tiempo de simulación.

La última columna incluye un valor de concentración, medido en algún punto de la planta, y que es utilizado en las estimaciones de tasas de emisión (opción 5 –Figura J.6de las diferentes posibilidades de ejecución del modelo).



Figura J.6 Menú de las diferentes opciones para definir y/o modificar los parámetros de entrada al modelo

El ítem 5 de la entrada de datos abre la pantalla que se muestra en la Figura J.7.



Figura J.7 Pantalla que controla la confección automatizada del archivo meteorológico con el formato requerido por el sistema, a partir de un archivo meteorológico en formato DMDMETEO

Puede verse que en el caso ejemplo se proporciona el nombre de uno de estos ficheros con series meteorológicas (*'tm_turia.t04'*) correspondiente archivo de У su configuración ('tm_turia.cfg', de las acuerdo а especificaciones de la aplicación de gestión de archivos meteorológicos 'DMDMETEO').

El sistema precisa la identificación de la columna en que se consignan los valores experimentales de concentración de alguna de las especies de interés (como se indicó, esta información se utiliza cuando se comparan medidas del modelo con valores experimentales).

También calcula de manera automática la clase de estabilidad a partir de las medidas originales, previéndose varias opciones para su estimación.

Finalmente se contempla la posibilidad de computar de forma automatizada la columna correspondiente a los factores de emisión descritos anteriormente, de acuerdo a diferentes patrones de emisión.

Como producto de los cálculos se genera un fichero numérico en el que para cada periodo temporal se representa la contribución esperada por cada uno de los focos activos en el punto consignado (ver el ejemplo de la Figura J.8).

En las salidas se contemplan todos los focos descritos en el correspondiente archivo de configuración, aunque solo emiten aquellos 'activados'.

Bajo cada columna de cada foco se muestra la tasa de emisión que le afecta según su definición, y por debajo su

contribución, ya en unidades de concentración, a los niveles de inmisión en el punto de referencia.

La última de las columnas presenta simplemente la suma de las concentraciones individuales de cada uno de los focos.

Estos resultados se han añadido a cada registro del fichero meteorológico, por lo que el resultado contiene los valores de las magnitudes meteorológicas de partida junto a las concentraciones resultantes (además de las medidas experimentales) para una posible explotación complementaria.

 DIODISP.C
 Ver 1.0
 (03/2011)
 E.M.M.I.

 AAMMDD HHmm
 VELOC DIRECC
 ESTAB FactEmi
 Inmis
 Foco 01
 Foco 05
 Foco 10
 Foco 13
 ACUMULADO

 AAMMDD HHmm
 VELOC DIRECC
 ESTAB FactEmi
 Inmis
 0.100
 0.100
 10.000
 0.100
 41.300

 100404
 1220
 4.0
 30.0
 1
 1.0
 11.4
 -.-- 0.000
 0.000
 -.-- 0.032

 100404
 1230
 4.1
 40.0
 1
 1.0
 15.2
 -.-- 0.019
 0.000
 -.-- 0.328

 100404
 1240
 4.2
 50.0
 1
 1.0
 9.1
 -.-- 0.0291
 0.003
 -.-- 1.659

 100404
 1250
 4.3
 60.0
 1
 1.0
 6.6
 -.-- 1.266
 0.031
 -.--- 4.130

 100404
 1300
 4.4
 70.0
 1
 1.0
 3.2
 -.-- 2.475
 0.113
 .---- 6.471</t

Figura J.8 Ejemplo del fichero de resultados tras la ejecución del modelo en modo 'simulación puntual'

En cuanto a las salidas gráficas se programaron dos subaplicaciones para poder adaptar los resultados a formato GRADS.

La aplicación '*DiodispP.exe*' se diseñó para procesar las salidas de resultados de la simulación (espacial) de la aplicación general.

La funcionalidad de la misma se presenta en una de las propias salidas de la misma recogida en la Figura J.9.

La ejecución de la aplicación, utiliza el mismo fichero de configuración de la aplicación DIODISP, siendo en su funcionamiento totalmente independiente de la misma.

Como producto genera un fichero de salida con formato similar al producido por la simulación del proceso dispersivo, y que puede incorporarse a la gestión de visualización y post-procesamiento de la aplicación (como 'fichero de resultados'). Adicionalmente transforma los resultados, tanto de inmisión como de vientos, a los requerimientos del entorno *GRADS*, de manera que pueden ser tratados de manera interactiva desde la misma (con todas las posibilidades de visualización y procesamiento que ofrece).

Se generan de esta manera los archivos '*DiodispP.GRS*' y '*DiodispP.CTL*', correspondiendo respectivamente a los datos reformateados y al archivo de documentación.

También se confecciona un fichero de comandos ('*script*'), entendible y ejecutable por dicho software, y que se nombra como '*DiodispP.GS*'.

Los anteriores archivos se preparan cada vez que se lanza la aplicación *DiodispP* (y se concluye sin errores), recibiendo siempre el mismo nombre, por lo que se sobrescriben los antiguos tras cada nueva ejecución.

Para facilitar el trabajo de visualización de los resultados sin necesidad de un conocimiento exhaustivo del lenguaje de comandos de la herramienta general se automatizaron algunas opciones (en forma de botones).

Así, la ejecución del archivo de comandos desde la aplicación GRADS da lugar a un entorno interactivo en el que se pueden realizar de manera sencilla numerosas tareas, tanto de visualización como de procesamiento de la información, tal y como se presenta en la Figura J.9 sobre un caso ejemplo.

Si se abandona el lote de comandos (botón 'Exit') volviendo al entorno general GRADS, se mantienen cargados los campos de concentraciones y vientos (contenidos en 'DiodispP.GRS' y definidos en 'DiodispP.CTL'), por lo que se puede realizar sobre los mismos cualquiera de las operaciones que proporciona la aplicación de gestión de campos meteorológicos en caso de desear algún tipo de tratamiento no contemplado en las opciones anteriores.



Figura J.9 Aspecto de las salidas de resultados de la aplicación DIODISP bajo el entorno GRADS, al que se le han añadido algunas funcionalidades (ventana izquierda) para favorecer la visualización de los campos

Entre las posibilidades automatizadas incorporadas, y que cubren la mayor parte de las necesidades de visualización de resultados, se encuentran las siguientes:

- Avance/retroceso rápido en la serie temporal de concentraciones mediante el cursor.
- Visualización opcional y ajuste de las escalas del campo de vientos.
- Visualización opcional de topografía y toponimia.
- Ajuste de las escalas de las isocurvas, automáticamente o manualmente. En el primer caso el propio sistema determina los intervalos óptimos para cada dibujo, por lo que las escalas varían de uno a otro. En el segundo se pueden fijar por el usuario según varios rangos, y se mantienen en todas las representaciones, lo que facilita la intercomparación entre diferentes periodos.
- Selección de diferentes tipos de isocurvas (de trazo lineal o rellenas).
- Salidas gráficas de imágenes en formato 'JPG', de manera puntual para la representación actual o de

forma automatizada para todos los periodos temporales del fichero de datos.

• Visualización animada en pantalla de una secuencia temporal completa.

NOTA DEL AUTOR:

Con la finalidad de cumplir la ley de propiedad intelectual se han tenido que omitir ciertos temas abordados en la tesis. No obstante el autor ha marcado y señalado claramente las partes cifradas del documento.

Para cualquier duda o información adicional sobre el contenido facilito mi contacto.

Asimismo el autor quiere señalar que debido a la supresión de algunas de las páginas, la numeración del índice temático y del índice de figuras-tablas puede no ajustarse exactamente a dicha paginación.