

## **Metodología para la calibración de modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos. Caso de estudio: dispersión de $PM_{10}$ en el entorno de La Habana.**

### **Calibration methodology for air pollutants dispersion models. Case Study: $PM_{10}$ dispersion in the surroundings of Havana.**

*Milvia B. González Cruz<sup>1</sup>, Saturnino F. Pire Rivas<sup>1</sup>, Luis F. Cuesta Zedeño<sup>1</sup>, P. Amparo López Jiménez<sup>2\*</sup>*

<sup>1</sup>Centro de Estudio Ingeniería de Procesos. Facultad de Ingeniería Química. Instituto Superior Politécnico José A. Echeverría. Calle 114, No. 11901. Entre 119 y 129. Cujae. Marianao. La Habana, Cuba.

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Hidráulica y Medio Ambiente. ETSII, Universitat Politècnica de València. Camino de Vera, s/n. 46022. Valencia, España.

(Recibido el 10 de julio de 2012. Aceptado el 19 de septiembre de 2013)

#### **Resumen**

El presente documento describe una metodología general para la calibración de modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos. La simulación numérica de este fenómeno es un proceso complejo debido a la cantidad de factores de los que depende. La principal contribución de este trabajo es la consideración conjunta en una única metodología del análisis de incertidumbre y el de sensibilidad. Asimismo, se aplica con gran éxito en el proceso de calibración del modelo gaussiano de dispersión ISCST3, implementado en un área densamente poblada, el Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría (CUJAE) ubicado en La Habana.

**Palabras Clave:** calibración modelos de dispersión, sensibilidad, incertidumbre, gaussiano, ISCST3, contaminante conservativo,  $PM_{10}$

---

\* Autor de correspondencia: teléfono: + 34 + 96 + 3877000, ext. 86106, fax: + 34 + 96 + 3877618, correo electrónico: palopez@upv.es (P. López)

## Abstract

This paper describes a general methodology for calibration of air pollutants dispersion models. Numerical simulation of this phenomenon is a complex process due to it depends on many factors. Main contribution of this paper is to consider in a unique calibration methodology of uncertainty and sensitivity analysis. Furthermore, the methodology is applied successfully in the calibration process gaussian dispersion model ISCST3 applied in a densely populated area, the Higher Polytechnic Institute José Antonio Echeverría (CUJAE) in Havana.

**Keywords:** Dispersion models calibration, sensitivity analysis, uncertainty, gaussian model, ISCST3, conservative pollutant,  $PM_{10}$

## Introducción

La modelación de la calidad del aire se ha convertido en los últimos tiempos en una herramienta indispensable para caracterizar la calidad de vida en las ciudades. Sin embargo, el proceso de modelación del movimiento de los contaminantes en la atmósfera es complejo e implica muchos aspectos, tanto la evolución físico-química de los contaminantes en el medio receptor, como de las estrategias matemáticas que se ven involucradas en el proceso de modelación en sí. Con el desarrollo de las técnicas computacionales, se dispone cada vez de forma más accesible y rápida, de herramientas para la realización de estas simulaciones. Cuando se emplea un modelo para el análisis de una situación real o para la toma de decisiones relativas a las posibles acciones futuras o de cumplimiento ambiental, es necesario que previamente se haya demostrado que dicho modelo y los valores de sus parámetros son razonablemente representativos de las condiciones del sitio. Por ello se hace imprescindible pasar un exhaustivo proceso de calibración y validación antes de ser aceptado como herramienta en la toma de decisiones. En este marco, se encuentra la investigación que a continuación se desarrolla. El objetivo de este estudio es proponer una metodología extrapolable para la calibración de modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos e implementarla en un caso de estudio particular.

Una vez se ha calibrado el modelo, éste tiene que acoplarse a una serie de datos obtenidos de la realidad, y que no hayan sido empleados para la calibración, y debe dar un error mínimamente aceptable: la validación [1]. Un modelo bien calibrado y validado debe servir para predecir situaciones futuras o situaciones hipotéticas que puedan ser de interés, adelantándose a los acontecimientos.

La presente contribución tiene precedente en un estudio que realizó el proceso de análisis de sensibilidad realizado sobre el modelo ISCST3 aplicado a un área densamente poblada, el Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría (CUJAE) ubicado en la Habana [2]. Este estudio no llegó a implementar una metodología de calibración, sino que se realizó el análisis de sensibilidad variando los valores de entrada de los siguientes parámetros: velocidad del viento, albedo medio, razón de Bowen y rugosidad de la superficie.

En esta oportunidad se cuenta con las mediciones de concentraciones de  $PM_{10}$  (partículas con un diámetro aerodinámico igual o inferior a  $10\mu m$ ) en la zona de estudio. Se ha analizado las características de las fuentes del inventario de emisiones y recurrido a factores de emisión (EF por sus siglas en inglés) que deberán ser añadidas al estudio previo de análisis de sensibilidad para tener una modelación completa que permita contrastar con las mediciones.

## Metodología propuesta para la calibración de modelos de dispersión de contaminantes

La calibración es el proceso de ajuste de los parámetros internos del software con el fin de mejorar el acuerdo entre las predicciones del modelo y algunas condiciones de referencia dentro de los criterios aceptables [3]. Por lo tanto, la calibración es de suma importancia si de la fiabilidad del modelo se trata. Un modelo bien calibrado asegura su uso futuro como herramienta de decisión. En la literatura reciente se proponen muchos conceptos interesantes acerca de la construcción, definición, conceptos y las simulaciones, específicamente para modelos de medio ambiente [4-6].

Para acelerar el proceso de ajuste es recomendable identificar los parámetros más influyentes en los resultados del modelo. El modo de identificar estos parámetros es mediante el análisis de sensibilidad, variando en un porcentaje estos parámetros y observando cómo varían los resultados y con qué peso relativo.

La principal contribución de este trabajo es la consideración conjunta de la metodología de calibración propuesta integrando en una metodología única el análisis de incertidumbre y el de sensibilidad. En el esquema presentado en la figura 1 se describe el desarrollo de la misma.

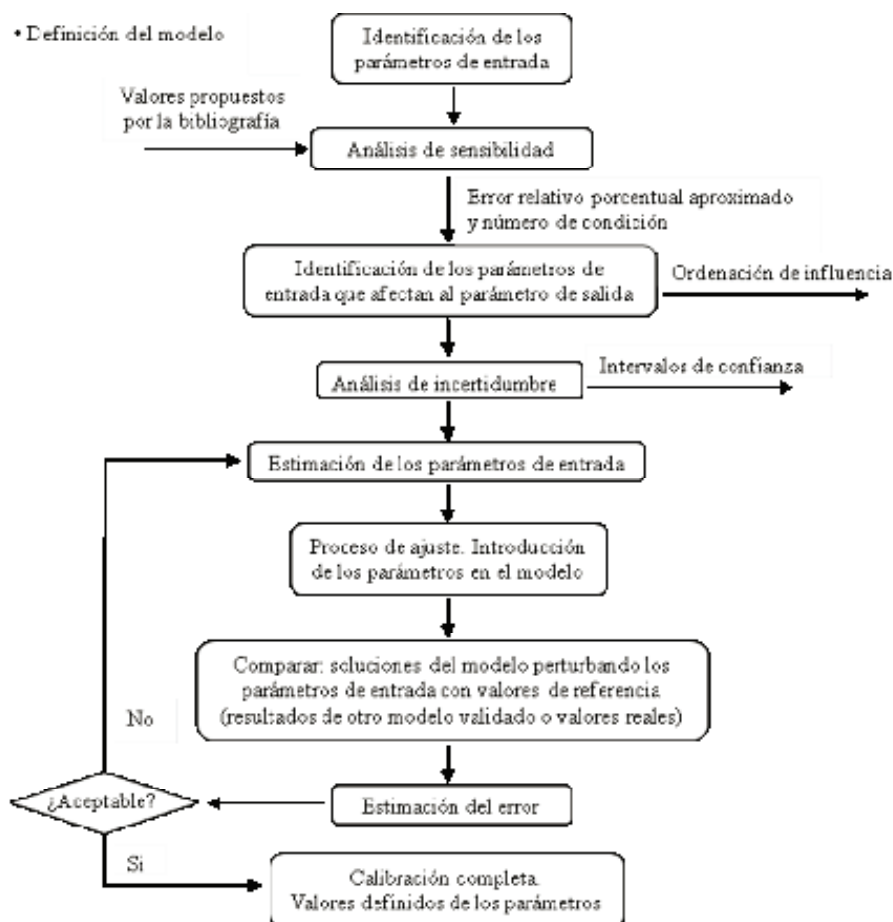


Figura 1 Metodología propuesta para la calibración de modelos de dispersión

### **Estimación de los parámetros. Análisis de sensibilidad**

El primer paso para inicializar la estrategia de modelado es identificar variables de entrada y de salida. El modelador tiene que identificar los parámetros que intervienen en las ecuaciones y entre ellos determinar cuáles pueden transferir mayor error a los resultados debido a que se desconoce su valor real y se emplean valores típicos o estimaciones. En estos casos por lo general se inicializan las simulaciones con valores por defecto, que se encuentran a partir de referencias bibliográficas o estimaciones anteriores.

Las variables medidas presentan su error inherente a las predicciones del modelo. Las mediciones no son exactas, ya que presentan un error aleatorio pues las imperfecciones en las técnicas de medición e instrumentos de observación pueden dar lugar a pequeñas variaciones. Incluso, debido a sesgos en aparatos de medición, el procedimiento experimental y la consideración humana, el valor al que converge la medición, puede ser diferente del valor verdadero de interés. Por lo que al introducir en el modelo parámetros de entrada medidos en mayor o menor grado también se pueden transmitir sus errores a los valores calculados (modelado). Por ello se considera de interés incluir en el estudio de sensibilidad parámetros que, aunque sean medidos se consideren vitales en el proceso de dispersión de contaminantes atmosféricos y por tanto será interesante conocer cómo y en qué medida influyen en los valores calculados mediante la simulación numérica.

El análisis de sensibilidad es una manera de comprender el comportamiento del modelo. En este caso, se aplica una perturbación en el parámetro analizado y como resultado se obtienen los valores: error relativo porcentual aproximado y número de condición ( $N_c$ ).

El error relativo porcentual aproximado, no es más que una normalización del error usando la mejor estimación posible al valor verdadero

[7], en este caso se emplea el valor estimado para las condiciones del caso base (en el cual se emplearon las medias anuales, el valor medio de los parámetros en los rangos establecidos). La modificación de la ecuación propuesta por los autores antes referidos para el estudio planteado, quedaría, según expresión (1):

$$\varepsilon_{\alpha} = \left| \frac{C_{\alpha} - C_{cb}}{C_{cb}} \times 100\% \right| \quad (1)$$

Donde:

$\varepsilon_{\alpha}$ : error relativo porcentual aproximado.

$C_m$ : concentración de contaminantes máxima o mínima.

$C_{cb}$ : concentración de contaminantes estimada para el caso base.

De acuerdo con Chapra y Canale [7] el resultado puede ser positivo o negativo, siendo el valor absoluto porcentual lo esencial, por lo que se ha planteado la ya descrita ecuación (1) de manera que se obtengan los valores absolutos.

Se ha analizado además el denominado por la bibliografía número de condición. Según Chapra [8] expresar los resultados a través de la relación representada por la ecuación (2) es un buen refinamiento para un análisis de sensibilidad ya que es una función de transferencia que propaga el error relativo del parámetro a la predicción.

$$N_c = \left| \frac{\frac{\Delta \text{Concentración}}{C_0}}{\frac{\Delta \text{Parámetro}}{P_0}} \right| \quad (2)$$

Donde:

$N_c$ : número de condición.

$P_0$ : menor valor del parámetro estudiado en el rango definido.

$C_0$ : concentración del contaminante calculado por la simulación para  $P_0$ .

Finalizado el análisis de sensibilidad y determinados los efectos relativos aproximados y el  $N_c$  para todos los parámetros de entrada sobre los de salida, se debe proponer una lista de acuerdo a la influencia de cada uno de los parámetros de entrada en los resultados del modelo, determinados según el  $N_c$ .

### **Análisis de incertidumbre**

En este paso se estima la incertidumbre en el resultado del modelo inducido por las incertidumbres en sus entradas. Ayudará al modelador a evaluar la fiabilidad de las predicciones mediante la definición de los intervalos de confianza que aparecen en torno a los resultados medios del modelo. Esta información permitirá conocer cuándo el proceso de calibración ha terminado y que nivel aceptable de precisión se ha logrado.

La precisión de los parámetros estimados se indica por el tamaño (amplitud) de su región de confianza conjunta [9]. “Conjunta” indica que todos los parámetros en el modelo se consideran al mismo tiempo. Las regiones de confianza de ambos (valores predichos y valores de referencia) debe superponerse para considerar que la calibración ha terminado, por lo tanto, el análisis de incertidumbre es la herramienta que permite definir los criterios para un nivel aceptable de ajustes entre el modelo y las referencias.

Para conocer la amplitud de la región de confianza, o más bien la banda de confianza alrededor del valor calculado por el modelo, se determinará la desviación típica relativa de la variable de salida, ver ecuación (3), para cada punto de cálculo, considerando la sumatoria de los efectos que producen las perturbaciones de todos los parámetros.

$$\sigma_{Rpsal} = \sqrt{\sum_{i=1}^n (\sigma_{Rpenrada} \times N_{Cprom})^2} \quad (3)$$

Donde:

$\sigma_{Rpsal}$ : desviación típica relativa del parámetro de salida.

$\sigma_{Rpenrada}$ : desviación típica relativa para cada parámetro de entrada.

$N_{Cprom}$ :  $N_c$  promedio para cada parámetro de entrada (transferencia promedio que propaga el error relativo de cada parámetro a la predicción del modelo).

### **Proceso de ajuste**

Para iniciar esta etapa, es necesario partir de una estimación de los parámetros de entrada que intervienen en el modelo para realizar la simulación numérica. Estos valores son tomados de la bibliografía o entre los intervalos conocidos de variación de los mismos. Pueden ser seleccionados dentro de estos intervalos con cierto grado de libertad.

Para ajustar los resultados estimados por el modelo a los datos de referencia se modifican ligeramente los valores de los parámetros de entrada. Para ello tradicionalmente se ha recurrido a métodos de ensayo-error, en los que variando los valores de dichos parámetros, el modelador va comprobando la bondad del ajuste del modelo. En este caso, esta búsqueda asistida por el análisis de sensibilidad que se manifiesta como una herramienta muy útil marcando el camino a seguir para la variación de estos parámetros.

Estos datos de referencia (considerados en el proceso de calibración como referencia para establecer el valor del error), pueden ser tomados de la realidad, de laboratorio u otro modelo, y ellos también tienen su propia incertidumbre, relacionada con las técnicas de medición

El proceso de ajuste es crucial en la metodología que se presenta. Se trata de un proceso iterativo, con el que se pretende que el error que se cometa con el cálculo de los valores de salida por el modelo y aquellos con los que se compara, sea el menor posible [1].

### Estimación del error de los resultados

Para definir cuál es el mejor ajuste se determinará el error medio normalizado según la ecuación (4), en el que se compara la concentración de referencia o medida con la calculada.

$$Error = \sum \frac{|c_{calc} - c_{referencia}|}{c_{referencia}} \times 100 \quad (4)$$

## Caso de estudio

### Inventario de fuentes

El caso de estudio es un área de 400 kilómetros cuadrados donde está ubicado el Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría (CUJAE) en La Habana. Este es el mayor centro del país en estudios de carreras de ingeniería y arquitectura, concebido en 1964. Con aproximadamente 8625 estudiantes externos, 2681 trabajadores y una población de 2048 residentes becados en la residencia estudiantil; dentro del Campus Universitario.

Para la aplicación del modelo, se ha realizado un inventario de fuentes y emisiones de contaminantes atmosféricos en el territorio, identificando: 47 calderas, un grupo electrógeno de 60MW de potencia, un vertedero de residuos sólidos urbanos y una fuente lineal (un tramo de carretera de 4km de longitud) siendo esta la vía más próxima al área de estudio, que se supone tiene gran impacto en la calidad del aire producto al flujo vehicular que por ella circula. Debido a la alta densidad poblacional de la CUJAE y la ubicación en sus alrededores de fuentes de contaminación atmosféricas considerables es de gran importancia el estudio de la calidad del aire en dicha zona.

Para el caso de estudio se emplea el software de dispersión ISCST3 desarrollado por la EPA (Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos), es un modelo de pluma gaussiana,

aplicable a múltiples fuentes incluyendo fuentes puntuales, superficiales, volumétricas, y lineales. El contaminante simulado será  $PM_{10}$ .

### Análisis de sensibilidad

Los factores de emisión (EF por sus siglas en inglés) de material particulado (PM por sus siglas en inglés) para fuentes de combustión son una función compleja que depende de la clasificación y composición del combustible, el tipo y tamaño de la instalación, las condiciones de combustión, carga, tipo de tecnologías de control y nivel de mantenimiento de los equipos [10].

La serie AP-42 es el principal medio por el que Grupo de Inventario y Factores de Emisión (EFIG) de la EPA ha documentado sus EF [11].

### Calderas

Teniendo en cuenta el tipo y características del combustible empleado y que todas las calderas incluidas en el inventario están dentro de la categoría de comerciales en la sección 1.3 de la serie AP-42 [12] se pueden encontrar los EF para varios tamaños aerodinámicos de PM, incluyendo  $PM_{10}$ , (tabla 1) y además el porcentaje másico de  $PM_{10}$  del total.

**Tabla 1** Factores de emisión para  $PM_{10}$ , según combustible empleado en calderas comerciales

$PM_{10}$	Combustible Residual	Combustible Destilado
EF	1,63 kg/m <sup>3</sup>	0,15 kg/m <sup>3</sup>
Porcentaje másico	62	55

El estudio de sensibilidad se realiza por separado para calderas que emplean como combustibles fuel óleo N<sup>o</sup> 2 (variando los EF desde 0,13 hasta 0,17kg/m<sup>3</sup>, cada 0.01kg/m<sup>3</sup>) y N<sup>o</sup> 6 (variando los EF desde 1,4 hasta 1,8kg/m<sup>3</sup> cada 0,1kg/ m<sup>3</sup>).

### Grupo de Generación Eléctrica (GE)

La sección 3.4 de la AP-42 [13] está dedicada a grandes motores (capacidad mayor 600hp) estacionarios de combustión interna y motores estacionarios de doble combustible, sin embargo no se facilitan los EF para motores de combustión interna que usan combustibles residuales, solo para aquellos que emplean diesel. (tabla 2). De acuerdo con Shah y col [14] se considera que la información sobre los EF actuales para generadores eléctricos es muy limitada en términos de tamaño de la población y la metodología de la prueba.

La guía de usuarios propuesta por la Agencia Europea de Medio Ambiente (EEA por sus siglas en inglés) para inventarios de emisiones dedica una sección a emisiones, EF y métodos de control para instalaciones de generación de energía. Reportando los EF para procesos de generación de electricidad pública (capacidad mayor a los 50 MW), considerando que el proceso es controlado y especificándolos por el tipo de combustibles utilizados.[15].

Dentro del inventario de fuentes se identificó un emplazamiento de generación eléctrica (grupo electrógeno), formado por seis baterías de cuatro motores, que expulsan los gases por una chimenea común para cada batería, cada uno de los 24 motores genera 2500 kW, para una potencia instalada de 60 MW. Una vez consultada la bibliografía hay que señalar que dicha instalación tiene sus peculiaridades, está conectada en paralelo al sistema nacional y está diseñada para trabajar con fuel óleo como combustible base y diesel para su arranque, parada, grandes fluctuaciones de la carga y para el barrido de las líneas. Se pudo comprobar en la bibliografía que este tipo de instalación se emplea habitualmente como generadores eléctricos de apoyo y generalmente emplean diesel como combustible.

Los EF de certificación para la planta en estudio están disponibles, sin embargo no se reportan para  $PM_{10}$ , solo para PM. La tabla 2 indica los valores de estos factores de emisión para los combustibles mencionados.

**Tabla 2** Factores de emisión para motores de generación de electricidad

<b>Tamaño de partícula (<math>\mu m</math>)</b>	<b>Combustible Residual</b>	<b>Combustible Destilado</b>	<b>Referencia</b>
$PM_{10}$	-	0.0887 kg/m <sup>3</sup>	AP-42, EPA
$PM_{10}$	0.0648 kg/m <sup>3</sup>	-	EEA, 2009
PM	0.36 kg/m <sup>3</sup>	-	Fabricante

La norma cubana 111:2004 [16] plantea que en ausencia de equipos para la determinación de  $PM_{10}$ , se asumirá como tales al 50% del valor de las emisiones totales de PM, por lo que teniendo en cuenta el valor de certificación el equipo se puede suponer que para  $PM_{10}$  el EF será aproximadamente 0,18 kg/m<sup>3</sup>.

Para análisis de sensibilidad de los EF se realizaron 7 simulaciones, para valores entre 0,15 y 0,21 kg/m<sup>3</sup> con una variación entre una entrada y la otra de 0,01.

### Vertedero de residuos sólidos urbanos

En la guía de la EEA afirman que las principales emisiones contaminantes del aire de este tipo de fuentes son el metano (CH<sub>4</sub>) y el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), conocidos gases de efecto invernadero, y son producidas por los microorganismos dentro del relleno sanitario en condiciones anaeróbicas [15, 17]. Ambos reportes concuerdan con que este tipo de fuentes emite PM generado en forma de polvo fugitivo,

vinculado principalmente al manejo de los residuos y producto del movimiento de fuentes móviles que viajan a lo largo de la superficie sin pavimento.

Dichas emisiones dependen de varios factores que son específicos para cada emplazamiento, como son: contenidos de limos o sedimentos en la superficie de la vía (partículas más pequeñas de 75 µm de diámetro), peso medio de los vehículos, longitud de la vía y cantidad de vehículos que circulan. Dado que el contenido de limo de una carretera rural varía con la localización geográfica, lo mejor para la estimación adecuada de las emisiones sería contar con un estudio particular de contenidos de limos [18].

Para el análisis de sensibilidad las variaciones en las entradas al software de las emisiones de PM<sub>10</sub> fueron acotadas por el rango de valores típicos del contenido de limos en la superficie, siendo este el único parámetro del que no se tenían datos reales. Para el resto de las variables de determinó el valor medio.

En el inventario de emisiones se recoge el vertedero más grande de la capital, el Vertedero Calle 100, fundado en 1976. Tiene un área de 104 hectáreas y en él se deposita el 80% de los residuos totales de la ciudad de La Habana. El valor aproximado de desechos por habitantes en la capital es de 0,7 kg y para el 2008 se reporta un estimado de 2.141.993 habitantes en dicha ciudad [19]. Teniendo en cuenta estos datos se estima que son depositados en el vertedero 1.199.516 kg diarios de residuos.

En el capítulo 13, de la serie AP-42 [18] se indica una expresión empírica usada para estimar los EF de PM de tamaños específicos para vehículos que viajan sobre superficies sin pavimentar, no considera las emisiones producto del desgaste de frenos, desgaste de los neumáticos y escapes del vehículo. Ver ecuación (5).

$$EF = k \times \left(\frac{s}{12}\right)^a \times \left(\frac{W}{3}\right)^b \quad (5)$$

Donde: *k*, *a* y *b* son constantes empíricas.

EF: factor de emisión de material particulado de tamaño específico (lb/millas).

*S*: contenido de limos o sedimentos en la superficie del camino (%).

*W*: peso promedio del vehículo (t).

*W* y *s*: parámetros de corrección para ajustar los estimados de emisiones a características locales.

En dicha sección se facilitan los valores de las constantes empíricas y el rango de valores para el contenido típico de limos según: el tipo de vía, el proceso industrial que se realiza y el tamaño del PM que se vaya a estimar. Asimismo, la ecuación (6) permite determinar las emisiones de polvo.

$$E = E \times VKTp \quad (6)$$

Donde:

*E*: emisiones de material particulado (lb/h).

EF: factor de emisión (lb/km recorrido).

*VKTP*: kilómetros transitados por toda la flota vehicular en la vía (km/h)

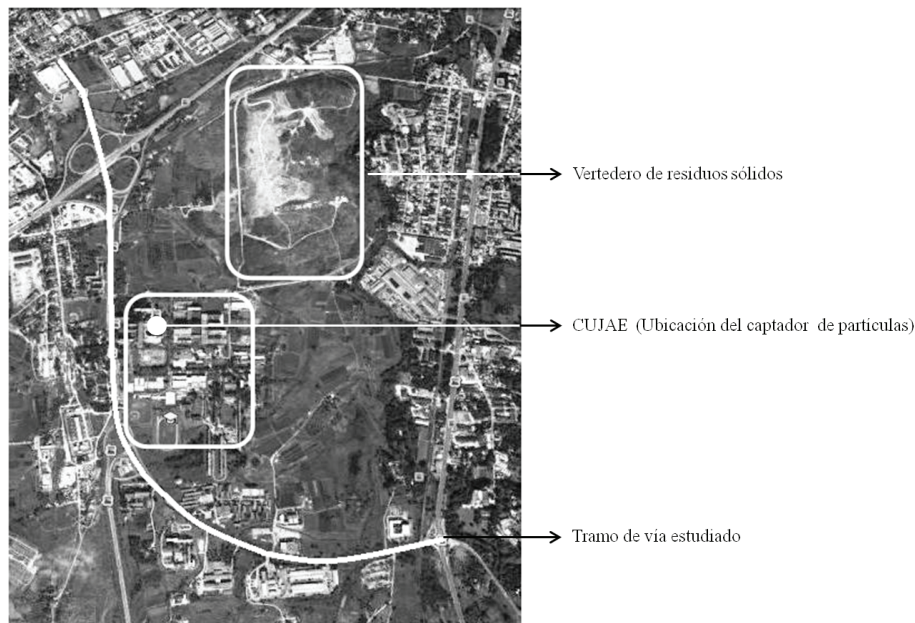
Contenidos típicos de porcentaje de limos o sedimentos en vías sin pavimentar de rellenos sanitarios están entre 2,2 y 21% [18]. Por lo que será el rango base de estudio en la determinación de las emisiones para el análisis de sensibilidad. Se realizaron un total de 9 simulaciones con una variación del contenido de limo de 2,32 (correspondiente con un 20%), a partir del cual se determinaron las emisiones correspondientes.

## Estimación de emisiones

### Fuente lineal (fuentes móviles)

Avenida 114-CUJAE: Arteria principal de cuatro carriles, con separador central y pavimento de hormigón hidráulico en buen estado. El tramo de vía de estudio, con 4 km de longitud (figura 2), presenta fuerte movimiento vehicular.





**Figura 2** Tramo de la fuente lineal modelada

El modelo Internacional de Emisiones Vehiculares (IVE por sus siglas en inglés) es una herramienta propuesta para estimar las emisiones de vehículos motorizados. Incluye un número importante de contaminantes: contaminantes criterios, tóxicos y con efecto invernadero. Permite estimar las emisiones de PM menor de  $10\mu\text{m}$  [20]. Así, se realizó un conteo vehicular, asumiéndose que todos los vehículos contados recorrieron los 4 km y ningún vehículo parte del propio tramo.

Los valores de los EF dependen de la pendiente de la vía, el tiempo promedio que tardan los vehículos en recorrer el tramo de vía de acuerdo con las paradas que deban realizar por semáforo, paso peatonal, paradas de ómnibus urbanos y de taxis, tipos de autos, combustible que utilizan, estado del vehículo, dispositivo reductor de emisiones y estrés del motor, entre otros [21].

La pendiente media de la vía es de 3%. Se modelaron por separado los vehículos en bajada y los vehículos en subida, por ello tienen estilos de conducción y estrés de motor diferentes, y previamente se midieron simultáneamente la velocidad de los vehículos y el tiempo que

demoraba en recorrer el tramo en los diferentes horarios.

### **Estimación de los parámetros de entrada**

En la simulación primaria, o simulación inicial a partir de la cual se realizará el proceso de calibración de la dispersión de  $\text{PM}_{10}$  empleando el software ISCST3, se incluyeron las 50 fuentes inventariadas. Se usaron las medias anuales propuestas por defecto por el código PCRAMMET de los siguientes valores: albedo medio (0,2075), razón de Bowen (1,625) y rugosidad de la superficie (1 m) [22]. Para el resto de los parámetros meteorológicos (datos de superficie) se emplearon los valores reportados por la estación meteorológica ubicada en el área de estudio para los años 2009-2011. En el caso de las calderas se usaron los EF propuestos por el registro AP-42 (tabla 1). Para el grupo de generación eléctrica se empleó el valor reportado por el fabricante modificado para  $\text{PM}_{10}$  ( $0,18 \text{ kg/m}^3$ ); y para la fuente lineal las emisiones determinadas por el IVE para los diferentes horarios del día.

Para la fuente área (el vertedero), se empleó el valor de  $EF=9.22 \cdot 10^6 \text{ g/(s} \cdot \text{m}^2)$  correspondiente con el 6,4%, del contenido de limos en su superficie del terreno, valor reportado por la AP-42 [18] como más probable, al no disponer de datos particulares para este caso.

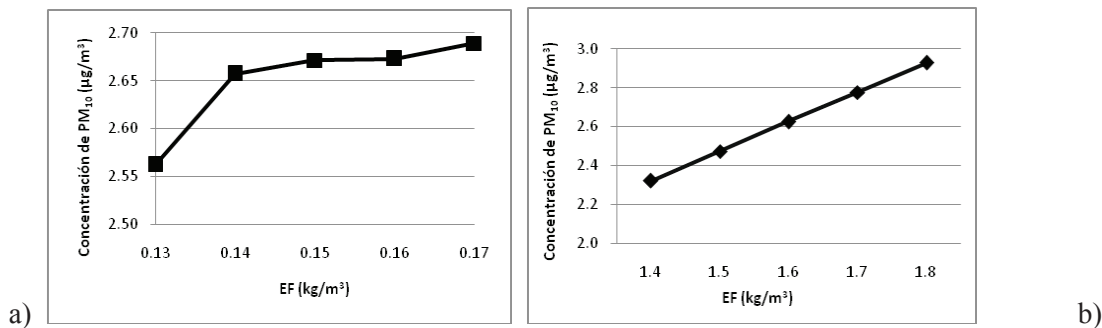
### Análisis de Resultados

Las emisiones de la fuente lineal presentaron un valor máximo de 0,9786 g/s reportado para las 8am, los horarios de mayor emisión están comprendidos entre las 7:00-9:00 y las 15:00-17:00; debido fundamentalmente al aumento del volumen de tráfico y estilo de conducción.

Durante el análisis de sensibilidad del modelo ISCST3 se determinó el error relativo porcentual aproximado y el  $N_c$ , presentados anteriormente

en las ecuaciones (1) y (2). Evaluando la sensibilidad de la estimación de la concentración de  $PM_{10}$  para 24 horas en el receptor de interés (campus universitario CUJAE).

Se puede observar que con un aumento de los EF, las  $c(PM_{10})$  estimadas en el área de estudio aumentan. En el caso de las modificaciones para las calderas que trabajan con fuel óleo N° 2 los resultados aumentan discretamente, ya que de las 47 calderas inventariadas solo 9 emplean este combustible, con emisiones menores que las emisiones del resto de las calderas. Para 0,13 kg/m<sup>3</sup> se reporta el valor más bajo de concentración siendo aproximadamente 4,1% la del caso base y se corresponde con el mayor  $N_c$  para este tipo de fuentes con un valor de 0,48. Mientras que la máxima concentración estimada es 0,65% mayor que la del caso base y está dada para un valor de EF de 0,17 kg/m<sup>3</sup> (figura 3).

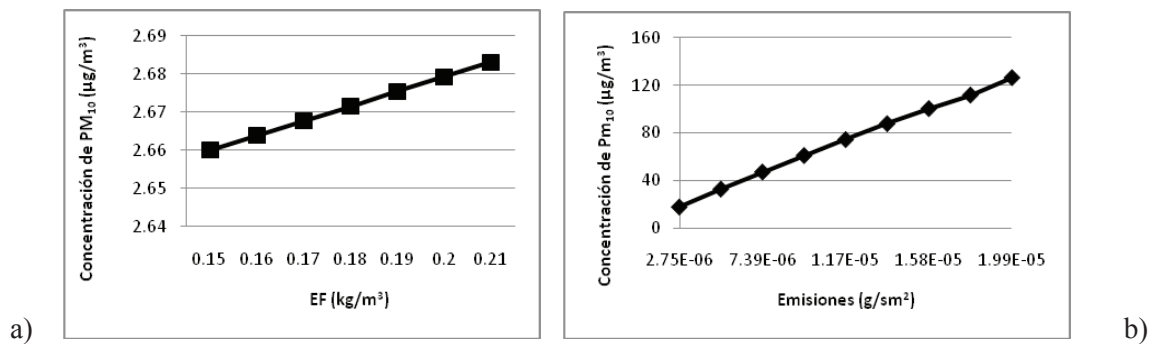


**Figura 3** Influencia de las variaciones de los EF en la  $c(PM_{10})$  estimadas por el software ISCST3; a) Variando los EF para calderas que trabajan con Fuel óleo N° 2, b) Variando los EF para calderas que trabajan con Fuel óleo N° 6

Las calderas que emplean combustibles residuales suman 38, por lo que el efecto de las variaciones en los EF tiene una mayor repercusión en las concentraciones estimadas. Los valores extremos para los EF fueron de 1,4 y 1,8 kg/m<sup>3</sup> (figura 3) y los errores relativos porcentuales para las concentraciones correspondientes son 11,6%

para la menor y 11,5% para la mayor; con  $N_c$  de aproximadamente 0,9 para todos los resultados.

Las  $c(PM_{10})$  estimadas para las diferentes variaciones de los EF en el emplazamiento de generación eléctrica y en el vertedero de residuos sólidos presentan un comportamiento lineal, (figura 4).



**Figura 4** Influencia de las variaciones de los EF y de las emisiones en la  $c(PM_{10})$  estimadas por el software ISCST3; a) Variando los EF en la planta de generación eléctrica, b) Variando las emisiones de  $PM_{10}$  en el vertedero de residuos sólidos urbanos

En el primer caso con un  $Nc$  aproximado de 0,02 para todos los resultados y un error relativo porcentual de 0,43% tanto para el máximo como para el mínimo. En el segundo caso el  $Nc$  promedio es de 1. Los valores de  $c(PM_{10})$  máximo y mínimo estimados en la simulación fueron de 17,52  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  y de 126,44  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  correspondientes 2,32 y 20,88 % de limos en la superficie, y errores relativos porcentuales de 76,44% y 70,03% respectivamente.

### Ordenación de influencia

A continuación se muestra en orden descendente los parámetros que más afectan las  $c(PM_{10})$  calculadas para el período de 24 horas en el receptor de interés, basada en los  $Nc$  determinados para los parámetros considerados en el análisis de sensibilidad.

- 1) Emisiones del vertedero de residuos sólidos urbanos.
- 2) EF de calderas que emplean como combustible fuel óleo N° 6.
- 1) Velocidad del viento.
- 2) EF de calderas que emplean como combustible fuel óleo N° 2.

- 3) EF del emplazamiento de generación eléctrica.

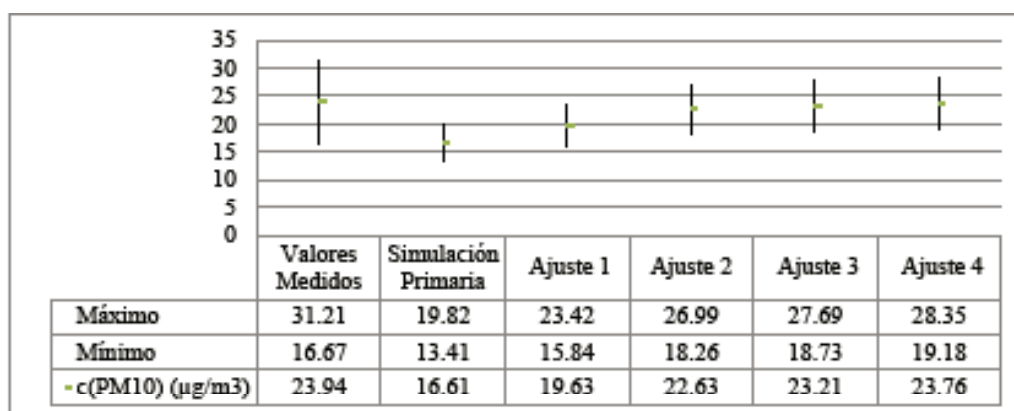
Parámetros cuya influencia es despreciable: albedo medio, razón de Bowen y rugosidad del terreno.

### Análisis de incertidumbre

En este punto del proceso de calibración se estimará cuál es la variación de las concentraciones predichas por el modelo cuando varían debido a su propio error en la estimación de los parámetros de entrada (magnitudes perturbadas).

En la consideración del análisis de incertidumbre tal como se presenta en este trabajo, las magnitudes perturbadas son los parámetros que se han estudiados en el análisis de sensibilidad. La desviación típica relativa del parámetro de salida se determinó considerando juntos los efectos que producen las perturbaciones de cada parámetro de entrada obteniéndose un 0,1930 según la ecuación (3).

En la figura 5 se puede observar el resultado promedio de las  $c(PM_{10})$  medidas en el receptor estudiado y su región de confianza definida por la desviación estándar de los resultados.



**Figura 5** Ajustes de la simulación numérica al promedio de los valores medidos

Para la calibración se realizaron mediciones de las partículas mediante el captador de bajo volumen de aire ECHO PM de la firma italiana TECORA. Dicho equipo es un instrumento proyectado para el funcionamiento al aire libre en condiciones climáticas duras, proporciona una plataforma flexible de muestreo para PM10 y PM2.5, realiza muestreo automático con un máximo de 2 muestras secuenciales, brinda visualización gráfica con amplia iluminación del fondo, una memorización de más de 60 informes de muestreo con tiempo de muestreo de 1 minuto a 168 horas y un caudal hasta 50 l/min. [23]. El tiempo para la toma de cada muestra fue de 24 horas, con un flujo de aire de 2,3 m<sup>3</sup>/h, según recomendaciones de expertos del Organismo Internacional de la Energía Atómica (OIEA), asesores de la investigación, a partir de experiencias previas en el trabajo con el equipo. Como elementos de retención se utilizaron filtros de teflón, fibra de cuarzo y fibra de vidrio, puesto que estos no son afectados sensiblemente por la humedad, presentan alta eficacia de retención de partículas, alta resistencia mecánica y poseen baja reactividad química que de lugar a la formación de compuestos secundarios en la superficie del filtro que pudiesen alterar los resultados. [24].

La ubicación del captador se encuentra indicada en la figura 2, en la azotea de la Facultad de Ingeniería Química del Instituto Superior

Politécnico José Antonio Echeverría (CUJAE), centrado en el área de estudio. Se realizaron tres mediciones por semana durante los meses de febrero a abril de 2012, descartando aquellas en que el grado de humedad es mayor del 95% ó hubo lluvia, quedando así 21 mediciones útiles para la calibración. El valor promedio es de 23,94 µg/m<sup>3</sup>, con una desviación estándar de un 7,27 µg/m<sup>3</sup>, representando una desviación de 30,37% del valor medio.

En la segunda columna se muestra el resultado de la simulación primaria, donde se usaron los valores por defecto para los parámetros de calibración, solo una pequeña parte de la región de confianza para los valores estimados se superpone con el rango para el promedio de los valores medidos. El rango de confianza para la c(PM<sub>10</sub>) estimada varía en 19,30%.

El valor promedio de las mediciones de c(PM<sub>10</sub>) es mayor que el estimado. Este es un resultado esperado, pues a pesar de que en el estudio se incluyeron un gran número de fuentes, siempre existen concentraciones de fondo que se desconocen: la descarga de los residuos sólidos en el vertedero, el movimiento de tierra, desgaste de los neumáticos y frenos, además de las emisiones producto del arranque y calentamiento de los vehículos y aquellos que permanecieron parados en el tramo de carretera considerado.

Las regiones de confianza no tienen la misma amplitud: La predicción de los cálculos tiene bandas de confianza menores que las mediciones. Durante el ajuste deberá superponerse la región de confianza de los valores de  $c(\text{PM}_{10})$  estimados con el valor promedio de las mediciones y su propia desviación típica.

### Proceso de ajuste.

Basándose en el análisis de sensibilidad desarrollado sobre el caso particular, se procede

al ajuste de los parámetros para minimizar el error entre las concentraciones calculadas y las de referencia.

En la figura 5, a partir de la segunda columna se muestran los resultados estimados para los diferentes ajustes indicados en la tabla 3, éstos se realizan de acuerdo a los intervalos definidos para cada parámetro y en el caso de la velocidad del viento (conocidos los datos medidos en la zona de estudio para 3 años consecutivos) se emplean los valores medidos.

**Tabla 3** Ajustes de los parámetros de entrada del software ISCST3 y resultados

Ajustes	Emisiones vertedero (g/sm <sup>2</sup> )	EF calderas combustible fuel N° 6 (kg/m <sup>3</sup> )	EF calderas combustible fuel N° 2 (kg/m <sup>3</sup> )	EF grupo electrógeno (kg/m <sup>3</sup> )	$c(\text{PM}_{10})$ (µg/m <sup>3</sup> )	Error (%)
<b>Simulación Primaria</b>	9,22*10 <sup>-6</sup>	1,63	0,15	0,18	16,61	31
<b>Ajuste 1</b>	1,09*10 <sup>-5</sup>	1,63	0,15	0,18	19,63	18
<b>Ajuste 2</b>	1,25*10 <sup>-5</sup>	1,63	0,15	0,18	22,63	5
<b>Ajuste 3</b>	1,29*10 <sup>-5</sup>	1,63	0,15	0,18	23,21	3
<b>Ajuste 4</b>	1,30*10 <sup>-5</sup>	1,7	0,15	0,18	23,76	1

Las variaciones en las entradas al software comenzaron con un aumento de las emisiones en el vertedero por ser este el parámetro que más afecta la modelación. Los ajustes 1, 2, 3 y 4 se corresponden con aumentos del 18, 36, 40, 41% de las emisiones del vertedero. Las emisiones de  $\text{PM}_{10}$  en esta fuente pueden ser mucho mayores que las estimadas para la simulación primaria con un 6,4% de limos en la superficie, pues además de esta variable existen otros factores de alto impacto (mencionados anteriormente) que son imposibles de medir y difíciles de estimar.

Después del segundo ajuste ya se superpone la región de confianza de los valores estimados con el promedio de los medidos y sus desviaciones típicas, con un error medio normalizado de 5%.

Para el cuarto ajuste además de la pequeña variación en las emisiones del vertedero

para lograr un ajuste más refinado, se varía el parámetro que en segundo lugar afecta la estimación de las emisiones. La variación del EF para las calderas que emplean fuel óleo N° 6 es de un 5%. El error, entre  $c(\text{PM}_{10})$  calculada y el promedio de las medidas es de 1%, por lo que se puede afirmar que el ajuste ha mejorado notablemente. Con los resultados presentados se da por terminada la calibración, porque aunque se varíen los valores de los parámetros restantes el error continúa siendo el mismo. Quedando así calibrado el modelo para predecir la  $c(\text{PM}_{10})$  en el receptor de estudio para 24 horas.

Las emisiones de  $\text{PM}_{10}$  en el vertedero de residuos sólidos deben estar muy próximas a los  $1,30*10^{-5}$  g/sm<sup>2</sup>, siendo  $3,78*10^{-6}$  g/sm<sup>2</sup> mayor a la empleada en la simulación primaria, donde solo se tuvieron en cuenta las emisiones debido

al movimiento de los camiones en el área no pavimentada. Esta diferencia en las emisiones del vertedero es producto principalmente a dos factores: la descarga de los residuos y los movimientos de tierra.

Durante el proceso de ajuste también se incrementaron las emisiones de las calderas que emplean fuel N<sup>o</sup> 6 como combustible, lo cual es producto de la calidad del combustible empleando en dichas instalaciones y/o al nivel de mantenimiento de las calderas

Para la validación del modelo se realizaron un total de 13 mediciones. El valor promedio aproximado para la c(PM<sub>10</sub>) es de 23,20 µg/m<sup>3</sup>, con una desviación estándar de un 4,99 µg/m<sup>3</sup>, representando el 21,51% del valor medio. El error medio normalizado entre el resultado de la simulación numérica y el valor medio medido es de 2,41%. Considerándose muy bueno el ajuste al estar el error por debajo del 5%.

## Conclusiones

Se ha presentado una guía metodológica para la calibración de modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos. En ella se integra el análisis de incertidumbre y el de sensibilidad.

Se ha aplicado la metodología a un caso de estudio, demostrando ser extremadamente útil para este modelo en particular. Al comparar el ajuste de las concentraciones calculadas mediante la simulación numérica con el promedio de un conjunto de mediciones, se logró disminuir el error de la predicción en un 30%. Considerándose una mejora muy importante en el proceso de calibración.

Se detectaron los parámetros que afectan en mayor medida a las concentraciones estimadas para el receptor de estudio.

Por primera vez se obtiene un modelo recomendado de dispersión de contaminantes calibrado y validado para el estudio de impacto de fuentes fijas y móviles sobre la calidad del aire de La Habana (campus universitario CUJAE).

## Referencias

1. P. López. *Metodología para la calibración de modelos matemáticos de dispersión de contaminantes incluyendo regímenes no permanentes*. Tesis Doctoral. Universidad Politécnica de Valencia. Valencia, España. 2001. pp. 477.
2. M. González, S. Pire, P. López. "Sensibilidad del modelo ISCST3 en la estimación de contaminantes conservativos. Caso de estudio". *Revista Mexicana de Ingeniería Química*. Vol. 11. 2012. pp. 287-298.
3. A. Mulligan, L. Brown. "Genetic algorithms for calibrating water quality models". *Journal of Environmental Engineering. ASCE*. Vol. 3. 1998. pp. 202-211.
4. J. Carstensen, P. Vanrolleghem, W. Rauch, P. Reichert. "Terminology and methodology in modelling for water quality management - A discussion starter". *Water Science and Technology*. Vol. 36. 1997. pp. 157-168.
5. W. Gujer. *Systems Analysis for Water Technology*. 1<sup>a</sup> ed. Ed. Springer - Verlag. Berlin, Heidelberg, Germany. 2008. pp. 462.
6. A. Jakeman, R. Letcher, J. Norton. "Ten iterative steps in development and evaluation of environmental models". *Environmental Modelling & Software*. Vol. 21. 2006. pp. 602-614.
7. S. Chapra, R. Canale. "Aproximaciones y errores de redondeo". *Métodos numéricos para ingenieros*. 5<sup>a</sup> ed. Ed. The McGraw-Hill Companies. New York, USA. 2007. pp. 53-77.
8. S. Chapra. "The Modeling Environment". *Surface Water-Quality Modeling*. Ed. The McGraw-Hill Companies. New York, USA. 1997. pp. 317-343.
9. P. Berthouex, L. Brown. *Statistics for Environmental Engineers*. Ed. Lewis Publishers. Florida, U.S.A. 1994. 503 pp.
10. J. Zhang, L. Morawska. "Combustion sources of particles: 2. Emission factors and measurement methods". *Chemosphere*. Vol. 49. 2002. pp. 1059-1074.
11. Environmental Health & Safety Online. *Introduction to Emission Factors*. 2011. Available on: [http://www.ehso.com/Air\\_AP\\_42.htm](http://www.ehso.com/Air_AP_42.htm). Accessed: Marzo 2012.
12. U.S. Environmental Protection Agency. "External Combustion Sources. 1.3 Fuel Oil Combustion – Supplement E". *Emission Factors*. 2010. Available: <http://www.epa.gov/ttn/chief/ap42/ch01/final/c01s03.pdf>. pp 1.3-1 a 1.3-35. Accessed: julio 2013

13. U.S. Environmental Protection Agency. 1996. "Stationary Internal Combustion Sources. 3.4 Large Stationary Diesel And All Stationary Dual-fuel Engines - Supplement B. *Emission Factors*. 2010 Available: <http://www.epa.gov/ttnchie1/ap42/ch03/final/c03s04.pdf>. Accessed: julio 2013. pp. 3.4-1 a 3.4-11.
14. S. Shah, D. Cocker III, K. Johnson, J. Lee, B. Soriano, J. Miller. "Emissions of regulated pollutants from in-use diesel back-up generators. *Atmospheric Environment*. Vol. 40. 2006. pp. 4199-4209.
15. European Environment Agency. *EMEP-EEA air pollutant emission inventory guidebook-2009*. Technical report No 9/2009. Available on: <http://www.eea.europa.eu/publications/emep-eea-emission-inventory-guidebook-2009>. Accessed: abril 2012.
16. Oficina Nacional de Normalización (NC), N. Cubana 111:2004. *Calidad del aire. Reglas para la vigilancia de la calidad del aire en asentamientos humanos*. 2004. Disponible en: <http://biblioteca.idict.villaclara.cu/UserFiles/File/Normateca/NC%20111Regl.%20vigil.%20cal.%20aire.pdf>. Consultado: abril de 2012.
17. U.S. Environmental Protection Agency. *Solid Waste Disposal. 2.4 Municipal Solid Waste Landfills-Supplement E*. 5<sup>th</sup> e.d. 1998. Available: <http://www.epa.gov/ttn/chie1/ap42/ch02/final/c02s04.pdf>. Accessed: marzo 2012. pp. 1-4.
18. U.S. Environmental Protection Agency. *Miscellaneous Sources. 13.2.2 Unpaved Roads*. 5<sup>th</sup>. ed. 2006. EPA. Available: <http://www.epa.gov/ttn/chie1/ap42/ch13/bgdocs/b13s02.pdf>. Accessed: abril 2012. pp. 1-9.
19. Oficina Nacional de Estadísticas. *Anuario estadístico separata 2009*. La Habana, Cuba. 2010. pp. 40.
20. U.S. Environmental Protection Agency. *Manual del Usuario del Modelo IVE versión 2.0*. 2008. Available: <http://www.issrc.org/ive/downloads/manuals/UsersManual%28sp%29.pdf>. Accessed: mayo 2012. pp. 1-22.
21. M. Jaramillo, M. Núñez, W. Ocampo, D. Pérez, G. Portilla. "Inventario de emisiones de contaminantes atmosféricos convencionales en la zona de Cali-Yumbo". *Revista Facultad de Ingeniería*. Vol. 31. 2004. pp. 38-48.
22. U.S. Environmental Protection Agency. *Office of Air Quality Planning and Standards Emissions, Monitoring, and Analysis Division. Research Triangle Park 2000*. PCRAMMET Guía de Usuario. Available: <http://www.epa.gov/ttn/catc/dir2/pcrams.pdf>. Accessed: mayo de 2013.
23. *Envirolab. Air Sampling equipments*. 2012. Available: <http://www.envirolab.rs/en/ambient-air-sampler>. Accessed: mayo de 2013
24. M. Quintana, A. Zugasti. *Evaluación de la exposición laboral a aerosoles (IV): Selección del elemento de retención. Notas Técnicas de Prevención. Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo*. 2012. Disponible en: <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/NTP/Ficheros/786a820/799%20web.pdf>. Consultado: mayo de 2013.