Taller de simulació medi–ambiental

Difusió de contaminants a l'atmosfera

Juan Carlos Cañadas* i Jordi Sellarès†

12 de febrer de 2002

Juan Carlos Cañadas
Barcelona (1963)
Doctor en Física
Dept. de Física i Eng. Nuclear (ETSEIT)
Universitat Politècnica de Catalunya

Jordi Sellarès
Barcelona (1969)
Doctor en Física
Dept. de Física i Eng. Nuclear (EUETIT)
Universitat Politècnica de Catalunya

*juan.carlos.canadas@upc.es
†jordi.sellares@upc.es

Índex

Presentació

El medi ambient és el conjunt de components físics, químics, biològics i socials capaços de causar efectes directes e indirectes, en un termini curt o llarg, sobre els éssers vius i les activitats humanes. (Definició de la Conferència de les Nacions Unides sobre Medi Ambient a Estocolm 1972).

En la segona meitat del segle XX ens hem trobat, de forma inesperada, amb una situació nova: els grans avenços científics han portat amb ells importants problemes. La civilització industrial ha anat alterant l'ambient d'una forma tan poderosa que ha arribat a ser una amenaça per a l'equilibri del planeta. L'atmosfera és essencial per a la vida. Les seves alteracions tenen una gran repercussió en l'home i altres éssers vius i, en general, en tot el planeta. És un medi extraordinàriament complex i la situació es fa encara més complicada i difícil d'estudiar quan se li afegeixen emissions d'origen humà en gran quantitat, com està succeint en aquestes últimes dècades. Per la seva importància per a la vida, és imprescindible fer pronòstics de contaminació atmosfèrica, per a intentar preveure les conseqüències dels possibles canvis atmosfèrics a mig i llarg termini.

L'eliminació total de l'emissió de contaminants d'origen antropogènic a l'atmosfera resulta materialment impossible, i encara la seva necessària reducció està condicionada per factors polítics, econòmics i socials. Per a controlar de forma òptima la contaminació atmosfèrica és necessari un estudi dels efectes dels contaminants i poder analitzar la relació entre els nivells d'emissió de contaminants amb els nivells d'immissió. Per a determinar aquesta relació emissió-immissió s'utilitzen diferents models matemàtics. Són sistemes d'equacions que intenten reproduir el món real. S'utilitzen dades conegudes com, per exemple, la reacció d'un petit volum d'aigua, d'aire o de gas sotmès al calor, a la radiació solar o a diferents condicions climatològiques.

En aquesta unitat estudiarem la contaminació atmosfèrica provocada per les xemeneies que són fonts emissores directes de diferents substàncies tòxiques. Tractarem la difusió dels contaminants mitjançant el model gaussià i analitzarem la simulació de la trajectòria de les partícules per diferents distribucions verticals de temperatures amb inversions tèrmiques situades a diferents alçades.

Objectius

- Coneixer quines són les caracteristiques més rellevants de l'atmosfera.
- Distingir i classificar els principals tipus de contaminants atmosfèrics i saber a partir de quina concentració són perjudicials per a la salut.
- Enunciar els principals fenòmens meteorològics que intervenen en la dispersió dels contaminants atmosfèrics.
- Entendre el paper que juguen l'estabilitat i la turbulència atmosfèrica en la dispersió dels contaminants emesos per les xemeneies.
- Tenir una noció de les idees en les quals es basen els models numèrics. Saber quines són les aproximacions i suposicions implícites al model gaussià.

Esquema

1. L'atmosfera
    (a) Zones de l'atmosfera
        i. Troposfera
        ii. Estratosfera
        iii. Mesosfera
        iv. Ionosfera
    (b) Composició de l'aire
    (c) Contaminació atmosfèrica
    (d) Efectes de la contaminació atmosfèrica
        i. Efecte hivernacle: CO_2, CH_4, O_3, CFC
        ii. Pluja àcida: SO_2, NO, NO_2
        iii. Destrucció de la capa d'ozó
        iv. Smog fotoquímic
        v. Efectes sobre la salut humana
2. Meteorologia relacionada amb la contaminació atmosferica
    (a) Vent
    (b) Pressió atmosfèrica
    (c) Núvols
        i. cirros
        ii. estrats
        iii. cúmulus
    (d) Humitat
    (e) Inversió de temperatura
3. Transport de la contaminació en l'atmosfera
    (a) Escales de transport en l'atmosfera
    (b) Fenomens implicats en el transport de contaminants emesos per les xemeneies

i. Estabilitat atmosfèrica
ii. Turbulència atmosfèrica
iii. Dispersió de la fumera. Estratificació.

4. Models matemàtic de la dispersió de contaminants
   (a) Tipus de models
      i. Model deterministe
      ii. Model estadístic
   (b) Models de difusió atmosfèrica
      i. Model Eulerià
      ii. Model Lagrangia
   (c) Solució gaussiana

1 L'atmosfera

L'atmosfera terrestre consisteix en una barreja de diversos gasos que envolten la Terra fins a una alçada d'uns 10.000 km, distància comparable a la del diàmetre terrestre. Va començar a formar-se fa uns 4600 milions d'anys. La major part de l'atmosfera primitiva es va perdre a l'espai. L'atmosfera actual prové principalment d'altres gasos que es van alliberar de les roques que formen el nostre planeta.

Abans de l'aparició de les primeres formes de vida, l'atmosfera estava formada per vapor d'aigua, CO_2, N_2 i una petita proporció d'hidrògen i CO. A la seva composició no hi havia oxigen. Era una atmosfera lleugerament reductora fins que l'activitat fotosintètica dels éssers vius va introduir oxigen i ozó (al voltant de fa uns 2500 milions d'anys). Des de fa 1000 milions d'anys l'atmosfera té una composició similar a l'actual.

També ara els éssers vius segueixen desenvolupant una funció fonamental en el funcionament de l'atmosfera. Les plantes i altres organismes fotosintètics prenen CO_2 a l'atmosfera i a canvi hi alliberen oxígen.

1.1 Zones de l'atmosfera

L'atmosfera està unida a la Terra per l'atracció gravitatòria. Arriba a la màxima densitat al nivell del mar i disminueix ràpidament en vertical cap a dalt. El 97% de l'atmosfera es concentra en els 29 primers quilometres a partir del nivell del mar.

Es pot distribuir l'atmosfera en zones o capes segons diferents criteris: per la seva composició, per la seva temperatura o per la seva densitat. El més habitual és basar-se en les variacions de temperatura que s'experimenten a mida que augmenta l'alçada respecte el nivell del mar. A la Fig. 1 s'observa aquesta distribució de la temperatura així com les quatre grans zones a diferenciar:

- Troposfera. Arriba a una alçada mitja de 12 km (7 km en els pols i 16 km en els tròpics) i hi trobem, juntament amb l'aire, pols, fum i vapor d'aigua, entre d'altres components.

- Estratosfera. Zona bastant freda que s'estén des dels 12 km fins als 50 km d'alçada. A la seva capa superior (entre els 20 km i els 50 km) conté gran quantitat d'ozó, el qual és d'enorme importància per a la vida a la terra ja que absorbeix la major part dels raigs ultraviolats del Sol.

- Mesosfera. Zona situada des dels 50 km fins als 80 km d'alçada, la seva temperatura mitja és de 10 C, els meteorits adquireixen altes temperatures quan travessen aquesta capa i la gran majoria es volatilitzen.

- Ionosfera. Comença després dels 80 km i va desapareixent gradualment fins als 500 km d'alçada. A aquesta regió, constituïda per oxigen, la temperatura augmenta fins als 1000 C. Els raigs X i ultraviolats del Sol ionitzen l'aire enrarit, produint mol.lècules ionitzades. Des dels 100 km fins als 300 km la zona s'anomena Termoesfera, i a continuació s'hi pot trobar una altra subzona anomenada Exosfera que s'estén fins als 1000 km. L'Exosfera està formada per una capa de heli i una altra d'hidrogen.

Després d'aquesta capa es troba una enorme banda de radiacions (coneguda com magnetosfera) que s'estén fins a uns 55000 km d'alçada, encara que no constitueix un estrat atmosfèric propiament dit.

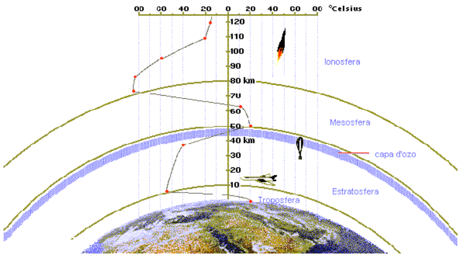

Figura 1: Diferents capes de la atmosfera en funció de la temperatura

En l'estudi de la contaminació atmosfèrica, la troposfera representa la capa de més interès ja que és la zona a on té lloc el transport dels contaminants més importants. S'hi produeixen importants moviments verticals i horitzontals de masses d'aire (vents) i hi ha una relativa abundància d'aigua, degut a la seva proximitat a la hidrosfera. Per aquesta raó és la zona on es localitzen els principals fenòmens climàtics: pluges, vents, canvis de temperatura, ...

Des del punt de vista de la seva composició química, les capes anteriors es poden agrupar en dues grans zones: Homosfera (des del nivell del mar fins a 80 km) amb una composició química molt uniforme pel que fa a la proporció de gasos que la constitueixen i Heterosfera (des de 80 km fins a uns 10000 km).

Curiositat: A la Homosfera hi pertanyen la troposfera, la estratosfera i la mesosfera, essent a la troposfera la zona on es produeixen el 79% de les reaccions químiques de l'atmosfera.

1.2 Composició de l'aire

Amb el nom d'aire designem la barreja de gasos que formen l'atmosfera terrestre. L'aire manté la proporció dels seus diferents components quasi invariable fins als 80

km, encara que cada cop és menys dens a mida que anem ascendint. A partir dels 80 km la seva composició es fa més variable.

Els dos principals components de l'atmosfera són el nitrògen, amb un 78% del total i l'oxigen amb un 21%. Com s'observa en la Taula 1, la resta de gasos tenen concentracions menors però importants. L'atmosfera no té una composició uniforme en allunyar-nos de la superfície terrestre. A 5.5 km d'alçada trobem la meitat del total de la massa i s'arriba al 90% al voltant dels 30 km.

Curiositat: L'aire net forma una capa d'aproximadament 500000 milions de tones que envolta la Terra.

Component	*Massa mol.*	*Concentració*	*Concentració*	*Espessor*
Nitrogen	28.02	78.08%	75.51%	6.35 km
Oxigen	32.00	20.95%	23.14%	1.68 km
Argó	39.94	0.93%	1.28%	74 m
Neó	20.18	18 ppm	13 ppm	15 cm
Heli	4.00	5 ppm	0.7 ppm	4 cm
Kriptó	83.70	1 ppm	2.9 ppm	8 mm
Hidrogen	2.02	0.5 ppm	0.03 ppm	4 mm
Dióxid de Carbó	44.01	350 ppm	533 ppm	2.8 m
Ozó	48.00	0-12 ppm	0-20 ppm	0-1 mm
Vapor d'aigua	18.02	0-4 %	0-2.5 %	0-300 m

Taula 1: Composició de l'aire

En la composició de l'aire és destacable el seu contingut en substàncies que no es troben en fase gasosa, especialment l'aigua i en menor proporció compostos orgànics i partícules sòlides. Per a cada concentració de vapor d'aigua a l'aire, existeix una temperatura de condensació per sota de la qual, part del vapor d'aigua passa a líquid. Aquests canvis de fase es poden veure afavorits per la presència de partícules sòlides que serveixen com nuclis de formació de gotes d'aigua.

1.3 La contaminació atmosfèrica

Es defineix contaminació atmosfèrica com la impurificació de l'atmosfera per la injecció de matèries alienes a la seva composició normal o en una proporció molt superior a l'habitual.

En general, els contaminants primaris (SO_2, $NO2$, ...) són alliberats per una font. Aquest procés s'anomena emissió. En l'atmosfera els contaminants es desplacen, es transformen, s'acumulen i es degraden. Altres contaminants, anomenats secundaris, es formen per reaccions químiques entre contaminants o entre aquests i compostos habituals de l'atmosfera, com el vapor d'aigua. A vegades aquestes reaccions són afavorides per la radiació solar. Els més coneguts són l'ozó troposfèric l'àcid sulfúric i l'àcid nític.

Atenció: El grau de concentració de contaminants es mesura en parts per milió (ppm) o en micrograms per metre cúbic ($\mu g/m^3$). La intensitat d'una font emissora es pot mesurar en kg/s.

Per mesurar l'efecte dels contaminants s'han establert valors de referència i índexs de qualitat. Uns valors de referència típics són 400 $\mu g/m^3$ per als SO_x, 300 $\mu g/m^3$ per a les partícules en suspensió i 200 $\mu g/m^3$ per als NO_x. Els valors habituals són 132, 120 i 77 $\mu g/m^3$ a les zones urbanes i 0.5, 37 i 2 $\mu g/m^3$ a les zones rurals. Per al CO no hi ha un valor de referència estàndard i una concentració típica és de 7800 $\mu g/m^3$ a la ciutat i 100 $\mu g/m^3$ al camp.

A partir del grau de contaminació atmosfèrica que es detecta és necessari adoptar mesures preventives o correctores tenint present que existeix una relació entre emissió (veure glossari) i immissió (veure glossari). Aquests paràmetres no són necessàriament equivalents doncs les emissions són sotmeses a processos de transport, transformació química i dispersió a l'atmosfera que poden donar com a resultat diferents nivells d'immissió.

Per una altra banda, la vida mitja estimada dels contaminants informa sobre el seu caracter reactiu o inert. A major vida mitja, creix el seu temps de permanència a l'atmosfera i poden ser transportats més lluny. Per exemple, la vida mitja del SO_2 és de l'ordre de dies. Això implica que disposa d'aquest temps per traslladar-se a certa distància abans d'acabar combinant-se amb la humitat de l'atmosfera, provocant el fenomen de la pluja àcida.

Els focus d'emissió de contaminants poden ésser naturals (volcans, incendis, temporals de sorra, ...) o originats per activitats de l'home (focus antropogènics). Els focus antropogènics poden ser fixos (plantes de productes químics, incineració d'escombreries, refineries de petroli, ...) o mòbils (automòbils, trens, vaixells, ...). Per una altra banda, les zones que absorbeixen els contaminants de l'aire s'anomenen claveguerons de contaminació atmosfèrica. Aquests són, en general, el terra, la vegetació, les construccions i, especialment, les grans masses d'aigua (oceans).

Suposem que, per a una determinada massa de contaminants, tenim un únic focus emissor. El vent és el principal fenomen atmosfèric que trasllada el contaminant fins als receptors. A més a més d'aquest desplaçament, la massa de contaminants creix en amplitud i en alçada, degut al procés de barreja que s'experimenta a l'atmosfera. Durant el seu camí es produiran canvis en la direcció i en la velocitat del vent que faran que el contaminant serpentegi. La suma de tots aquests processos provoca la difusió dels contaminants i, en conseqüència, la concentració de contaminants en els receptors és menor que la seva concentració en el focus emissor.

Curiositat: En determinades condicions atmosfèriques, els gasos expulsats per una xemeneia poden ser transportats centenars de quilòmetres abans de dipositar-se a terra.

1.4 Efectes de la contaminació atmosfèrica

1.4.1 Efecte hivernacle

El 46% de la radiació solar que arriba al nostre planeta és absorbida per la superfície terrestre. Una quantitat menor (23% del total) és absorbida per diferents components de l'atmosfera, com l'aire, la pols o els núvols i la resta (31% del total) és reflexada per l'aire, els núvols i la superfície terrestre.

La dinàmica de l'atmosfera i dels oceans permet una redistribució de les diferents quantitats d'energia rebudes des del sol a diferents latituds. Les superfícies dels oceans i continents perden constantment energia, que es irradiada cap a l'espai exterior en longituds d'onda que depenen de les seves respectives temperatures. La major part són superiors a 4 m. Aquest tipus de radiació s'anomena radiació terrestre o d'onda llarga. Part de la radiació d'onda llarga emesa per la superfície terrestre, és absorbida per alguns gasos de l'atmosfera i torna a emetre's en totes direccions, inclòs cap a la Terra. Aquest gasos són, sobre tot, vapor d'aigua, CO_2, CH_4, O_3 i CFCs. La presència d'aquests gasos redueix la pèrdua efectiva de calor de la superfície terrestre i eleva substancialment la temperatura. Aquest procés s'anomena efecte hivernacle i els gasos que hi intervenen activament es designen com a gasos hivernacle. La magnitud de l'efecte hivernacle depèn de la concentració de cadascun dels gasos i de la forma en que aquesta concentració varia amb l'alçada.

Des del començament de la segona revolució industrial, l'emissió de gasos hivernacle, especialment de CO_2, ha anat creixent, tal i com es pot apreciar a la Fig. 2. Les principals causes de l'augment del CO_2 atmosfèric són l'augment de la seva generació com a conseqüència de l'ús de combustibles fòssils (petroli, gas i carbó) i la disminució del seu consum degut als canvis en el règim d'explotació de la Terra, en particular de la desforestació de les selves tropicals humides. Una altra font important de CO_2 és la producció de ciment.

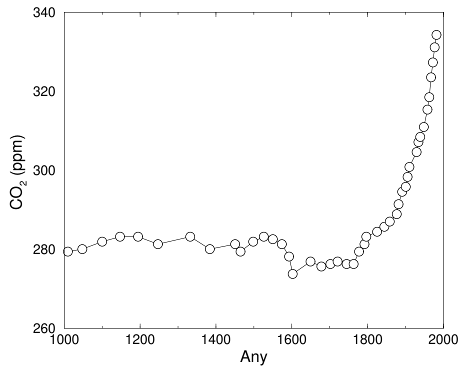

Figura 2: Evolució del CO_2 a l'atmosfera

1.4.2 Pluja àcida

Els principals gasos productors d'aquest fenomen són el diòxid de sofre (SO_2) i els òxids de nitrogen (NO i NO_2) que, en contacte amb el vapor d'aigua atmosfèric i en presència de la llum solar, reaccionen per a convertir-se en àcids sulfúric i nítric diluïts. Aquests àcids cauen sobre la superfície terrestre en forma de partícules seques, pluja, neu o boira.

Els efectes biològics de la pluja àcida són amplis. En principi el seu nivell típic d'acidesa és tòxic per a alguns peixos i microorganismes aquàtics i terrestres (líquens i bolets). Aquests organismes són una part essencial de l'ecologia del terra dels boscos. Altres efectes venen com a consequència l'acció d'aquests àcids sobre els metalls que hi ha al sòl. És el cas de l'alumini, que un cop dissolt s'incorpora a l'aigua de llacs i rius. A través de plantes i microorganismes entra en la cadena tròfica. Aquest metall és molt tòxic per a algunes plantes i animals. Actualment s'ha detectat que està incorporat a la flora i fauna de zones on freqüentment es produeixen pluges àcides.

Per una altra banda, la pluja àcida també ataca l'estructura metàl·lica dels ponts, edificis i monuments, construïts normalment amb compostos calcaris, produint deteriorament i pèrdua de valor artístic.

1.4.3 Destrucció de la capa d'ozó

A la part superior de l'Estratosfera es troba la capa d'ozó, que actua de filtre de la radiació solar ultraviolada. Si es produeix una reducció de la seva concentració, es provoca un increment de la quantitat de radiació ultraviolada que incideix sobre la Terra.

Aquestes capes superiors de l'atmosfera són contaminades per aeronaus que volen a gran alçada, proves atmosfèriques d'armament nuclear i erupcions volcàniques. Els principals contaminants són els òxids de sofre i altres gasos designats com clorfluorcarbons (CFCs). Aquests gasos són utilitzats en aerosols, refrigerants en equips d'aire condicionat, pesticides, ... i el seu temps de vida mitja es de 1000 anys.

Quan el diòxid de nitrogen i els CFCs arriben a les altes regions de l'Estratosfera són dissociats per efecte de la llum solar, produint-se òxid de nitrogen i clor lliure. Aquest darrer element destrueix l'ozó.

La reducció de l'ozó a l'estratosfera provoca un increment en la radiació ultraviolada que assola la superfície terrestre. L'increment d'aquesta radiació augmenta els seus efectes naturals. Sense anar més lluny, és considerada un agent cancerígen. En general pot afirmar-se que l'increment percentual del flux ultravioleta és el doble que el percentatge de decreixement de la concentració d'ozó.

1.4.4 Smog fotoquímic

El smog fotoquímic és un dels majors problemes de contaminació atmosfèrica a escala local o regional. Es caracteritza per la presència de vapors irritants que dificulten la visibilitat i està associat a determinades emissions urbanes i a determinades condicions atmosfèriques. Els components del smog fotoquímic normalment no són emesos directament a l'atmosfera sinó que són contaminants secundaris. Estan originats per les reaccions químiques que són afavorides per la irradiació de la llum solar a sobre d'una barreja d'hidrocarburs i òxids de nitrogen.

Contaminant	SO_2	Part.	NO_2	CO
Valor de referència ($\mu g/m^3$)	250	300	400	15000
Valor típic urbà ($\mu g/m^3$)	132	120	77	7800
Valor típic rural ($\mu g/m^3$)	0.5	37	2	100

Taula 2: Valors de referència

ICQA	SO_2 ($\mu g/m^3$) 24h.	Part. ($\mu g/m^3$) 24h.	NO_2 ($\mu g/m^3$) 1h.	CO ($\mu g/m^3$) 8h.
100	0	0	0	0
50	100	150	150	6000
0	250	300	400	15000
-100	800	600	1130	17000

Taula 3: Índex ICQA

1.4.5 Efectes sobre la salud humana

Amb la finalitat d'informar, d'una manera senzilla i fàcil d'entendre per tots els ciutadans, sobre l'estat de la qualitat de l'aire, s'han establert valors de referència i índexs de qualitat que ponderen els diferents contaminants mesurats. Els valors de referència són els valors màxims considerats inofensius (Taula 2).

Els índexs són més útils per informar del grau de contaminació. A Catalunya, el departament de Medi Ambient utilitza l'índex ICQA (veure glossari). Es tracta d'una adaptació a la normativa europea de l'índex americà PSI (veure glossari).

L'ICQA tradueix a una mateixa escala els efectes dels contaminants sobre la salut de les persones. Té en compte els 4 principals contaminants. Si n'hi ha més d'un s'agafa el que tingui un valor més baix a l'escala (Taula 3).

Mitjançant el valor d'aquest índex es pot classificar l'estat de l'atmosfera en tres categories: bona, millorable i pobre en funció de que la concentració dels contaminants es trobi a dins dels marges exposats a la Taula 4.

Si la categoria és bona no es presenten efectes negatius en la salut de la població. Si la categoria és millorable és possible que es presentin irritacions en els ulls o mals de cap. En aquestes condicions als malalts de cor i de pulmó se'ls reactiven els símptomes de llurs patiments. Els nens lactants, la gent gran i els fumadors presenten

bona	millorable	pobra
excel.lent $75 \leq ICQA \leq 100$	acceptable $25 \leq ICQA \leq 50$	deficient $-50 \leq ICQA \leq 0$
satisfactòria $50 \leq ICQA \leq 75$	baixa $0 \leq ICQA \leq 25$	molt deficient $ICQA \leq -50$

Taula 4: Marges per a la salut humana

trastorns funcionals de l'aparell respiratori i cardiovascular, com ara augment de la seva freqüència respiratòria, sensació de falta d'aire i palpitacions.

En el cas de que la qualitat d'aire sigui pobre, els nens lactants, gent gran i fumadors presenten les molèsties descrites anteriorment, a més d'alteracions de tipus inflamatori en el sistema respiratori (tos, espasme bronquial, ...). La població generalment sana també presenta trastorns funcionals en l'aparell respiratori i cardiovascular, sobre tot si es realitza esport o una altra activitat física intensa a l'aire lliure. A partir d'aquest nivell de contaminació es reactiven tots aquests efectes de forma general amb la simple presència de la persona a l'exterior.

Ara és un bon moment per fer l'activitat 1.

2 Meteorologia relacionada amb la contaminació atmosfèrica

Des del punt de vista físic, l'aire es comporta com un fluid en règim turbulent que s'anomena flux lliure, és a dir, no tancat per parets sòlides. Els factors que condicionen aquest flux són:

1. El moviment de la Terra
2. L'orografia i la rugositat de la superfície terrestre
3. Les característiques reològiques de l'aire (densitat mitjana = 1204 kg/m^3, viscositat cinemàtica = 0,1 kg/ms)
4. Els fenòmens d'intercanvi d'energia que s'hi desenvolupen, com els canvis de fase de l'aigua i l'aport d'enèrgia solar. També depèn de si aquests intercanvis tenen lloc a sobre el sòl o als oceans.

Tots aquests condicionants del flux atmosfèric generen una gran complexitat que va donar lloc al desenvolupament d'una ciència, la Meteorologia, que tracta d'explicar aquests fenòmens. Per a l'estudi de la contaminació atmosfèrica i del seu comportament és necessari conèixer alguns conceptes meteorològics que l'afecten directament. La major part d'aquests fenòmens es desenvolupen en l'anomenada capa límit atmosfèrica, definida com la capa més baixa de la troposfera, que és la que es troba afectada directament per la superfície terrestre.

2.1 El vent

El fenomen responsable en major grau del transport de contaminants a través de l'atmosfera és el vent. L'estudi d'aquest flux d'aire pot dividir-se en tres aspectes: vent mig, turbulència i ones. Qualsevol d'ells pot existir a la capa límit. El transport de magnituds com la humitat, el calor sensible, la quantitat de moviment i els contaminants està determinat en la direcció horitzontal (advecció) pel vent mig i en la vertical per la turbulència.

El vent és generat per diferències de temperatura a la Terra. Els oceans i altres grans masses d'aigua s'escalfen i es refreden a velocitats diferents de les de les grans masses de terra. Per aquest motiu existeixen gradients de pressió que ocasionen moviments d'aire des d'àrees d'alta pressió fins a àrees de baixa pressió.

El vent mig horitzontal sol ésser de l'ordre de 2 a 15 m/s, encara que disminueix considerablement en apropar-nos a la superfície terrestre. El vent mig vertical és molt més petit, permetent així l'existència d'una estructura estratificada a la capa límit atmosfèrica.

La turbulència pot considerar-se com un conjunt de remolins irregulars superposats. Entre els remolins, destaquen els de major magnitud en comparació amb l'alçada de la capa límit. Aquests remolins generen corrents ascendents i descendents que afecten a les fumeres de contaminants, provocant serpenteigs dels mateixos (looping).

2.2 La pressió atmosfèrica

La pressió disminueix ràpidament amb l'alçada, però a més hi ha diferències de pressió entre unes zones de la troposfera i les altres que tenen gran interès des del punt de vista climatològic. Són denominades zones d'altes pressions, quan la pressió, reduïda al nivell del mar i a 0 C, és major de 1.013 milibars o zones de baixes pressions si el valor és menor que aquest número.

L'aire es desplaça des de les àrees de més pressió a les de menys, formant-se així els vents. S'anomenen isòbares a les línies que uneixen punts d'igual pressió. Els mapes isobàrics són utilitzats pels meteoròlegs per a les prediccions del temps.

2.3 Els núvols

L'aigua pot existir en estat gasós, líquid o sòlid. Els núvols es formen quan l'aire ja no pot contenir més vapor d'aigua (gas). Quan l'aigua en el núvol s'agrupa en gotes prou pesades cau en forma de pluja o neu.

Curiositat: L'atmosfera conté uns 12000 km^3 d'aigua. La meitat d'aquesta aigua està situada entre la superfície i els 1800 m d'alçada.

Els núvols poden formar-se en qualsevol part de la troposfera i es mouen d'un punt a altre impulsats pel vent. Hi ha diferents tipus de núvols, pel seu aspecte i altitud sobre la Terra. Els tipus bàsics de núvols són: cirros, estrats i cúmulus.

Els núvols cirros semblen un cabell o plomes flotant en l'aire. Es troben a gran alçada en el cel, on l'aire és fred. La humitat en aquests núvols forma cristalls de gel per comptes de romandre com a gotes d'aigua.

El núvols estrats semblen llençols volant a través del cel. Es formen quan la condensació passa a la mateixa alçada on l'aire deixa d'elevar-se. Sovint, aquests núvols ocasionen pluges.

Els núvols cúmulus són bombats i poden tenir moltes formes. Aquests núvols tenen fons plans i tapes ondulades.

2.4 La humitat

Una massa d'aire no pot contenir una quantitat il·limitada de vapor d'aigua. Hi ha un límit a partir del qual l'excés de vapor es liqua en gotes. Aquest límit depèn de la temperatura ja que l'aire calent es capaç de contenir major quantitat de vapor d'aigua que l'aire fred.

El vapor que es troba a l'atmosfera procedeix de l'evaporació de l'aigua dels oceans, dels rius, dels llacs i dels terres humits. L'augment o disminució del vapor depèn de la temperatura i del nivell de saturació de l'aire. Un aire amb una humitat relativa baixa pot admetre molt vapor d'aigua procedent de l'evaporació, encara que estigui fred, mentre que un aire proper a la saturació ja no admetrà més vapor d'aigua per molt elevada que sigui la temperatura.

2.5 La inversió tèrmica

Un fenomen particularment interessant a l'atmosfera és la inversió de la temperatura. Habitualment, la temperatura absoluta a la capa límit disminueix amb l'alçada. Tanmateix, en determinades condicions, la temperatura augmenta considerablement amb l'alçada, a partir d'una determinada alçada que s'anomena alçada d'inversió.

L'atrapament de contaminants en una capa d'inversió és un fenomen típic de regions d'alta pressió, degut a la impossibilitat de que els remolins que els desplacen puguin superar la capa estable.

Aquest fenomen, en principi puntual, ha portat a l'estudi de les diferents situacions d'estabilitat atmosfèrica a la capa límit en relació amb el perfil de temperatures potencials. Com a referència, es defineix el perfil de temperatura adiabàtic com aquell en el que la temperatura decreix amb l'altura de manera que la densitat de l'aire varia proporcionalment a la pressió en cada nivell. El coneixement del gradient de temperatura és fonamental per a la determinació de la classe d'estabilitat o inestabilitat atmosfèrica.

Abans de continuar, pots fer les activitats 2 i 3.

3 Transport de contaminació a l'atmosfera

El cicle d'escalfament i refredament del terra sota l'acció de la radiació del sol, així com la barreja de masses d'aire de procedència diferent té com a conseqüència la modificació del valor de la temperatura de l'aire en funció de la alçada. Aquesta modificació repercuteix en l'habilitat de l'atmosfera per iniciar o inhibir els moviments verticals de l'aire i, en conseqüència, en la difusió dels contaminants.

3.1 Escales de transport a l'atmosfera

El problema de la contaminació atmosfèrica es desenvolupa en totes les escales, des de la local a la global. Encara que aquesta divisió no és general, es poden distinguir cinc escales espaials diferents en el desenvolupament d'un problema de contaminació atmosfèrica: local, urbana, regional, continental i global. L'escala local inclou fenòmens fins a 50 km de distància, si no es tracta d'una zona urbana. L'escala urbana s'estén fins a aquests 50 km, però a zones densament poblades. L'escala regional abasta des de 50 km a 500 km. Les escales continentals van des de 500 km fins a milers de quilòmetres. Finalment, l'escala global abasta tota la Terra.

Els problemes de contaminació a escala local es caracteritzen generalment per l'existència d'un o varis grans focus emissors, o un gran número de focus relativament petits. Quan menor sigui l'alçada d'emissió, major pot ésser l'impacte de dita emissió sobre l'entorn local. Per exemple, els automòbils generen les concentracions de contaminants més elevades a prop de les carreteres, i les plantes de tractament d'aigües residuals generen emissions de compostos orgànics volàtils (VOCs) que assoleixen la màxima concentració molt a prop de la pròpia planta, en ésser emesos a nivell del terra.

També grans focus emissors localitzats, que expulsen les seves emissions a l'atmosfera des de xemeneies elevades, poden provocar problemes de contaminació local. Aquests problemes estan condicionats per les condicions meteorològiques.

Existeixen dos tipus de problemes de contaminació atmosfèrica a zones urbanes: l'emissió de contaminants primaris i la formació de contaminants secundaris. Els primers poden ser causats per focus individuals, generalment petits i en gran número (ximeneies, cotxes, ...). Entre els problemes causats pels contaminants secundaris s'ha identificat la formació d'ozó troposfèric per reacció fotoquímica.

A escala regional, podem identificar tres tipus de problemes: el transport dels contaminants urbans a escala regional, l'emissió de contaminants amb velocitats de reacció lentes a l'atmosfera, que generen contaminants secundaris a grans distàncies (per exemple $SO3$), i la pèrdua de visibilitat deguda a les emissions de determinades fumeres de contaminants amb nivells d'emissió significatius.

A Europa, per la seva forma, els problemes de contaminació atmosfèrica es limiten generalment a l'escala regional. Per tant l'escala regional i continental es confonen. Així, la presència de pluja àcida en els països escandinaus, causada per les emissions procedents de la Gran Bretanya i Europa occidental, s'ha considerat com a continental. Per això, en general, es considera escala continental no només la derivada de la distància entre l'emissor i el receptor, sino també quan existeixen diversos països implicats en el problema.

L'escala global aborda, en general, els problemes que causa la contaminació atmosfèrica a mig–llarg termini, com el canvi climàtic, la reducció de la concentració de ozó estratosfèric o les emissions naturals procedents de volcans (que generen gran quantitat de partícules). Tanmateix, com a excepció, podem esmentar l'accident de la Central Nuclear de Txernobyl, en el que es van detectar nivells anormalment alts de radioactivitat en el Noroest de l'Oceà Pacífic al poc temps de l'accident. Aquest fet va demostrar l'existència d'un transport a llarga distància a partir d'una emissió puntual.

3.2 Fenòmens que intervenen en el transport de contaminants

La descripció del transport d'una fumera de contaminants a l'atmosfera (Fig.3) engloba fenòmens de molt diferent natura.

En primer lloc, la fumera s'eleva sobre l'altura d'emissió degut a la seva velocitat de sortida i, en el cas de fumeres tèrmiques, a la major temperatura que posseeix el fum respecte a l'ambient. Aquesta elevació es perllonga en tant que siguin perceptibles l'impuls mecànic i, especialment, el desplaçament vertical per gradient tèrmic. El resultat d'aquest fenomen no estacionari s'anomena sobrelevació de la fumera.

El segon fenomen a considerar és el desplaçament del centre de la fumera degut a l'arrossegament dels contaminants pel vent: és l'advecció.

Simultàniament a aquests processos, es produeix la difusió del contingut de la fumera des de la seva línia central, en les tres direccions de l'espai: és la difusió turbulenta.

Al mateix temps, cal considerar, per a aquells contaminants no inerts, la cinètica de les reaccions químiques que provoquen la seva transformació en altres contaminants secundaris, així com la velocitat amb que el terra absorbeix els contaminants. Aquests dos últims fenòmens, tanmateix, solen considerar-se de manera independent de la resta de processos (de manera que es simplifica el seu plantejament). El motiu és que, per a la resolució del problema de la difusió atmosfèrica, en primer lloc s'ha de conèixer on es troben els contaminants en cada moment per estudiar posteriorment quines són les transformacions que poden patir durant el recorregut.

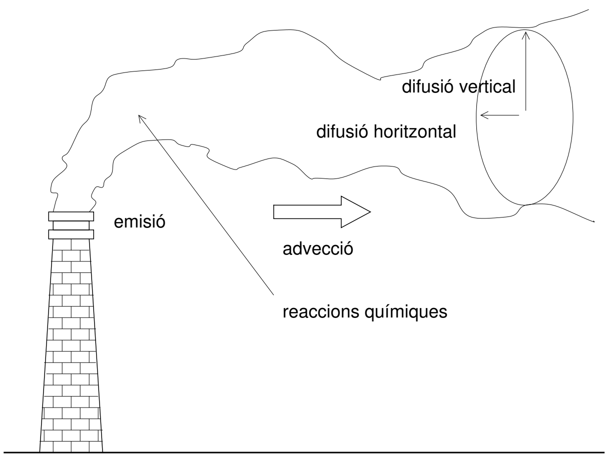

Figura 3: Fenòmens presents en el transport d'una fumera gasosa a l'atmosfera

Des del punt de vista fenomenològic, el moviment d'una fumera està perfectament caracteritzat pel vent, l'estabilitat i la turbulència atmosfèrica. Si els efectes del vent i de la turbulència són fàcilment comprensibles (a major turbulència, major dispersió de la fumera), l'estabilitat atmosfèrica és un concepte que requereix consideracions particulars.

En primer lloc, hem de tenir en compte l'evolució més habitual de la capa límit atmosfèrica durant el període diürn-nocturn. Pel matí, l'escalfament solar produeix

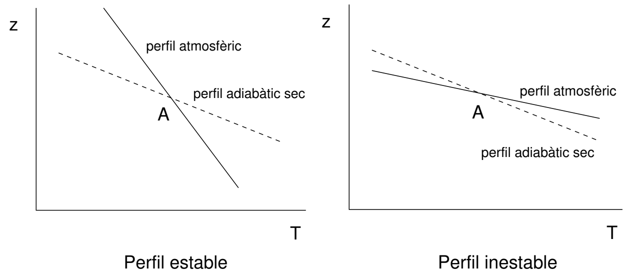

Figura 4: Perfils estables i inestables

la ruptura de la capa estable propera a la superfície terrestre que domina durant la nit, mitjançant la formació de corrents verticals d'aire calent que pugen des del terra. Degut a aquest efecte la capa estable s'eleva. Aquests corrents arriben a la seva màxima intensitat a les primeres hores del vespre, per a començar a decréixer a mida que disminueix el flux de calor solar.

Per la nit, amb el vent en calma, torna a aparèixer una capa estable molt definida a baixa alçada, que sol créixer durant el període nocturn, aquest creixement s'accelera si augmenta la velocitat del vent.

A més, tant pel dia com per la nit, en situacions de forta turbulència atmosfèrica solen produir-se ruptures del flux en dues o més capes horitzontals clarament diferenciades.

Existeix una estreta interrelació entre les formes que adopta una fumera que emet a certa alçada sobre el terra i el gradient vertical de temperatura present a la capa límit, que és indicatiu de l'estabilitat existent a diferents altures.

3.2.1 Estabilitat atmosfèrica

Els moviments verticals de l'aire estan condicionats a la seva flotabilitat. La flotabilitat d'una bombolla d'aire depèn de la seva densitat relativa respecte a la de l'entorn que l'envolta. La densitat de l'aire varia fortament en funció de la seva temperatura, de forma que a l'aire més fred li correspon una major densitat relativa i per tant una tendència a l'enfonsament. Això és tot el contrari al que succeeix amb l'aire calent.

La relació entre l'anomenat perfil adiabàtic (veure glossari) i el real de l'atmosfera determina el que es coneix com a estabilitat vertical. En el desplaçament adiabàtic sec (veure glossari) d'una bombolla d'aire que puja o baixa es produeix un refredament o un escalfament, respectivament, d'uns 10 C per quilòmetre. Es produeixen tres tipus d'equilibri: Estable, Neutre i Inestable. En general, una atmosfera *estable* és la que inhibeix els moviment verticals mentre que una atmosfera *inestable* els amplifica. Es denomina atmosfera *neutra* quan és indiferent a aquests moviments.

Considerem la Fig. 4: les línies sòlides representen el perfil real de temperatura a l'atmosfera i les línies de traços el de la temperatura d'una bombolla que canviés d'alçada, situada prèviament a A (perfil adiabàtic sec).

En el cas (a) si la bombolla d'aire ascendeix, la seva temperatura acaba sent menor que la del seu entorn i per tant torna de nou cap a A, per ser més densa que l'aire que l'envolta. En aquest mateix cas si la bombolla descendeix la seva temperatura seria més alta que la del seu entorn i per tant tendeix a recuperar la seva posició A, per tenir una densitat menor que l'aire circumdant. Tenim doncs un perfil vertical estable en el que es tendeix a inhibir els moviments verticals de l'aire.

En el cas (b), seguint els mateixos raonaments emprats anteriorment, observem que el resultat és una amplificació dels moviments verticals de la bombolla per ser aquesta més lleugera (a dalt) i més densa (a baix) que l'aire que l'envolta. Estem llavors a davant d'una situació Inestable. Les condicions de forta inestabilitat són les causants de fortes ràfegues ascendents d'aire en les que es condensa el vapor d'aigua, donant lloc a la formació de gotes d'aigua que poden assolir una forma tal que acaben en precipitacions.

Si el perfil real de l'atmosfera coincideix amb la variació adiabàtica de temperatura diem que som a davant d'un perfil Neutre.

3.2.2 Turbulència atmosfèrica

Definirem turbulència com les variacions caòtiques observades en els valors de les magnituds termodinàmiques mesurades de forma instantània a l'atmosfera. Quan s'esmenta la velocitat, direcció del vent, temperatura, ... s'entèn que aquestes mesures són una mitja temporal dites propietats. La turbulència pot considerar-se com una fluctuació a l'atzar sobreposada al valor mig d'una magnitud termodinàmica mesurada a l'atmosfera.

Si considerem una bossa de contaminació emesa a l'atmosfera, l'efecte de la turbulència es manifesta de la forma següent: els remolins o fluctuacions d'escala més gran que la bossa de contaminació l'empenyen, la traslladen o la sacsegen a l'atzar. Els remolins d'escala similar a la bossa l'estiren, la deformen i acaben per fraccionar-la en bosses irregulars més petites. Aquestes cauen sota l'acció dels remolins d'escala més petita i així successivament fins que l'acció de la difusió molecular acaba el procés. Al mateix temps, la forma general del núvol de gas creix durant aquest refredament i passa a caure sota l'acció turbulenta d'escales majors. L'efecte final és la dispersió de la contaminació inicialment concentrada en la bossa d'aire.

3.2.3 Dispersió de la fumera. Estratificació

Per a la fumera de contaminació d'una xemeneia tenim diferents possibilitats segons l'estratificació que presenta l'atmosfera. Quan hi ha un perfil superadiabàtic (Fig. 5), que implica una atmosfera molt inestable, els desplaçaments verticals són afavorits, per la qual cosa presenta fortes oscil·lacions en aquesta direcció. Es produeix l'anomenat serpenteig (looping), que implica la possibilitat de que la fumera impacti en punts dispersos del terreny proper al focus emissor, irregularment distribuïts i durant curts períodes de temps.

Quan el gradient vertical de temperatura és negatiu (Fig. 6), però menys negatiu que l'adiabàtic, la fumera, com la capa atmosfèrica, s'estabilitza. Això es deu a que es troba més restringida pel que fa a la seva mobilitat vertical. La dispersió turbulenta, si és suficientment intensa, pot no haver estat anul·lada pels efectes tèrmics, de manera

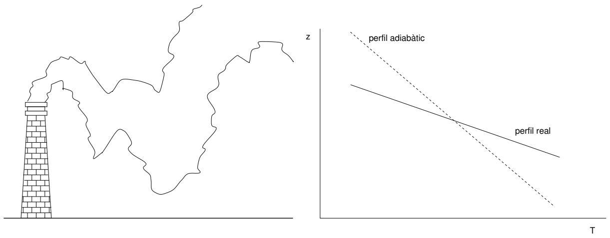

Figura 5: Fumera de forma serpentejant

que la fumera s'equilibra en una forma cònica característica. El seu impacte sobre el terreny proper és poc probable i de produir-se, es deuria a la escassa alçada d'emissió o a la presència d'elevacions topogràfiques importants.

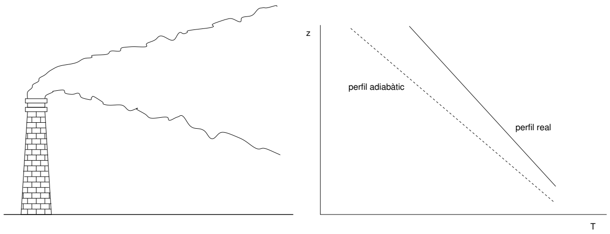

Figura 6: Fumera de forma cònica

Quan hi ha un perfil de temperatura netament positiu (Fig. 7), indicatiu d'una capa atmosfèrica estable, la fumera es troba atrapada en el nivell d'emissió, ja que el seu moviment vertical està absolutament impossibilitat. Es parla llavors d'una fumera estesa horitzontalment (fanning).

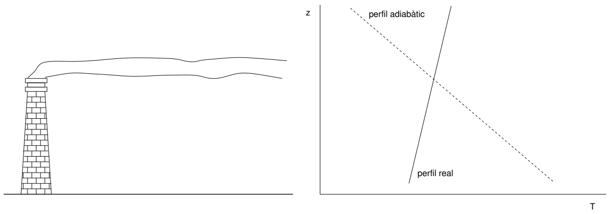

Figura 7: Fumera de forma horitzontal

L'aparició d'una inversió de temperatura (canvi d'estabilitat), a la capa atmosfèrica dins de la que es produeix l'emissió de la fumera, pot tenir dos efectes oposats:

1. Si la capa que es troba sota la fumera (Fig. 8) presenta un gradient vertical de temperatura positiu (capa estable) i la situada a sobre, un gradient negatiu proper a la neutralitat (capa neutra o inestable), la fumera només podrà ascendir, doncs la capa estable l'impedeix apropar-se a terra. Aquest efecte s'anomena elevació de la fumera (lofting).

2. Quan es presenta el cas contrari, amb una capa inestable per sota de la fumera (Fig. 9) i una altra estable per sobre, el corrent de gasos que troba el seu equilibri en l'atmosfera es veu forçat a caure a terra i pot impactar sobre una zona de manera continuada en tant que les condicions meteorològiques no varien. Aquest fenomen s'anomena fumigació, i és la situació més perillosa en el comportament d'una fumera de contaminants.

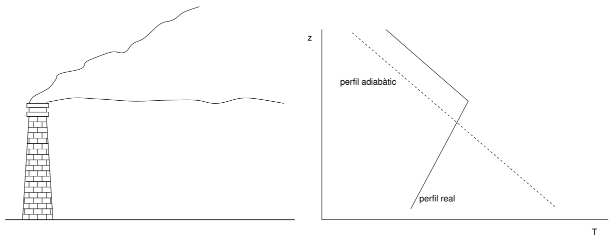

Figura 8: Elevació de la fumera degut a la inversió tèrmica

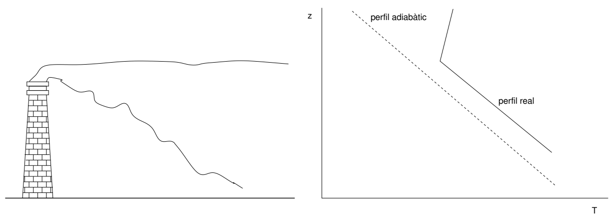

Figura 9: Fenomen de fumigació per inversió tèrmica

Precisament, aquest efecte confereix una gran importància a la presència d'inversions tèrmiques a les capes baixes de l'atmosfera ja que, segons la seva intensitat, poden arribar a taponar l'ascens de la fumera i fer que aquesta contamini regions relativament properes al focus emissor.

En aquesta caracterització no hem avaluat l'efecte de la turbulència mecànica, un altre factor a tenir en compte en la dispersió de la fumera. Però en qualsevol cas, encara que turbulència i estabilitat atmosfèrica estan relacionades, la segona no implica necessàriament un fort increment de la primera, ja que la magnitud del vent i els efectes topogràfics també són importants.

4 Models matemàtics de la dispersió de contaminants

La modelització numèrica de l'atmosfera consisteix en obtenir una predicció objectiva de l'estat futur de l'atmosfera resolent un sistema d'equacions que descriuen l'evolució de les variables atmosfèriques (temperatura, vent, humitat...) que defineixen l'estat de l'atmosfera. Els models són diferents entre ells en el tipus d'aproximacions i suposicions que fem en aplicar les equacions, en la seva resolució matemàtica i en els paràmetres que es consideren.

En Climatologia, l'ús d'un model és imprescindible per fer pronòstics meteorològics i per intentar preveure les conseqüències dels possibles canvis climàtics a mig i llarg termini.

Històricament, els meteoròlegs per a la seva realització divideixen l'atmosfera en capes i cada capa en una quadrícula, generant així un retícul de cel·les en tres dimensions. Després, introdueixen en cada una de les cel·les dades de temperatura i pressió i equacions que expressen com podrien variar aquestes dades segons les condicions generals i les dades de les cel·les veïnes. Aquests models eren útils per a prediccions del clima a curt termini.

Els seus successors han estat els actuals GCM (Global Circulation Models). Gràcies als avenços informàtics, aquests nous models són capaços de processar cascades de dades, que procedeixen d'una cada vegada més amplia xarxa de satèl·lits i estacions de control remot. Poden modelar l'atmosfera del món amb un nivell de detall sorprenent. Però una cosa és predir que demà plourà i una altra saber si haurà moltes sequeres durant els propers 50 anys.

4.1 Tipus de models

La modelització del comportament de la contaminació atmosfèrica és una eina fonamental en els estudis de pol·lució de l'aire. Existeixen models basats en experiments de laboratori que han permès identificar alguns mecanismes de transport de contaminants atmosfèrics. El problema global ha estat abordat amb diferents models matemàtics, amb major i menor dosi d'empirisme. Així, es distingeixen dos tipus bàsics d'orientacions en aquesta modelització:

- Models deterministes, típicament models de difusió atmosfèrica, que tracten d'establir alguna formulació matemàtica que descrigui els processos atmosfèrics que influeixen en el transport de contaminants. L'objectiu es trobar la relació entre la causa (emissions) i l'efecte (nivells de concentració de contaminants en l'atmosfera i el terra, immissió).
- Models estadístics, basats en relacions estadístiques entre dades d'emissió, meteorologia i concentracions de contaminants disponibles.

Atenent a diferents criteris, i no només al seu fonament, els models de la qualitat de l'aire es poden classificar segons el seu abast espaial en regionals, locals, continentals o globals o bé segons la seva resolució temporal en períodes de termini curt o llarg.

4.2 Models de difusió atmosfèrica

Els models de difusió atmosfèrica són una de les solucions més esteses al problema del comportament dels contaminants a l'atmosfera. El seu plantejament general segueix l'esquema d'un model de processos o fenòmens, es a dir, consisteix en aplicar un model matemàtic a cada un dels fenòmens que experimenten els contaminants a l'atmosfera, i sumar les contribucions de tots els models del procés en una equació de balanç o conservació per a cada propietat considerada.

El balanç de contaminant en l'atmosfera aplicable en forma general és

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial (u_j c_i)}{\partial x_j} = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j \partial x_j} + R_i(c_1, \ldots, c_n, T) + S(\vec{x}, T) \quad i = 1, \ldots, N \tag{1}$$

on el primer terme representa la variació de concentració de contaminant amb el temps, el segon l'entrada neta de contaminants associada al flux atmosfèric (advecció), el tercer la variació de la concentració de contaminant degut a la difusió turbulenta, el quart la velocitat de desaparició del contaminant per reacció química i el cinquè la aparició de contaminant en l'entorn considerat, provinent de focus emissors en el propi entorn.

La resolució analítica d'aquestes equacions no és possible, ja que no es coneix la forma ni de la funció ni de la difusió turbulenta (D_i). A més, és necessari resoldre les N equacions diferencials simultàniament per a tenir en compte la influència de la concentració i el seu balanç. Per a això, existeixen dues aproximacions generals a la resolució d'aquest problema: la via euleriana i la via lagrangiana.

- Eurelians: Utilitzen un sistema de referència absolut i tracten de calcular la difusió referida a aquest sistema a partir de diferents aproximacions (closure).
- Lagrangians: Distingeixen dos sistemes de coordenades per al càlcul del desplaçament dels contaminants: un absolut, referit a les coordenades del focus emissor, en el que es calcula la traslació mitjana dels elements de contaminant considerats, i un altre relatiu, referit a un punt representatiu de la translació mitjana de la fumera, per a tenir en compte la dispersió de la fumera deguda a la turbulència.

La resolució simultània de totes les equacions de conservació, tal i com s'estudia en els models de predicció meteorològica, és complexa. Aquesta complexitat és molt major si s'afegeixen les equacions de balanç de matèria per a cada component. Ara bé, els contaminants atmosfèrics es troben en concentracions molt més petites que els principals components de l'aire, pel que la seva influència sobre el flux atmosfèric, es a dir, sobre la meteorologia, es menyspreable. Per tant l'equació de balanç de cada component (contaminant) pot ser resolta independentment de la resta d'equacions de conservació (de continuïtat, d'energia, de quantitat de moviment). Aquesta hipòtesi de flux estacionari no és aplicable en altres sistemes naturals en els que la presència del contaminant pot modificar significativament el flux a dintre del sistema. És el que passa, per exemple, quan la densitat o viscositat del fluid varien amb la concentració de contaminant.

La hipòtesi de flux estacionari considera que l'equació de difusió es resol en cada període de temps, durant el qual es considera que el flux és estacionari. Pot resoldre's de forma consecutiva al llarg de diversos períodes estacionaris diferents, per a que es tingui en compte la variació del flux sobre el transport del contaminant de manera discreta. Tanmateix, aquesta solució no permet que existeixi cap influència del contaminant sobre el flux.

4.3 La solució gaussiana

Ni la solució euleriana ni la lagrangiana aporten un resultat pràctic aplicable al problema de la distribució de contaminants a l'atmosfera, pel que habitualment és precís considerar algunes aproximacions per a obtenir una solució pràctica i vàlida, bé sigui una solució analítica o bé una solució numèrica. La solució analítica més àmpliament utilitzada i que ha tingut un major èxit és l'equació gaussiana. Aquesta equació s'obté a partir de la solució euleriana o de la solució lagrangiana, considerant algunes aproximacions.

La solució Gaussiana és

$$< c(x,y,z,t) >= \frac{S}{(2\pi)^{3/2}\sigma_x(t)\sigma_y(t)\sigma_z(t)} \exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2(t)} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2(t)} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2(t)}\right] \quad (2)$$

Com es pot observar, el nom de la solució (gaussiana) es degut a la forma de la funció resultant de la integració. Les aproximacions que es consideren per a obtenir aquesta solució imposen que aquesta equació només serà vàlida quan:

- Les reaccions químiques siguin lentes comparades amb el transport turbulent.
- Les escales de longitud i temps característiques dels canvis de concentració siguin grans comparades amb les corresponents escales de transport turbulent.

Aquestes condicions no es compleixen en zones molt properes a focus localitzats. El model tan sols és vàlid, per tant, en situacions amb reaccions químiques relativament lentes (contaminants inerts) i focus dispersos (zones urbanes).

Segons l'aproximació gaussiana, s'aplica la hipòtesi de flux atmosfèric homogeni, pel que la velocitat del vent u és funció exclusivament del temps.

Però, fins i tot, $u(t)$ és una funció aleatòria en el temps i és necessari conèixer alguna propietat d'aquesta aleatorietat que permeti integrar-la en el model.

La solució general gaussiana pot simplificar-se en ocasions per a adaptar-se a determinats entorns. Així, considerem un entorn homogeni i estacionari en el que el vent té la direcció de l'eix X i es manté constant en el temps i l'espai. Llavors es pot menysprear l'efecte de la dispersió, representat per la variança σ_x, en el transport en aquesta direcció, ja que l'efecte del vent és molt major.

En aquest cas, els paràmetres σ_y i σ_z es mantenen constants durant el transcurs del temps a un mateix lloc i depenen tan sols del temps x/u que triga la contaminació en arribar a aquest lloc. En aquestes condicions, σ_y i σ_z es poden expressar en funció de només la posició x . L'equació gaussiana que defineix la dispersió d'un contaminant des d'un focus emissor puntual continu es simplifica

$$< c(x,y,z) >= \frac{S}{2\pi\sigma_y(x)\sigma_z(x)} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2(x)} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2(x)}\right] \quad (3)$$

essent S el cabal màsic d'emissió del contaminant.

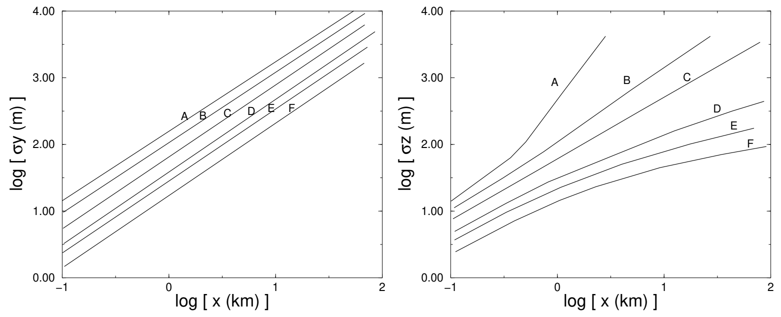

Figura 10: Valors empírics de la dispersió

Si el que tenim és un focus emissor lineal (per exemple, una carretera) en la direcció y perpendicular a la direcció del vent, donat que l'emissió S és homogènia al llarg de tota la línia de la carretera, l'expressió estacionària es redueix a

$$< c(x,z) >= \frac{S}{(2\pi)^{1/2}\sigma_z(x)} \exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma_z^2(x)}\right] \tag{4}$$

Aquestes expressions només poden utilitzar-se de forma precisa en les condicions indicades, encara que habitualment representen una aproximació acceptable. En qualsevol cas, ara ja pots fer l'activitat 4.

Fins ara no hem considerat cap efecte degut a la no homogeneitat del medi. Potser la inhomogeneitat més marcada, alhora que la més freqüent, és la deguda a que l'atmosfera està limitada pel terra. Com a primera aproximació podem suposar que el terra és com un mirall que reflexa tota la contaminació que li arriba, sense modificar la seva velocitat horitzontal i invertint la seva velocitat vertical. En aquest cas, l'Eq. 3 es converteix en

$$\begin{aligned} &< c(x,y,z) >= \\ &= \frac{S}{2\pi\sigma_y(x)\sigma_z(x)} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2(x)}\right] \left\{\exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2(x)}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2(x)}\right]\right\} \end{aligned}$$

El focus emissor, que a les equacions precedents era a $(0,0,0)$, ara es troba a $(0,0,H)$.

Queda pendent la qüestió de trobar una expressió acceptable per a $\sigma_y(x)$ i $\sigma_z(x)$. A la Fig. 10 es poden veure unes relacions empíriques.

A	molt inestable
B	moderadament inestable
C	lleugerament inestable
D	indiferent
E	lleugerament estable
F	moderadament estable
G	molt estable

Taula 5: Descripció qualitativa de l'estratificació

Cada corba es correspon a un estat de l'estratificació atmosfèrica. A la Taula 5 es pot veure la descripció qualitativa de cadascun d'aquests estats.

Resum

En aquesta unitat s'ha descrit l'atmosfera com un medi complex, s'ha estudiat la contaminació atmosfèrica i s'han descrit els seus efectes. També s'ha tractat la dispersió dels contaminants emessos per les xemeneies i s'han vist diferents models matemàtics per descriure els nivells d'immissió que en resulten.

En el nostre estudi, la troposfera és la capa de més interès ja que és la zona a on es tranporten els contaminants més importants. A mes, és la regió a on es produeixen gairebé tots els fenòmens climàtics.

S'han definit els conceptes de contaminació atmosfèrica, nivell d'emissió i nivell d'immissió. Tan sols els contaminants primaris són emessos. Els contaminants secundaris es formen per reacció química d'altres contaminants. Els focus d'emissió poden ser naturals o originats per activitats de l'home (antropogènics).

Els efectes de la contaminació atmosfèrica són amplis. Per mesurar i controlar els efectes sobre la salut humana s'han establert els índexs de qualitat atmosfèrica. A Catalunya s'utilitza l'índex ICQA que és una adaptació a la normativa europea de l'índex americà PSI. Mitjançant el valor d'aquest índex, es pot classificar l'estat de l'atmosfera en tres categories: bona, millorable i pobre.

Hem descrit la Meteorologia relacionada amb la contaminació: pressió atmosfèrica, núvols, humitat i vent. Aquest darrer fenòmen és el més important en el trasport de contaminants a través de l'atmosfera. Un altre fenòmen meteorològic important és la inversió tèrmica, que pot impossibilitar el desplaçament vertical de contaminants.

S'han descrit els fenòmens implicats en la dispersió de contaminants per xemeneies. Una atmosfera estable inhibeix els moviments verticals i una atmosfera inestable els amplifica. Des del punt de vista fenomenològic, el moviment d'una fumera està caracteritzat pel vent, l'estabilitat i la turbulència atmosfèrica. Es destacable el fenòmen de fumigació per inversió tèrmica. La seva presència a les capes baixes de l'atmosfera pot arribar a taponar l'ascens de la fumera i fer que la contaminació impacti sobre regions relativament properes al focus emissor.

Per acabar, hem fet una introducció a la simulació numèrica per obtenir una predicció objectiva de l'estat futur de l'atmosfera. Això s'aconsegueix resolent un grup d'equacions que descriuen l'evolució de les variables atmosfèriques. Existeixen diferents models amb diferents quantitats de paràmetres empírics. Es distingeixen dos tipus bàsics: deterministes i estadístics.

Per a la resolució simultània de totes les equacions de conservació cal tenir en compte que els contaminants es troben en concentracions molt més petites que les dels principals components de l'aire. En particular, hem estudiat el model gaussià i l'hem adaptat a alguns entorns fent ús de diverses aproximacions i suposicions.

Glossari

adiabàtic sec procés durant el qual no hi ha canvis de fase a l'aigua.

emissió contaminants emesos a l'atmosfera per xemeneies, cotxes, ...

ICQA acrònim de "índex català de la qualitat de l'aire"

immissió contaminants dipositats sobre la superfície terrestre

perfil adiabàtic és el perfil ideal pel qual no hi ha cap intercanvi de calor amb el medi del voltant.

PSI acrònim de "polution standard index"

Referències addicionals

- **G. Luna Tomás:** *La contaminació atmosfèrica.* Generalitat de Catalunya, Barcelona (1995).

  Realitza un estudi de la contaminació existent a Catalunya, senyalant quins són els principals focus emissors i analitzant els nivells de contaminació existents. També presenta solucions per poder disminuir l'emissió de contaminants i els nivells d'immissió.

- **J.J. La Villa:** *Todo sobre el medio ambiente.* Editorial Praxis, Barcelona (1996).

  Ens proporciona una visió global de tots aquells processos que poden contaminar el terra, l'aigua i l'atmosfera, proporcionant solucions per evitar-los.

- **L. Echarri:** *Ciencias de la tierra y del medio ambiente.* Editorial Teide, Barcelona (1998).

  Aquest llibre explica què és el medi ambient, el perquè de la seva regressió i com obtenir un model de desenvolupament sostenible. Proporciona una idea de què és l'atmosfera, de quins són els seus principals contaminants i quines repecussions tenen en el medi ambient i a la salut humana. També proposa una sèrie de models matemàtics.

- **A. Toll and J.M. Baldasano:** *Modelling of photochemical air pollution in the Barcelona area with highly disaggregated anthropogenic and biogenic emissions.* Atmospheric environment **34**, 3069–3084 (2000).

  Aquest article realitza un estudi sobre la contaminació a l'àrea de Barcelona, deguda principalment als elevats nivells d'ozó que hi ha a la primavera i a l'estiu. Per realitzar la simulació numèrica han utilitzat el model MEMO (versió 5) desenvolupat per Kuntz i Moussiopoulos en 1995.

Activitats

1. Consulta la pàgina web *http://www.gencat.es/mediamb/qaire/icqa.htm* de valoració de la qualitat de l'aire a partir de les dades provinents de les estacions automàtiques de la Xarxa de Vigilància i Previsió de la Contaminació Atmosfèrica (XVPCA) de Catalunya. Dóna la teva opinió sobre l'evolució de la contaminació durant la darrera setmana.

2. Consultant l'arxiu de l'ICQA trobeu quin ha estat el millor i el pitjor dia, pel que fa a contaminació atmosfèrica, dels darrers vint dies, a la teva població. A la pàgina web *http://www.infomet.fcr.es/arxiu/* podeu trobar un arxiu de les dades dels observatoris del Servei de Meteorologia de Catalunya, dels darrers vint dies. En concret, hi trobareu mapes on consta la humitat, la temperatura i el vent. Aconseguiu les dades meteorològiques corresponents a la teva població per a aquests dos dies i comenteu quines són les principals diferències.

3. A la pàgina web esmentada a l'activitat 2 també s'hi pot trobar mapes de superfície amb fronts. Pels mateixos dos dies, aconseguiu els corresponents mapes meteorològics i assenyaleu si corresponen a una situació de borrasca (baixes pressions) o anticicló (altes pressions).

4. Considera que tenim un focus emissor lineal, en la direcció y i perpendicular a la direcció del vent, i amb una emissió q homogènia al llarg de tota la línia. Mitjançant la ecuació que ens descriu la concentració en funció de la altura z, representa gràficament $c = c(z)$ per a diferents valors posibles de la variança, i comenta els efectes d'augment o disminució de la variança.

5. Realitza les activitats descrites al guió de pràctiques corresponent a aquesta unitat.

Exercicis d'autocomprovació

1. Quina de les següents zones de l'atmosfera conté més ozó?
   (a) Troposfera
   (b) Estratosfera
   (c) Mesosfera
   (d) Ionosfera
2. Quin d'aquests gasos no es considera com gas de efecte hivernacle?
   (a) CO_2
   (b) CH_4
   (c) He
   (d) O_3
3. Quina de les següents formes d'una fumera produeix més contaminació sobre llocs propers a la xemeneia?
   (a) fumera de forma cònica
   (b) fumera de forma horitzontal
   (c) fumera de forma serpentejant
   (d) fumera de fumigació
4. Mitjançant el valor del índex de qualitat de l'aire, quin d'aquests valors correspon a la categoria baixa per a la salut humana?
   (a) 22
   (b) 28
   (c) 36
   (d) 52
5. De les següents afirmacions, quina es falsa?
   (a) El moviment d'una fumera està perfectament caracteritzat pel vent, l'estabilitat i la turbulència

(b) Els núvols cirros semblen un cabell o plomes flotant en l'aire

(c) Els gradients de pressió atmosfèrica ocasionen moviments de l'aire de llocs d'alta a baixa pressió

(d) Els principals gasos productors de pluja àcida són el SO_2 i el CO_2

Solucions dels exercicis d'autocomprovació

1. (b) 2. (c) 3. (d) 4. (a) 5. (d)