

Variabilidad Estocástica de las Variables Atmosféricas y de Emisión en el Modelado de la Concentración de PM10

Sebastián Diez^{1,2} * y Javier Britch¹

1: CIQA - Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Córdoba – Maestro López esq. Cruz Roja Arg. – Ciudad Universitaria – Córdoba - Argentina. Tel/Fax: 0351– 5986022.

2: CONICET.

*e-mail: sdiez@quimica.frc.utn.edu.ar

Resumen. La dispersión de contaminantes generalmente se modela considerando a las variables independientes como deterministas, es decir variables que adoptan valores puntuales. En este trabajo, la concentración de PM10 ha sido estimada considerando la variabilidad estocástica de las variables atmosféricas y de los factores de emisión de una chimenea en particular. Mediante un programa sencillo, desarrollado específicamente para esta tarea, el cual combina los algoritmos de dispersión del modelo Industrial Source Complex (ISC) con la metodología Monte Carlo (MC), ha sido estimada la concentración para receptores ubicados en la Ciudad de Malagueño (Provincia de Córdoba). Esta nueva aplicación, denominada ISC-MC, ha permitido (i) conocer la distribución de concentraciones de PM10 para los distintos receptores y (ii) determinar la ubicación de aquellos percentiles de interés.

Palabras claves: PM10, Variabilidad Estocástica, Monte Carlo, ISC-MC.

Stochastic Variability of Atmospheric and Emission Variables in the Modeling of PM10 Concentration

Abstract. The pollutant dispersion is generally modeled considering the independent variables as deterministic, namely variables that take specific values. In this work, the concentration of PM10 has been estimated considering the stochastic variability of atmospheric variables and emission factors of a particular stack. By means of a simple program, developed specifically for this task, which combines the algorithms of Industrial Source Complex (ISC) model with the Monte Carlo method (MC), has been estimated the concentration for receptors located in Malagueño City (Cordoba Province). This new application, called ISC-MC, has permitted (i) to know the distribution of PM10 concentrations for different receptors and (ii) to determine the location of those percentiles of interest.

Keywords: PM10, stochastic variability, Monte Carlo, ISC-MC.

INTRODUCCIÓN

El modelado de la dispersión de contaminantes es una de las herramientas de mayor aplicación en la toma de decisiones referidas a la protección de la salud de la población (medidas correctivas/ preventivas). Sin embargo, las agencias gubernamentales nacionales e internacionales suelen tomar acciones basadas en el “peor de los escenarios” (EPA, 2005^a; OEHHA, 2003, Dawidowski et. Al. 1997; Resolución ENRE, 1997), desconociendo la probabilidad de ocurrencia de este tipo de situación.

Cuando se habla del “peor de los escenarios”, se hace referencia al valor que toma cada una de las variables independientes y que generan la respuesta

más desfavorable del modelo. Dado que cada parámetro de entrada toma un único valor, sin considerar la variabilidad intrínseca a que se hallan sujetos los sistemas complejos, se dice entonces que los modelos son deterministas (Raychaudhuri, 2008).

La principal desventaja de los modelos de dispersión más populares (ISC, Aermot, Calpuff, etc.) es que son en esencia deterministas, dado que no poseen la capacidad de evaluar la probabilidad con que los distintos escenarios podrían sucederse. Estos modelos no han sido diseñados para considerar la distribución de las variables de entrada, ni la variabilidad provocada en la respuesta del modelo.

Externamente es factible caracterizar la variabilidad de la respuesta de estos modelos, para lo cual

es necesario correr un número determinado de veces y/o ejecutarlo con un conjunto elevado de datos de entrada.

El postratamiento con algún utilitario apropiado de las “salidas” (resultados), permite estimar los distintos estadísticos de esa población de datos lo cual puede resultar laborioso, poco flexible y difícil de sistematización.

El objetivo de este trabajo ha sido caracterizar la concentración de material particulado PM10, considerando la variabilidad estocástica tanto de los parámetros atmosféricos (Dirección y Velocidad del Viento, Estabilidad Atmosférica y Temperatura Ambiente) como así también la de los de emisión (Velocidad y Temperatura de los gases de salida y Tasa de Emisión) de una fuente puntual, mediante la aplicación de la simulación Monte Carlo a un modelo de dispersión reconocido y a partir de esto caracterizar la distribución de concentraciones y los estadísticos que la definen. Todo esto en un solo paso y de forma automática, en un entorno amigable, sencillo e intuitivo y así aproximar las distribuciones de concentración para cada receptor, pudiendo determinar la ubicación de aquellos percentiles de interés de forma sencilla.

MODELO GAUSSIANO

Para el modelado de la dispersión de PM10 se utilizará el modelo Gaussiano, debido a su simplicidad y amplia aplicación regulatoria. Este modelo fue desarrollado a partir de investigaciones sucesivas (Turner, 1964; Turner, 1970; Gifford, 1960; Pasquill, 1974), llegando a su derivación matemática con las siguientes suposiciones:

1. emisión continua y sin variación en el tiempo,
2. conservación de masa durante el transporte del contaminante,
3. condiciones meteorológicas constantes durante el transporte, y
4. distribución gaussiana vertical y lateral de la concentración.

La ecuación general del modelo es la siguiente:

$$c(x,y,z,h_e) = \frac{Q}{2\pi \cdot \sigma_y \cdot \sigma_z \cdot u_s} \cdot e^{-0.5 \cdot \left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2} \cdot \left[e^{-0.5 \cdot \left(\frac{z-h_e}{\sigma_z}\right)^2} + e^{-0.5 \cdot \left(\frac{z+h_e}{\sigma_z}\right)^2} \right]$$

donde:

C: concentración del contaminante [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]

x: distancia del receptor a sotavento [m]

y: distancia del receptor, perpendicular al eje de simetría de la pluma [m]

z: altura del receptor [m]

Q: tasa de emisión [g/s]

u_s : veloc. del viento a la altura de la emisión [m/s]

h_e : altura efectiva de la chimenea [m]

σ_y, σ_z : coeficientes de dispersión lateral y vertical.

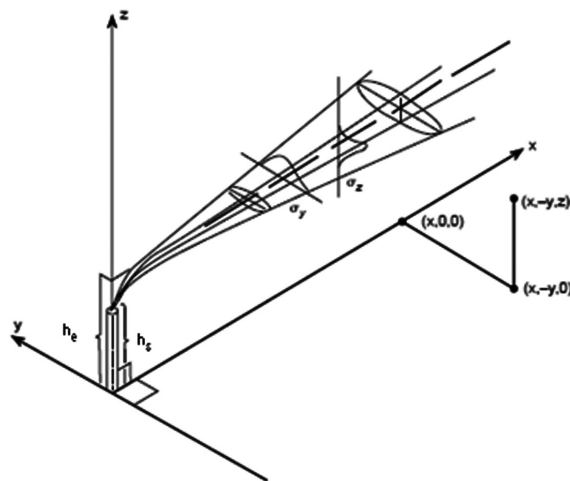


Figura 1: Sistema de coordenadas de la fuente puntual.

MODELOS DE DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES

Para el tratamiento de la dispersión de contaminantes, existen diversas herramientas, dentro de las cuales se destacan los modelos ISC3, Aermol, Calpuff y WRF-Chem

El modelo ISC (Industrial Source Complex, 3ra versión) es un modelo Gaussiano de estado estacionario, creado por la EPA con el objetivo de utilizarlo con fines regulatorios. Hasta fines de 2005 fue el modelo “preferido” de la EPA, reemplazado a partir de 2006 por el modelo Aermol (EPA, 2005b). A partir de entonces ISC pasó a encontrarse bajo la denominación de modelo “alternativo”, a pesar de lo cual actualmente sigue siendo utilizado como modelo regulatorio en EEUU dada la robustez, la adaptabilidad a las distintas situaciones, la disponibilidad de los datos requeridos por el modelo y lo relativamente sencillo que es de utilizar si se lo compara con los modelos más avanzados.

Aermol también es un modelo Gaussiano de estado estacionario, y desde 2006 es el modelo “preferido” de la EPA para el tratamiento de la dispersión a escala local. Como este modelo incorpora técnicas más avanzadas que ISC3 para el modelado de la dispersión de contaminantes (parametrización de la capa límite planetaria, dispersión convectiva, elevación de la pluma e interacciones complejas del terreno con la pluma), exige un número superior de variables

meteorológicas, lo que junto a la mayor complejidad de los algoritmos empleados genera elevados costos computacionales.

Asimismo, Calpuff es un modelo Gaussiano pero que se diferencia de los anteriores en que es de estado no estacionario. Calpuff es el modelo “preferido” de la EPA para el transporte de contaminantes de largo alcance: considera irregularidades del terreno, puede modelar la transformación química y física de los contaminantes para distancias de hasta 100 km y utiliza meteorología en altura como datos de entrada.

Por último WRF-Chem (Weather Research and Forecasting) es un modelo de escala regional y simula el transporte, la mezcla y la transformación química de gases traza y aerosoles simultáneamente con la meteorología. Este modelo es mucho más exhaustivo que los anteriores, por lo que requiere una gran cantidad y calidad de datos: meteorología a distintos niveles, topografía, observaciones satelitales, etc.

Teniendo en cuenta que la población de Malagueño se encuentra a tan solo dos kilómetros de la fuente estudiada (dispersión a escala local), y que ISC ha sido ampliamente validado y ofrece resultados robustos, es que para este trabajo se ha decidido utilizar este modelo para estimar el impacto de la dispersión de PM10 en la zona mencionada.

MODELADO ESTOCÁSTICO DE LA DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES

Para el modelado de la concentración de PM10 considerando la estocasticidad de las variables atmosféricas y de emisión, se han combinado los algoritmos del modelo ISC con la simulación Monte Carlo (MC). Esta nueva aplicación, denominada ISC-MC, ha sido desarrollada mediante la implementación de un código VBA (Visual Basic for Applications), acoplado al utilitario Crystal Ball.

El método de MC es un algoritmo en el que los valores que toman las variables independientes del modelo, son sorteados repetitivamente a partir de sus distribuciones de probabilidad, mediante la generación de números aleatorios.

Para este trabajo se ha aplicado el Método de Transformación Inversa, la cual se realiza en una serie de pasos, pero que en ISC-MC se realizan de forma automática.

Estos pasos son:

1. Obtener la función de densidad acumulada $F=F(X)$.
2. Invertir la función, quedando $X = F^{-1}(U)$
3. Generar un número aleatorio “u” entre 0 y 1 a par-

tir de la distribución uniforme U.

4. Reemplazar este número “u” en la función inversa y obtener “x”.

Los pasos 3 y 4 se repiten tantas veces como sea necesario.

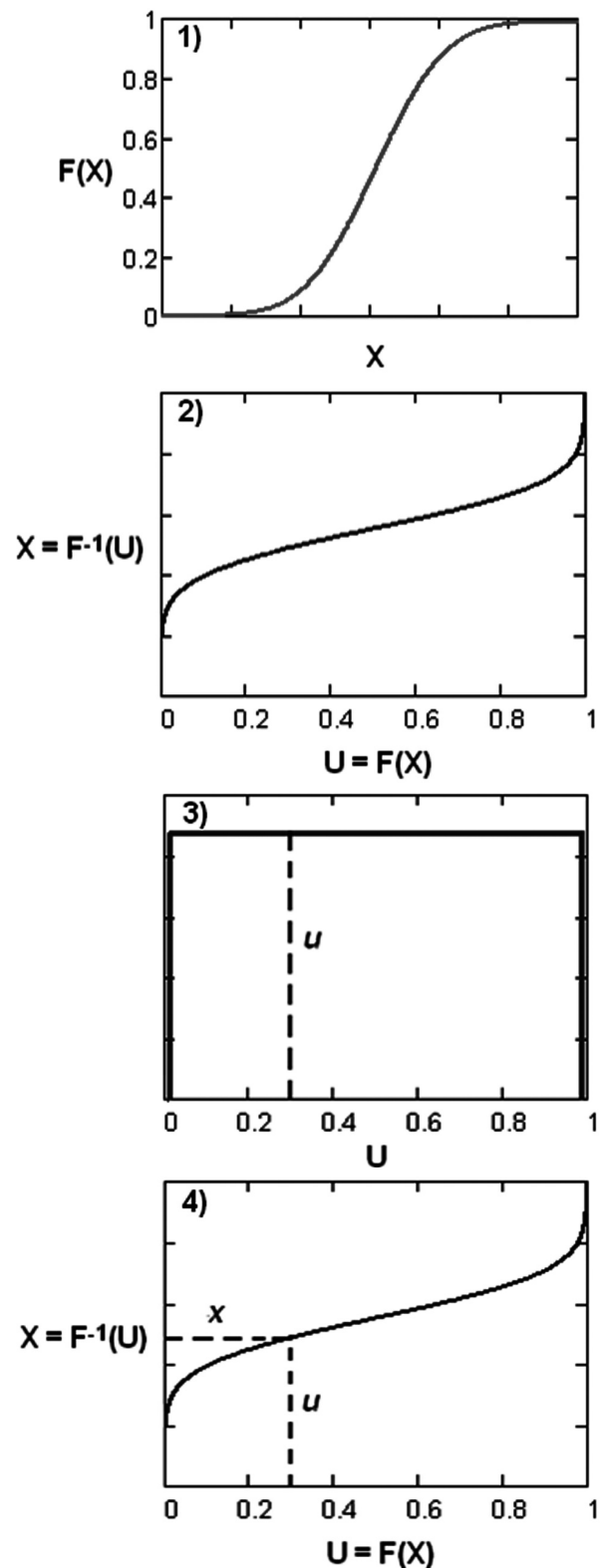


Figura 2: Pasos del Método de Transformación Inversa.

Cada vez que se genera un conjunto de valores para las variables (iteración), se obtiene el valor de salida mediante las operaciones matemáticas del modelo. Los conjuntos de valores sorteados, junto a la respuesta que produce son almacenados para su posterior análisis (Glasserman, 2003).

En la aplicación aquí desarrollada, en lugar de alimentar al modelo con valores puntuales de factores meteorológicos y de emisión, ambos tipos de variables son caracterizadas mediante distribuciones de probabilidad, por lo que los resultados obtenidos son distribuciones de concentración de PM10 para un determinado receptor.

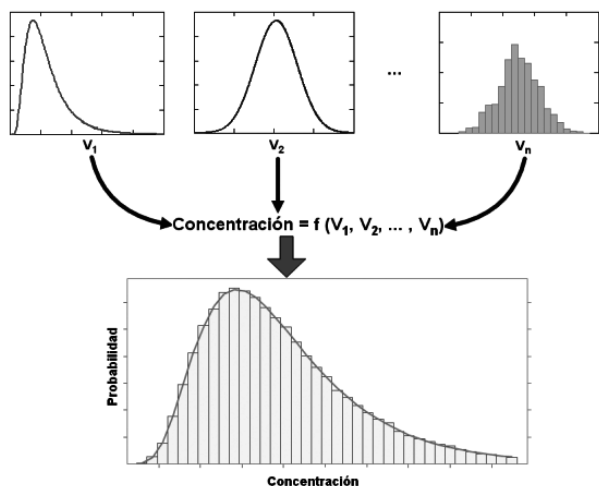


Figura 3: Modelo conceptual del método de Monte Carlo.

CASO DE ESTUDIO

Con el fin de aplicar la metodología desarrollada, ha sido seleccionada una fuente puntual estacionaria, ubicada a aproximadamente dos kilómetros de la Ciudad de Malagueño (Ver Figura 4). La elección de esta fuente radica principalmente en la disponibilidad de datos meteorológicos y de emisión.

Datos de emisión

La fuente bajo estudio tiene una altura de 30 metros, y un diámetro de 3 metros. En cuanto a los parámetros de emisión (tasa de emisión, temperatura y velocidad de salida) se dispone de datos pertenecientes a 14 muestreos realizados en el período 2006-2007. En la Tabla I se presenta un resumen estadístico de los parámetros de emisión.

Debido a que solo se cuenta con 14 mediciones de los parámetros de emisión, no es factible ajustar distribuciones teóricas complejas (EPA, 2002). Es por

ello que la variabilidad de los parámetros de emisión ha sido caracterizada mediante distribuciones simples. En el caso de aplicarse a situaciones en las que se disponga de mayor cantidad de muestreos (mayor a 30) podrían ajustarse distribuciones teóricas de mayor complejidad, seleccionando aquella que provea el mejor ajuste (por ejemplo utilizando el Método de Máxima Verosimilitud). En este caso, como se dispone de un valor mínimo y un máximo, se definirá a las variables de emisión suponiendo que siguen una distribución uniforme. En las Figura 5, 6 y 7 se pueden observar las distribuciones supuestas para los parámetros de emisión.



Figura 4: Imagen satelital de la fuente respecto de Malagueño.

Estadísticos	Temperatura [K]	Velocidad [m/s]	Tasa de Emisión [mg/s]
Media	442,50	12,70	115,28
Error típico	3,84	0,51	4,52
Mediana	445,15	12,70	116,13
Desviación estándar	14,37	1,90	16,90
Varianza de la muestra	206,37	3,61	285,74
Curtosis	-1,41	-0,94	0,02
Coefficiente de asimetría	-0,42	0,19	0,26
Rango	40,00	5,98	59,98
Mínimo	420,15	9,98	90,01
Máximo	460,15	15,96	150,00

Tabla I: Resumen estadístico de los parámetros de emisión.

Datos Meteorológicos

Los datos de dirección y velocidad del viento, estabilidad atmosférica y temperatura ambiente han

sido obtenidos del Servicio Meteorológico Nacional (SMN) y corresponden a 5 años de datos horarios (período 2004-2008). Para el caso de la altura de la capa de mezcla, los datos han sido derivados según metodología propuesta por la EPA (EPA, 1992).

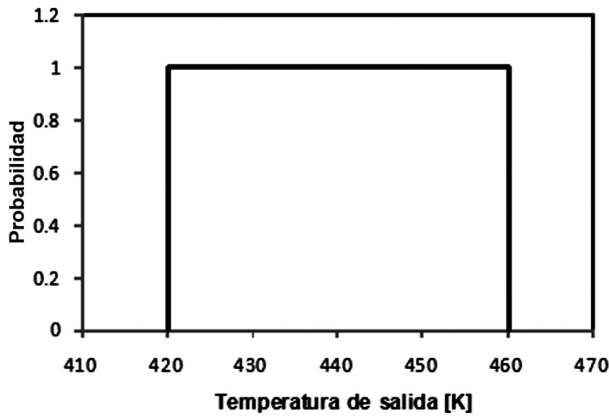


Figura 5: Distribución de la temperatura de salida.

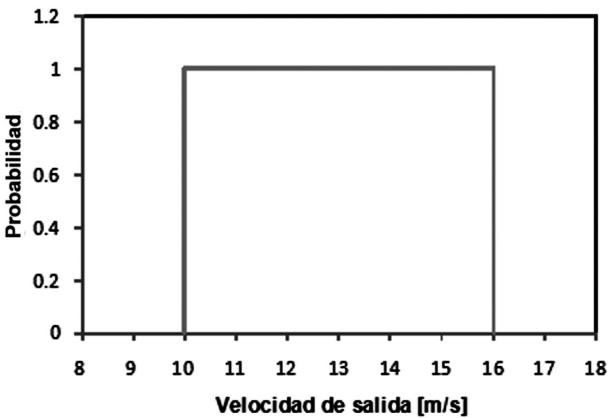


Figura 6: Distribución de la velocidad de salida.

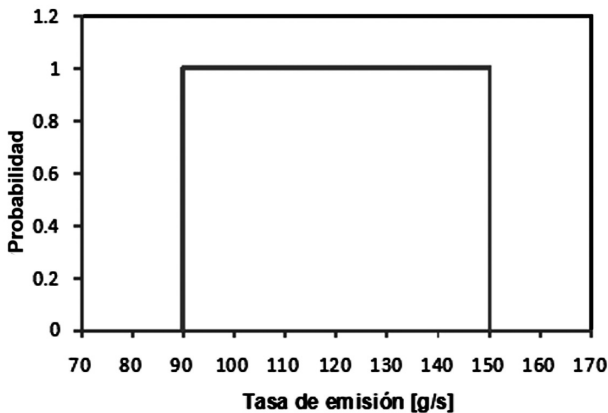


Figura 7: Distribución de la tasa de emisión.

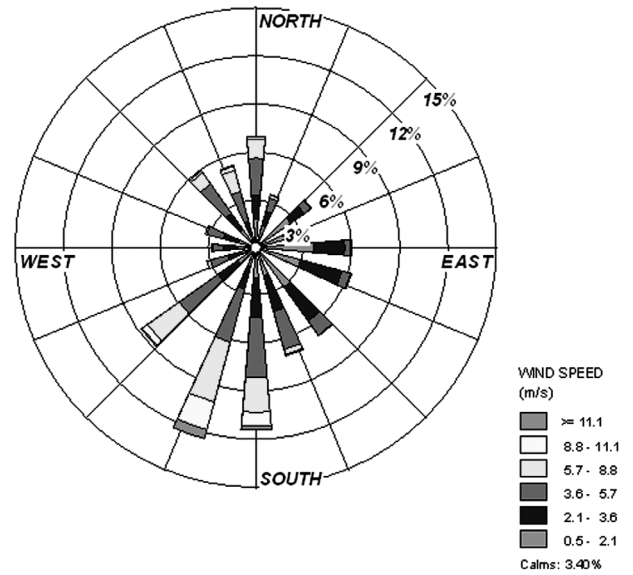


Figura 8: Rosa de los vientos periodo 2004-2008. El gráfico indica hacia donde se dirige el viento.

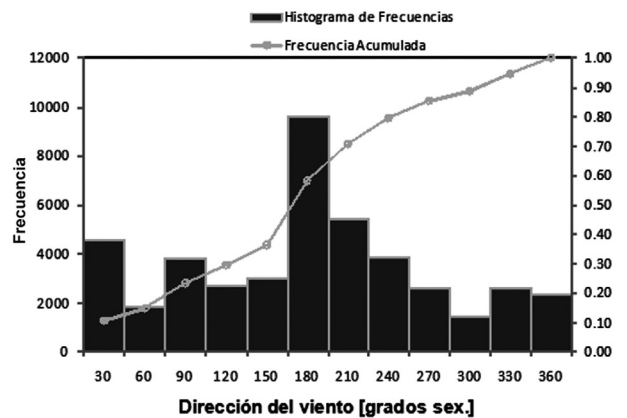


Figura 9: Histograma de frecuencias y frecuencia acumulada de la dirección del viento.

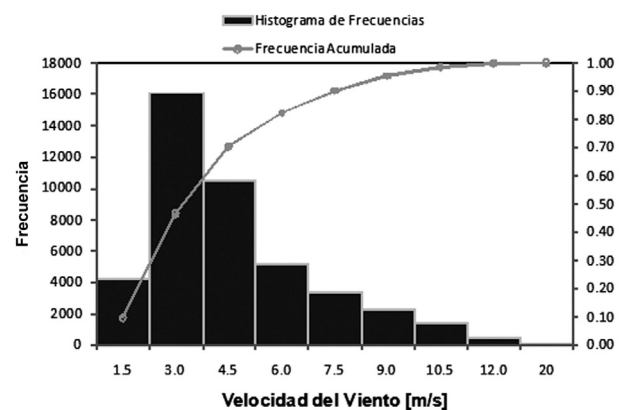


Figura 10: Histograma de frecuencias y frecuencia acumulada de la velocidad del viento.

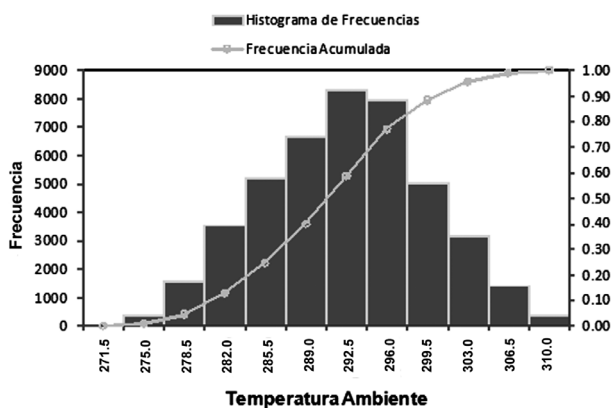


Figura 11: Histograma de frecuencias y frecuencia acumulada de la temperatura ambiente.

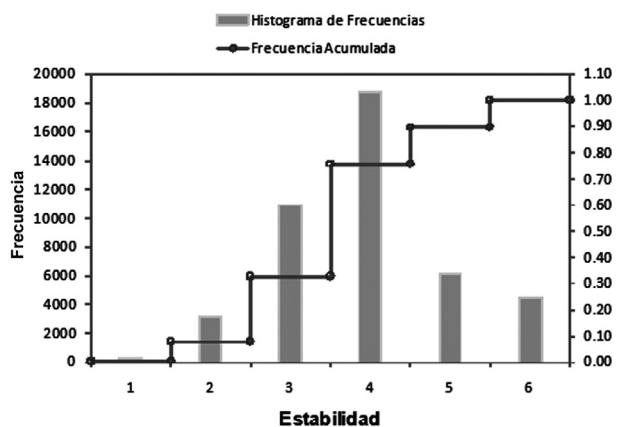


Figura 12: Histograma de frecuencias y frecuencia acumulada de la estabilidad atmosférica.

Ubicación receptores y topografía del terreno

La zona bajo estudio ha sido representada por una grilla de 187 nodos (receptores) separados entre sí cada 100 metros (grilla de 17 x 11). Ésta cubre totalmente la zona urbana de Malagueño.

Para este trabajo se considerará que el terreno es plano y sin obstáculos entre la fuente y los receptores. Además, como menos del 50% de la zona de influencia, determinada por un círculo de 3 kilómetros de radio con centro en el foco emisor, corresponde a zonas industriales, comerciales o residenciales se considerará que la zona de afectación es del tipo rural (EPA, 2005b).

RESULTADOS OBTENIDOS CON ISC-MC

En la Figura 11 se muestran los resultados obtenidos con ISC-MC para una simulación de 100.000 iteraciones, calculando la concentración horaria de PM10 para el receptor máximamente expuesto en

la zona urbana de Malagueño, el cual se encuentra a 1700 metros de la fuente en dirección Norte (X= 0m, Y= 1700m).

Se puede apreciar que el valor obtenido para la Media es de 26.32 µg/m³, para la Mediana (Percentil 50) 3.63 µg/m³, y para el Percentil 95 de 135.59 µg/m³. Esto último implica que el 95% del tiempo, la concentración de PM10 para este receptor será menor o igual a 135.59 µg/m³.

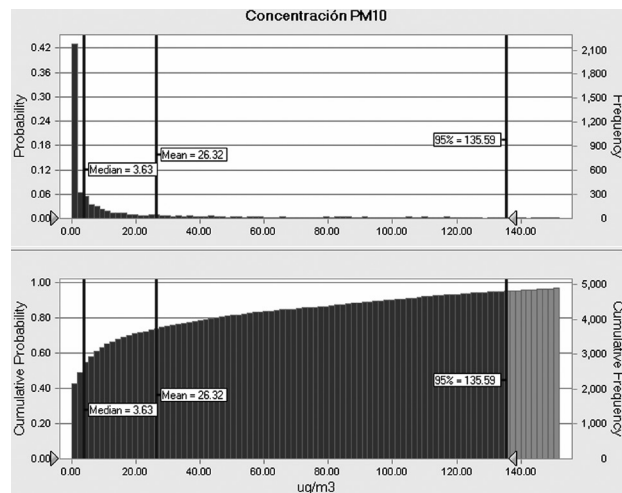


Figura 13: Densidad de probabilidad y probabilidad acumulada concentración de PM10.

COMPARACIÓN ISC VS ISC-MC

ISC-MC ha sido validado mediante la contrastación de los resultados con ISC. En la Tabla II se muestran los resultados, los cuales muestran un alto grado de correspondencia entre los resultados de ambos modelos.

Estadísticos	ISC	ISC-MC
Muestra (n)	43848	100000
Media	26.45	26.32
Mediana	3.60	3.63
Desv. estándar	44.68	44.96
Curtosis	3.71	3.79
Coef. de asimetría	2.23	2.13
Rango	236.52	231.64

Tabla II: Comparación ISC vs ISC-MC.

La diferencia fundamental entre ISC e ISC-MC es la versatilidad para evaluar la distribución de concentraciones. Mientras que para el primero es requerido el postratamiento de los datos, el cual se realiza de forma externa, ISC-MC entrega como producto la distribución y los distintos parámetros que la definen.

En segundo término, los escenarios evaluados por ISC se hallan acotados a la disponibilidad de datos meteorológicos. Con esto se quiere hacer referencia a que si se dispone de un año de datos meteorológicos se pueden obtener hasta 8760 estimaciones de concentración horaria (1 año \approx 8760 hs), hasta 365 estimaciones de concentraciones promediadas en 24 hs y hasta una concentración promedio anual. Con ISC-MC se puede simular una cantidad muy superior de escenarios, partiendo de las distribuciones de probabilidad de las variables de entrada. En este trabajo, por ejemplo, fueron utilizados 5 años de datos meteorológicos, tanto para ISC como para ISC-MC. Mientras que para ISC solamente se pudieron generar aproximadamente 43800 estimaciones de concentración (5 años x 8760 hs) con ISC-MC se generaron 1×10^5 escenarios (100000 iteraciones), lo que implica en este caso más del doble de situaciones modeladas a partir del mismo conjunto de partida, pudiendo en caso de ser necesario generar muchas más iteraciones. Esta capacidad de generar escenarios diferentes a los predichos con ISC, tiene la ventaja de poder proveer de información valiosa en la predicción de eventos contaminantes, que de otra forma no podrían ser evaluados.

Otra ventaja que posee ISC-MC es que requiere del ajuste mediante distribuciones teóricas de las variables de entrada, lo que implica tener una apreciación más detallada respecto del comportamiento de dichas variables. Con ISC, o cualquier otro modelo que requiera de la introducción de datos sin un análisis previo de los inputs, no es posible alcanzar este nivel de detalle, lo que podría significar, por ejemplo, la utilización de datos erróneos, pudiendo generar resultados improbables. Es decir que ISC-MC podría ser utilizado como parte del aseguramiento de la calidad de los datos, al mismo tiempo que se obtiene una perspectiva más pormenorizada de las variables de entrada.

Una cuestión no menor, es que con ISC-MC se podría modelar la variabilidad de los factores de emisión de una forma más realista que lo que puede realizar ISC. A pesar de ello en este trabajo la variabilidad de la emisión ha sido modelada de forma simplista, debido a la insuficiencia de los datos disponibles. De todas formas, esta herramienta tiene una gran potencialidad, ya que con la recolección de más datos (y de mejor calidad) se podría mejorar la descripción de dichas variables generando resultados con una menor incertidumbre.

En contrapartida, la forma en que ISC puede representar la variabilidad de las emisiones es limitada y poco realista. Con ISC se puede variar la emisión:

-según la hora del día, lo que implica que todos los días del año (por ej. a las 8 de la mañana) se tendrían los mismos valores de emisión.

-según la hora y la estación del año, lo que implica que todos los días de una estación en particular (por ej. a las 8 de la mañana, de todos los días de otoño), se tendrían los mismos valores de emisión.

-según los meses, lo que implica que todos los días de un mes en particular (por ej. a las 8 de la mañana, de todos los días de junio), se tendrían los mismos valores de emisión.

Estas tres opciones, si bien permiten estudiar algunos escenarios, no tiene asociada la probabilidad de ocurrencia, además de que considerar que todos los días (del año / de otoño / de junio) a la misma hora se tiene la misma emisión es desde luego muy poco realista.

Finalmente, en la Tabla III se compara el valor máximo para el receptor máximamente expuesto estimado con ISC, versus el Percentil 95 obtenido con ISC-MC, utilizando en ambos casos los mismos datos y las mismas opciones de modelado.

Esta comparación se presenta dado que la EPA sugiere que las decisiones en lo que hace a la gestión de riesgos a la salud, deberían basarse en el peor de los escenarios cuando la información o las herramientas disponibles no permitan análisis más detallados. Si bien con ISC se podrían realizar análisis más exhaustivos (mediante el postratamiento de los datos) el objetivo primario y para el cual ISC fue diseñado, es hallar la concentración máxima en un determinado período de tiempo.

Por otra parte, la misma EPA toma una posición menos conservadora en el caso de disponer de información y/o herramientas más detalladas, proponiendo que la toma de decisiones se fundamente en la cola de la distribución (por ej. Percentil 95) (EPA, 2002), nivel de información que puede ser obtenido mediante la aplicación del modelo ISC-MC.

Los resultados indican que el valor máximo obtenido con ISC representa más del doble del Percentil 95 obtenido con ISC-MC, lo que indica el nivel de conservadurismo implicado en la información brindada por ISC.

Estimación	Concentración [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
ISC (Máximo)	308,4
ISC-MC (Perc. 95)	135,6

Tabla III: Comparación máxima concentración ISC vs percentil 95 ISC-MC.

CONCLUSIONES

En este trabajo se ha estimado la concentración de PM10 considerando la variabilidad de las variables atmosféricas y de las de emisión, mediante el desarrollo de un modelo que combina el método de Monte Carlo con los algoritmos de dispersión del modelo ISC. Este modelo, denominado ISC-MC, ha sido desarrollado mediante la implementación de un código en VBA (Visual Basic for Applications), acoplado con el utilitario Crystal Ball (Palisade Corporation). Como caso de estudio fue tomada la Ciudad de Malagueño, la cual se ubica aproximadamente a 2 km de un complejo de chimeneas emisoras de PM10.

Para una simulación de 100.000 iteraciones, la concentración horaria de PM10 para el receptor máximamente expuesto ($X=0\text{m}$, $Y=1700\text{m}$), muestra que el Percentil 95 tiene un valor de $135.59 \mu\text{g}/\text{m}^3$ y que la Media es de $26.32 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Se encontró que el Percentil 95 representa menos del 50% del valor máximo obtenido con ISC (utilizando los mismos datos y opciones de modelación).

La principal diferencia respecto de la estimación determinista, es que ahora es posible conocer la ubicación de los percentiles de interés.

En segundo término ISC-MC tiene la potencialidad de generar innumerables escenarios, pudiendo proveer de información valiosa para la predicción de eventos contaminantes, que de otra forma no podrían ser evaluados.

Además ISC-MC, dado que es necesario ajustar las distribuciones de las variables de entrada, podría ser utilizado como parte del aseguramiento de la calidad de los datos ingresados, adquiriendo al mismo tiempo información respecto del comportamiento de dichas variables.

Por último con ISC-MC es factible modelar la variabilidad de la emisión de una forma más realista de lo que el modelo ISC puede realizar.

En definitiva, la aplicación presentada aquí ha permitido estimar la distribución de concentraciones de PM10 teniendo en cuenta distintos escenarios e

identificar los valores que toman aquellos percentiles utilizados en la toma de decisiones.

REFERENCIAS

Dawidowski, L., Gómez, D. y Reich, S. (1997). “Guía metodológica para la Evaluación del Impacto Ambiental Atmosférico”. Honorable Cámara de Diputados de la Nación.

EPA (1992). Screening Procedures for Estimating the Air Quality Impact of Stationary Sources. Revised (EPA-454/R-92-019).

EPA (2002). Risk Assessment Guidance for Superfund: Volume III - Part A, Process for Conducting Probabilistic Risk Assessment. Office of Emergency and Remedial Response.

EPA (2005) a. Human Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities. Chapter 3: Air Dispersion and Deposition Modeling.

EPA (2005) b. Revision to the Guideline on Air Quality Models: Adoption of a Preferred General Purpose (Flat and Complex Terrain) Dispersion Model and Other Revisions; Final Rule.

Gifford, F. A. (1960). “Atmospheric Dispersion Calculations Using the Generalized Gaussian Plume Model”. Nuclear Safety. Vol. 2, pp. 56-59.

Glasserman, P. (2003). “Monte Carlo methods in financial engineering”. Springer Verlag.

OEHHA, (2003). “The Air Toxics Hot Spots Program Guidance Manual for Preparation of Health Risk Assessments”.

Pasquill, F. (1974). “Atmospheric Diffusion: The Dispersion of Windborne Material from Industrial and Other Sources”. 2nd Ed., John Wiley and Sons.

Raychaudhuri, S. (2008). “Introduction to Monte Carlo simulation”. Proceedings of the 2008 winter simulation conference. pp. 91-100.

Resolución ENRE N° 13 (1997). Ente Nacional Regulador de la Electricidad.

Resolución N° 242. (1997). Provincia de Buenos Aires.

Turner, D. B. (1964). “A diffusion model for an urban area”. Journal of Applied Meteorology and Climatology. Vol. 3, pp. 83-91.

Turner, D. B. (1970). “Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates”. PHS Publication N° 999-AP-U.S. Department of Health, Education and Welfare, National Air Pollution Control Administration.