



ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERÍA ELECTROMECAÁNICA
ESPECIALIDAD ELECTRÓNICA

**Diseño y programación de un software para
prevenir el riesgo de contaminación de una
población por gases contaminantes**

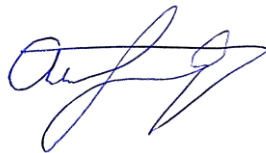
Autor: Álvaro Franco Guisasola

Directora: María del Mar Cledera Castro
Pilar Palomar Herrero

Madrid

Julio 2018

Declaro, bajo mi responsabilidad, que el Proyecto presentado con el título
*Diseño y programación de un software para prevenir el riesgo
de contaminación de una población por gases contaminantes* en la ETS de
Ingeniería - ICAI de la Universidad Pontificia Comillas en el
curso académico 2017/2018 es de mi autoría, original e inédito y
no ha sido presentado con anterioridad a otros efectos. El Proyecto no es
plagio de otro, ni total ni parcialmente y la información que ha sido tomada
de otros documentos está debidamente referenciada.



Fdo.: Álvaro Franco Guisasola

Fecha: 09/07/2018

Autorizada la entrega del proyecto

DIRECTORES DEL PROYECTO



Fdo.: María del Mar Cledera Castro Fecha: 09/07/2018



Fdo.: Pilar Palomar Herrero

Fecha: 09/07/2018

AUTORIZACIÓN PARA LA DIGITALIZACIÓN, DEPÓSITO Y DIVULGACIÓN EN RED DE PROYECTOS FIN DE GRADO, FIN DE MÁSTER, TESIS O MEMORIAS DE BACHILLERATO

1º. Declaración de la autoría y acreditación de la misma.

El autor D. ÁLVARO FRANCO GUIASOLA DECLARA ser el titular de los derechos de propiedad intelectual de la obra: PROYECTO DE FIN DE MÁSTER: DISEÑO Y PROGRAMACIÓN DE UN SOFTWARE PARA PREVENIR EL RIESGO DE CONTAMINACIÓN DE UNA POBLACION POR GASES CONTAMINANTES que ésta es una obra original, y que ostenta la condición de autor en el sentido que otorga la Ley de Propiedad Intelectual.

2º. Objeto y fines de la cesión.

Con el fin de dar la máxima difusión a la obra citada a través del Repositorio institucional de la Universidad, el autor **CEDE** a la Universidad Pontificia Comillas, de forma gratuita y no exclusiva, por el máximo plazo legal y con ámbito universal, los derechos de digitalización, de archivo, de reproducción, de distribución y de comunicación pública, incluido el derecho de puesta a disposición electrónica, tal y como se describen en la Ley de Propiedad Intelectual. El derecho de transformación se cede a los únicos efectos de lo dispuesto en la letra a) del apartado siguiente.

3º. Condiciones de la cesión y acceso

Sin perjuicio de la titularidad de la obra, que sigue correspondiendo a su autor, la cesión de derechos contemplada en esta licencia habilita para:

- a) Transformarla con el fin de adaptarla a cualquier tecnología que permita incorporarla a internet y hacerla accesible; incorporar metadatos para realizar el registro de la obra e incorporar “marcas de agua” o cualquier otro sistema de seguridad o de protección.
- b) Reproducirla en un soporte digital para su incorporación a una base de datos electrónica, incluyendo el derecho de reproducir y almacenar la obra en servidores, a los efectos de garantizar su seguridad, conservación y preservar el formato.
- c) Comunicarla, por defecto, a través de un archivo institucional abierto, accesible de modo libre y gratuito a través de internet.
- d) Cualquier otra forma de acceso (restringido, embargado, cerrado) deberá solicitarse expresamente y obedecer a causas justificadas.
- e) Asignar por defecto a estos trabajos una licencia Creative Commons.
- f) Asignar por defecto a estos trabajos un HANDLE (URL *persistente*).

4º. Derechos del autor.

El autor, en tanto que titular de una obra tiene derecho a:

- a) Que la Universidad identifique claramente su nombre como autor de la misma
- b) Comunicar y dar publicidad a la obra en la versión que ceda y en otras posteriores a través de cualquier medio.
- c) Solicitar la retirada de la obra del repositorio por causa justificada.
- d) Recibir notificación fehaciente de cualquier reclamación que puedan formular terceras personas en relación con la obra y, en particular, de reclamaciones relativas a los derechos de propiedad intelectual sobre ella.

5º. Deberes del autor.

El autor se compromete a:

- a) Garantizar que el compromiso que adquiere mediante el presente escrito no infringe ningún derecho de terceros, ya sean de propiedad industrial, intelectual o cualquier otro.
- b) Garantizar que el contenido de las obras no atenta contra los derechos al honor, a la intimidad y a la imagen de terceros.

- c) Asumir toda reclamación o responsabilidad, incluyendo las indemnizaciones por daños, que pudieran ejercitarse contra la Universidad por terceros que vieran infringidos sus derechos e intereses a causa de la cesión.
- d) Asumir la responsabilidad en el caso de que las instituciones fueran condenadas por infracción de derechos derivada de las obras objeto de la cesión.

6º. Fines y funcionamiento del Repositorio Institucional.

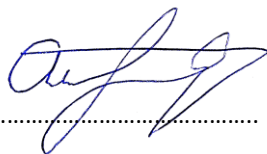
La obra se pondrá a disposición de los usuarios para que hagan de ella un uso justo y respetuoso con los derechos del autor, según lo permitido por la legislación aplicable, y con fines de estudio, investigación, o cualquier otro fin lícito. Con dicha finalidad, la Universidad asume los siguientes deberes y se reserva las siguientes facultades:

- La Universidad informará a los usuarios del archivo sobre los usos permitidos, y no garantiza ni asume responsabilidad alguna por otras formas en que los usuarios hagan un uso posterior de las obras no conforme con la legislación vigente. El uso posterior, más allá de la copia privada, requerirá que se cite la fuente y se reconozca la autoría, que no se obtenga beneficio comercial, y que no se realicen obras derivadas.
- La Universidad no revisará el contenido de las obras, que en todo caso permanecerá bajo la responsabilidad exclusiva del autor y no estará obligada a ejercitar acciones legales en nombre del autor en el supuesto de infracciones a derechos de propiedad intelectual derivados del depósito y archivo de las obras. El autor renuncia a cualquier reclamación frente a la Universidad por las formas no ajustadas a la legislación vigente en que los usuarios hagan uso de las obras.
- La Universidad adoptará las medidas necesarias para la preservación de la obra en un futuro.
- La Universidad se reserva la facultad de retirar la obra, previa notificación al autor, en supuestos suficientemente justificados, o en caso de reclamaciones de terceros.

Madrid, a 14 de Julio de 2018

ACEPTA

Fdo.



DISEÑO Y PROGRAMACIÓN DE UN SOFTWARE PARA PREVENIR EL RIESGO DE CONTAMINACIÓN DE UNA POBLACIÓN POR GASES CONTAMINANTES

Autor: Franco Guisasola, Álvaro.

Directoras: Cledera Castro, María del Mar
Palomar Herrero, Pilar

Entidad Colaboradora: ICAI – Universidad Pontificia Comillas

Abstract. *El mundo cada vez es más consciente de los problemas medioambientales provocados por la actividad humana. Entre estos problemas está la contaminación atmosférica que afecta la calidad del aire respirado y pone en peligro la salud de las personas. Ante esto se plantea este proyecto en el que se ha desarrollado un programa que permita predecir los valores de la concentración de contaminantes en una población por efecto de una o varias fuentes de emisión para no exceder los límites de calidad de aire establecidos por la Unión Europea. El software elaborado aprovecha que en la actualidad la información meteorológica se puede obtener de internet, que junto a los datos que se introducen a través de la interfaz usuario se utilizan para calcular las concentraciones con un modelo de dispersión gaussiano.*

Palabras clave: *Dispersión atmosférica, modelo gaussiano, medioambiente, contaminación, software, programación orientada a objetos, interfaz de usuario, MATLAB.*

I. INTRODUCCIÓN

Desde que la Revolución Industrial inició en el siglo XVIII, los procesos de producción de las fábricas, el desarrollo del transporte y el uso de los combustibles han ido incrementado la concentración de diferentes contaminantes atmosféricos (CO, NO_x, SO_x, partículas,...) exponencialmente. Estas sustancias contaminantes tienen provocan problemas de salud en las personas, así como un efecto sobre el medio ambiente. En los últimos años se ha comenzado a legislar a este respecto con el fin de frenar estos efectos; Europa es pionera a este respecto pues desde 2001 creó leyes acerca de techos nacionales de emisión de contaminantes atmosféricos. Entre estas leyes destacan la ley española 26/2007, de 23 de octubre, de Responsabilidad Medioambiental [1] por medio de la cual se incorpora al ordenamiento jurídico la normativa europea del Parlamento Europeo del 21 de abril de 2004 sobre la responsabilidad medioambiental con la prevención y reparación de daños medioambientales. Posteriormente con el Real Decreto 2090/2008 [2], se obliga a realizar un análisis de riesgo medioambiental que puede causar cualquier instalación, analizando el valor económico del daño potencial que pueden provocar.

En adición a estas leyes, existe la normativa acerca de la calidad del aire que establece las

concentraciones máximas de cada contaminante en el ambiente que se recoge en la Directiva 2008/50/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 21 de mayo de 2008 [3] teniendo en cuenta las directrices de la OMS (Organización Mundial de la Salud) así como la normativa acerca de las emisiones industriales que se pueden emitir de cada contaminante que se recoge en el Real Decreto 815/2013, de 18 de octubre, acerca del Reglamento de emisiones industriales [4].

Dentro de este marco legal, se sitúa el ámbito de este proyecto que consiste en desarrollar un programa que permita estimar la contaminación que produce una industria sobre una población, de tal forma que se respete toda la normativa acerca de la calidad del aire expuesta. El programa permitirá evaluar si alguno de los contaminantes sobrepasa el valor establecido dentro de la normativa.

En la actualidad existen una gran cantidad de programas que permiten simular el efecto de diferentes contaminantes en el aire. Éstos utilizan modelos atmosféricos para determinar las concentraciones de los contaminantes. De entre todos los sistemas de modelado de dispersión atmosférica destacan: AERMOD, CALPUFF, ALOHA y SCREEN3 desarrollados por la Agencia de Protección Medioambiental de EE.UU. (EPA) o PHAST desarrollado por DNV en el marco europeo.

- Perfil de velocidades del viento: las medidas que se tienen del viento son a una altura 10 metros, pero esta velocidad no es constante con la altitud por lo que es necesario determinar la velocidad del viento a la altura de la pluma.
- Altura efectiva de la pluma: la pluma que sale de la fuente de emisión antes de comenzar la dispersión del contaminante sufre una elevación como consecuencia de la cantidad de movimiento vertical y el efecto de flotabilidad positiva provocada por la alta temperatura de las emisiones. Esta sobre-elevación que se produce de la pluma se calcula por las ecuaciones de Briggs.
- Altura de mezcla: la altura de mezcla es otro parámetro que se utiliza en el modelo y se determina a partir de clase de estabilidad atmosférica de Pasquill.

B. Modelo

De entre todos los modelos de dispersión atmosféricos posibles, se selecciona el modelo de dispersión gaussiano para ser implementado en el programa. La formulación matemática del modelo gaussiano utilizado es:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{u} \cdot \frac{f}{\sigma_y \sqrt{2\pi}} \cdot \frac{g_1 + g_2 + g_3}{\sigma_z \sqrt{2\pi}}$$

En la que se incorpora el término de la dispersión horizontal del contaminante (f), la dispersión vertical cuando el contaminante no es reflejado (g_1), la dispersión vertical cuando el contaminante es reflejado por el suelo (g_2) y la dispersión vertical por efecto de la capa de mezcla atmosférica (g_3).

C. Interfaz de usuario

La interfaz de usuario (UI) se ha desarrollado con el entorno de programación visual GUIDE de MATLAB. La UI tiene como objetivo facilitar al usuario introducir los datos del programa así como mostrar los resultados del modelo de una forma clara y sencilla de interpretar (Figura 3). Los datos de entrada que tiene que especificar el usuario son:

- Datos de la localización (municipio)
- Datos horarios
- Datos de las fuentes de emisión
- Datos del tipo de terreno
- Parámetros del mapa
- Parámetros de la población

Los resultados que proporciona el programa son:

- Mapa gráfico de concentraciones
- Resumen de la información meteorológica
- Concentraciones máximas en la población

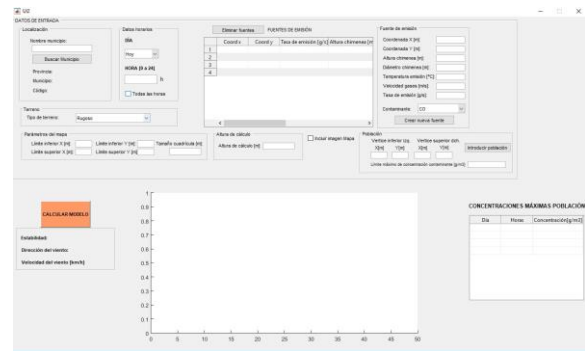


Figura 3. Interfaz de usuario

V. RESULTADOS

Los resultados del proyecto se dividen en dos grupos: los resultados de la validación y los resultados del programa.

A. Resultados de validación

La primera prueba de validación que se realizó del programa fue para validar el modelo de dispersión atmosférico utilizado. Con este fin, se utilizaron los valores de concentración del estudio de Kincaid llevado a cabo por la EPA en el que se analizó la dispersión del contaminante SO₂. El estudio comprende un conjunto de datos de observación de concentración a lo largo de varias horas y días en los que las condiciones atmosféricas variaron tomados desde 28 estaciones de medida distribuidas en el emplazamiento. Los valores de concentración del contaminante observados y los que se obtuvieron del modelo utilizado en este proyecto, en las mismas condiciones (meteorológicas y de la fuente de emisión) se compararon. Esta comparación no es aconsejable hacerla directamente con los valores de concentración, sino que se utilizó el RHC (*robust highest concentration*) que es un valor estadístico de la concentración que tiene en cuenta la variabilidad, media y valor máximo observados en períodos de promediado.

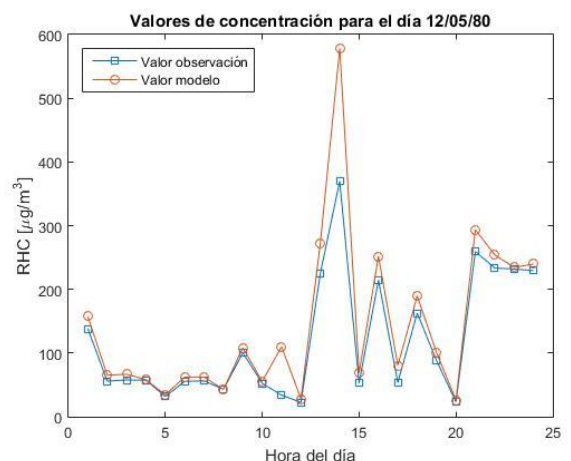


Figura 4. Comparación de los valores de RHC observados y los calculados por el modelo a lo largo de un día

Como se muestra en la Figura 4, el modelo utilizado en el proyecto se ajusta bastante a los valores de concentración reales tendiendo en la mayoría de los casos a sobreestimar el valor real. Esto es positivo pues el objetivo del programa es comparar los valores de concentración en la población con un límite máximo de concentración del contaminante.

Los resultados estadísticos del error del modelo se resumen en la Tabla 1:

<i>Error relativo</i>	$\left \frac{RHC_{\text{observado}} - RHC_{\text{modelo}}}{RHC_{\text{observado}}} \right $
<i>Media</i>	34,7239%
<i>Desviación estándar (σ)</i>	47,8688%
<i>Error relativo máximo</i>	845,1617%

Tabla 1. Medidas estadísticas del error del modelo frente a los valores observados del estudio.

La segunda prueba que se ha llevado a cabo es comparar los resultados del programa desarrollado en el proyecto con los resultados del programa ISC3, perfectamente validado y avalado por la EPA en un mismo escenario de condiciones climatológicas y de la fuente de emisión. Los valores que se compararon (Tabla 2) demuestran que las estimaciones de la concentración del contaminante en ambos casos son prácticamente idénticas, en parte provocadas por las pequeñas variaciones en los parámetros del modelo, como son la σ_y y la σ_z o la altura de la pluma (H) pues se utilizan ecuaciones ligeramente distintas en ambos modelos.

x [km]	Valores de ISC3				Valores del programa desarrollado			
	Conc. [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	σ_y	σ_z	H[m]	Conc. [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	σ_y	σ_z	H[m]
0,4	0	67,683	40	299,534	0	68,2071	41,8017	236,6834
0,8	1,062	126,213	85,566	299,534	0,3226	128,4586	86,4075	333,0155
1,2	17,519	181,384	133,503	299,534	10,6001	185,2387	132,9398	333,0155
1,6	32,118	234,391	183,046	299,534	25,5066	239,7124	180,9608	333,0155
2	34,628	285,798	233,819	299,534	31,3873	292,4537	230,2193	333,0155
2,4	31,612	335,935	285,595	299,534	30,8338	343,8077	280,5484	333,0155
2,8	27,273	385,02	338,218	299,534	27,8095	394,0053	331,8279	333,0155
3,2	23,129	433,206	391,58	299,534	24,2698	443,2121	383,9662	333,0155
3,6	19,583	480,607	445,594	299,534	20,9510	491,5525	436,8910	333,0155
4	16,659	527,313	500,196	299,534	18,0644	539,1238	490,5432	333,0155

Tabla 2. Comparación entre los valores del programa ISC3 y los del programa

B. Resultados del programa

Con el propósito de demostrar el funcionamiento del software desarrollado, se realizó una prueba de aplicación. Esta prueba era calcular los valores de concentración en la población de Puertollano, por el

efecto de tres fuentes de emisión de un polígono industrial cercano con características distintas, con el programa. Los resultados de la ejecución del programa se muestran en la Figura 5.

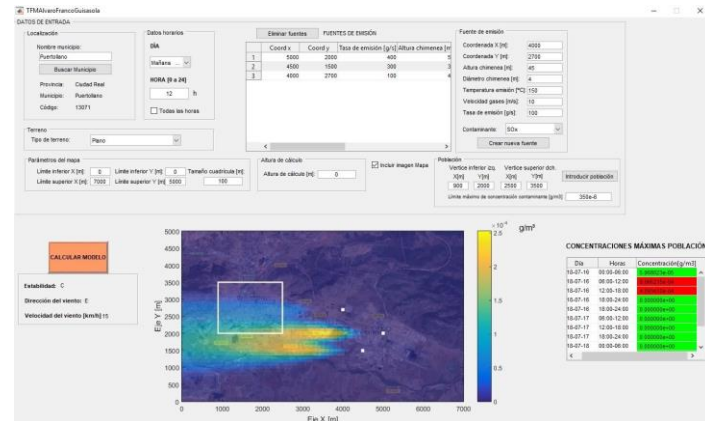


Figura 5. Ejecución del programa

VI. CONCLUSIONES

Las conclusiones que se han sacado en claro de este trabajo son:

- La utilización de la programación orientada a objetos en el desarrollo de este proyecto ha supuesto ciertas ventajas con respecto a que se hubiera llevado a cabo con una programación tradicional. Debido a la sencillez para abstraer las diferentes partes del programa y las relaciones que existen entre estas partes, se facilita la lectura y comprensión del código del programa lo que permite solucionar los problemas del programa de forma más ágil y sencilla (mantenibilidad). Al dividir el programa en partes más pequeñas y compartimentadas, en clases, éstas pueden ser probadas de forma independiente y corregir los errores de cada una (modularidad). La facilidad de añadir, suprimir o modificar nuevos objetos permite hacer modificaciones al programa de forma sencilla sin alterar otras partes del programa (modificabilidad).
- La interfaz de usuario que se ha conseguido, permite introducir los datos de entrada del programa de forma sencilla, estructurada e intuitiva además de presentar los resultados de una forma clara y fácil de interpretar.
- El error del modelo que se ha obtenido con las pruebas de validación ha sido bastante pequeño, lo que ratifica la selección del modelo de dispersión gaussiano como el tipo de modelo utilizada. Hay que diferenciar por tanto el error del modelo y el error del programa en la determinación de la concentración de contaminante. El error total del programa es casi imposible de determinar pues incluye el error realizado en la predicción de las condiciones meteorológicas que al final es una cuestión de azar, la predicción puede ser muy ajustada a la

realidad o bien equivocarse complemente, lo que impide determinar claramente el error cometido en la predicción meteorológica. A este error en la predicción hay que sumar que los valores que pueden tomar las variables meteorológicas no son valores exactos sino que presentan un error de medida: la velocidad del viento se mide en intervalos de 5 km/h, la dirección del viento solo puede tomar valores cardinales (N, NO,...), etc.

- El error del modelo del programa se podría mejorar a costa de introducir más variables de entrada del programa, tanto meteorológicas como de la fuente de emisión o el terreno, lo que supone un problema pues las variables meteorológicas que se obtienen de AEMET están limitadas y no se pueden conocer valores meteorológicos más complejos además de tener que complicar la forma de introducir de los datos al programa a través de la interfaz de usuario. Estas decisiones presentan, como sucede en muchos ámbitos de la ingeniería, un compromiso entre mejorar el modelo y los datos de entrada del modelo de los que se dispone. Ante esta situación, el modelo gaussiano de dispersión atmosférico es el que mejor se ajusta a las condiciones del proyecto, pues la información meteorológica que se obtiene de la API de AEMET junto a unos sencillos datos de entrada que introduce el usuario permite calcular un valor bastante ajustado de la concentración de los contaminantes.

VII. FUTUROS DESARROLLOS

Este proyecto deja la puerta abierta a futuros desarrollos. Los principales se presentan a continuación:

- Mejorar la información climatológica: una de las posibilidades es utilizar más información meteorológica además de la que se obtiene a través de la API de AEMET para aumentar la robustez de las predicciones meteorológicas. Se pueden también incorporar métodos más exactos para estimar algunas de las variables meteorológicas en el programa, como calcular la radiación solar a través de ecuaciones en lugar de tomarla directamente de los valores normales de radiación que proporciona la base de datos de las estaciones meteorológicas de AEMET.
- Incluir las partículas en suspensión como contaminante: las partículas en suspensión, a diferencia de los otros contaminantes, al estar en estado sólido o líquido tienen una velocidad de caída una vez son dispersadas en la atmósfera que se modela por la ley de Stokes. Habría que incluir como datos de entrada del programa la información relativa a las partículas contaminantes.

- Efecto de terrenos complejos: incluir correcciones del modelo cuando los terrenos que se presentan a estudiar dentro del programa son complejos (diferentes alturas, desniveles, pendientes,..) a partir de ecuaciones empíricas.
- Incorporar la cinética de la reacción al modelo gaussiano: el modelo gaussiano de dispersión atmosférica tiene como hipótesis que los contaminantes son no reactivos, pero esta hipótesis no siempre es válida pues en determinadas condiciones atmosféricas los contaminantes experimentan reacciones químicas que los llevan a transformarse en otras sustancias, como ácidos u otros óxidos. Estas reacciones químicas pueden ser introducidas dentro del modelo de dispersión atmosférica utilizando un factor de desintegración que tiene en cuenta el descenso de la concentración del contaminante.

REFERENCIAS

- [1] Gobierno de España Ley 26/2007, de 23 de octubre de Responsabilidad medioambiental. *BOE 24/10/2007*.
- [2] Gobierno de España, Real Decreto de aprobación del Reglamento de desarrollo de la Ley 26/2007. *BOE 23/12/2008*.
- [3] Parlamento Europeo y Consejo, Directiva 2008/50/CE.
- [4] Gobierno de España, Real Decreto 815/2013, de 18 de octubre acerca del Reglamento de emisiones industriales. *BOE 19/10/2013*.

DESIGN AND PROGRAMMING OF A SOFTWARE TO PREVENT THE RISK OF CONTAMINATION OF A POPULATION BY POLLUTING GASES

Author: Franco Guisasola, Álvaro.

Directors: Cledera Castro, María del Mar
Palomar Herrero, Pilar

Collaborator Entity: ICAI – Universidad Pontificia Comillas

***Abstract.** The world is increasingly more aware of the environmental problems caused by human activity. These problems include air pollution that affects the quality of the air that is breathed and endangers the people's health. It considers this project which has developed a program that allows to predict the values of concentration of contaminants in a population due to one or more sources of emissions not to exceed the established air quality limits for the European Union. The elaborate software leverages that today weather information you can get from the internet, which, together with the data which are entered through the user interface, are used to calculate the concentrations with a Gaussian dispersion model.*

***Keywords:** Atmospheric dispersion, Gaussian model, environment, pollution, software, UI, MATLAB, object-oriented programming.*

I. INTRODUCTION

Since the Industrial Revolution in the 18th century, the concentration of various atmospheric pollutants (CO, NO_x, SO₂, particles,...) have been increasing exponentially by the factories production processes, the development of transport and the use of fuels. These pollutants cause health problems in people, as well as a negative effect on the environment. In the last years, legislation has been appearing in order to mitigate the effect of the pollutants. Europe is a pioneer in this aspect; since 2001 EU created laws about atmospheric national emission ceilings. These laws include the Spanish law 26/2007, of October 23, about environmental liability [1] by means which is incorporated into the legal system with the European rules of the European Parliament of 21 April 2004 on the responsibility of environmental prevention and solution of environmental damage. Later, with the Royal Decree 2090 / 2008 [2], is obliged to perform an analysis of environmental hazard that can cause any installation, analyzing the economic value of the potential damage that can cause.

In addition to these laws, there is legislation about the quality of the air that sets the maximum concentrations of each pollutant in the environment contained in Directive 2008/50/EC of the European Parliament and of the Council of 21 May 2008 [3] taking into account the guidelines of the WHO (World Health Organization) as well as with the rules

on industrial emissions that can be issued for each pollutant contained in Royal Decree 815/2013, of 18 October, on the regulation of industrial emissions [4].

Within this legal framework, this project want to develop a program that can estimate pollution produced by an industry on a population, without exceeding the law about the quality of the air exposed. The program will allow to assess whether any of the pollutants exceeds the value.

Currently, there are a lot of programs that allow the simulation of the effect of different pollutants in the air. They use atmospheric models to determine the concentrations of the pollutants. There are different software of atmospheric dispersion modeling: AERMOD, CALPUFF, ALOHA and SCREEN3 developed by the Environmental Protection Agency of USA (EPA) or PHAST developed by DNV in Europe.

II. MOTIVATION

This project consists of developing a program based on a model of atmospheric dispersion, that it can estimate the effects of contamination of an incineration plant on a nearby population.

In which is incorporated the term of horizontal dispersion (f), vertical dispersion with no reflections (g_1), vertical dispersion for reflection from the ground (g_2) and vertical dispersion for reflection from an inversion aloft at the mixed layer (g_3).

C. User Interface

The user interface (UI) has been developed with the visual programming environment GUIDE of MATLAB. The UI is intended to help the user enter data of the program as well as to show the results of the model in a clear and simple way of interpreting (Figure 3). The input data that should specify the user are:

- Location
- Time data
- Emission sources parameters
- Type of terrain
- Map parameters
- Population parameters

The results provided by the program are:

- Graphical map of concentrations
- Summary of meteorological information
- Maximum concentrations in the population

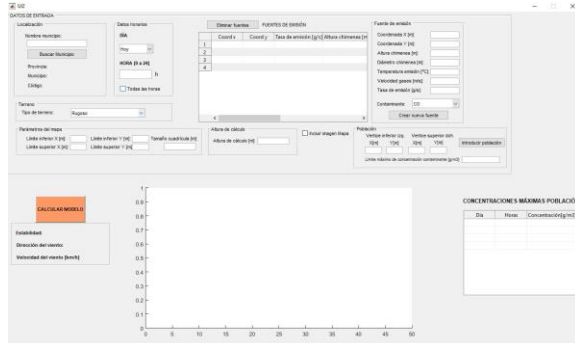


Figure 3. User Interface of the program

V. RESULTS

The results of the project are divided into two groups: the validation results and the program execution

A. Validation results

The first validation test was to validate the atmospheric dispersion model used in the program. The validation set was from the Kincaid study carried out by the EPA measuring the concentrations of SO_2 . The study includes a set of observed concentrations over several days with different weather conditions from 28 measuring stations distributed along the site. The results from the validation dataset and the results from the model used in the program were compared. Instead of using the values of the concentration directly, RHC (*robust highest concentration*) were used, which is a

statistical value of concentration that takes into account the variability, average and maximum concentration of the observed concentrations in an averaging period.

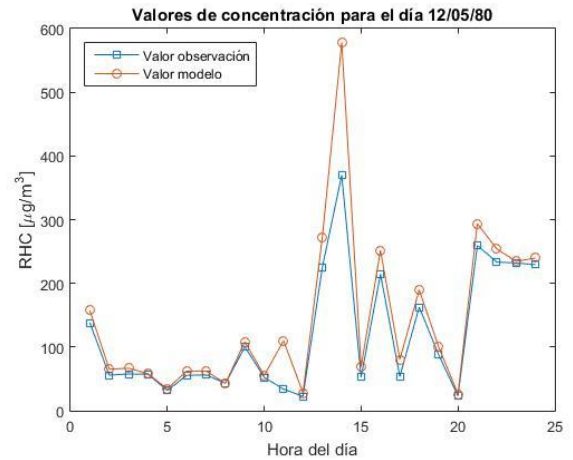


Figure 4. Comparison of RHC observed values and those calculated by the model in a day

As shown in Figure 4, the model used in the project fits quite well the real concentration values. The model tends to overestimate the concentration in most of the cases, which is positive because the objective of the program is compare the concentrations values in the population with the maximum concentration limit.

The statistical results of the error of the model are summarized in Table 1:

Relative error	$\left \frac{RHC_{observado} - RHC_{modelo}}{RHC_{observado}} \right $
Mean	34,7239%
Standard deviation (σ)	47,8688%
Maximum relative error	845,1617%

Table 1. Statistics of the error of the model

The second validation test has been carried out to compare the results of the software developed in this project with the results of the ISC3 program, perfectly validated and tested by EPA, under the same climatological and emission source conditions. Table 2 shows that the estimation of the concentration of the pollutant in both cases are practically identical; the differences are caused by small variations in the internal parameters of the model, as the σ_y and σ_z or the height of the plume (H) because the equations are slightly different in each model.

x [km]	Valores de ISC3				Valores del programa desarrollado			
	Conc. [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	σ_y	σ_z	H[m]	Conc. [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	σ_y	σ_z	H[m]
0,4	0	67,683	40	299,534	0	68,2071	41,8017	236,6834
0,8	1,062	126,213	85,566	299,534	0,3226	128,4586	86,4075	333,0155
1,2	17,519	181,384	133,503	299,534	10,6001	185,2387	132,9398	333,0155
1,6	32,118	234,391	183,046	299,534	25,5066	239,7124	180,9608	333,0155
2	34,628	285,798	233,819	299,534	31,3873	292,4537	230,2193	333,0155
2,4	31,612	335,935	285,595	299,534	30,8338	343,8077	280,5484	333,0155
2,8	27,273	385,02	338,218	299,534	27,8095	394,0053	331,8279	333,0155
3,2	23,129	433,206	391,58	299,534	24,2698	443,2121	383,9662	333,0155
3,6	19,583	480,607	445,594	299,534	20,9510	491,5525	436,8910	333,0155
4	16,659	527,313	500,196	299,534	18,0644	539,1238	490,5432	333,0155

Table 2. Comparison between values of ISC3 and the software developed

B. Results of the program

In order to demonstrate the execution of the software, an application test was performed. This test was to calculate the concentration values in the population of Puertollano (Spain) due to the emission of three punctual sources of a nearby industrial area. The results of the program are shown in Figure 5.

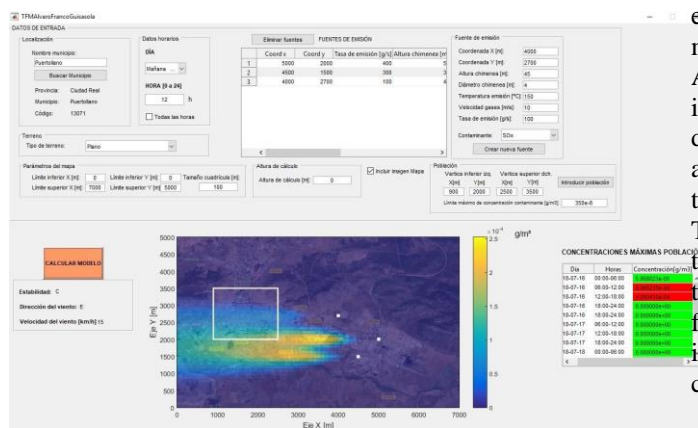


Figure 5. Implementation of the software

VI. CONCLUSIONS

The conclusions of this project are:

- The use of the object-oriented programming in the development of this project has some advantages over traditional programming. The simplicity to abstract the different parts of the program and the relationships that exist between these parts, facilitates reading and understand the program code which allows to solve the problems of the program quickly (maintainability). Dividing the program into small parts (classes) which can be tested and fixed independently (modularity). Add, delete or modify new objects allows faster and easy modifications to the program without changing other parts of the program (modifiability).

- User interface that has been achieved, allows you to enter the input of program data in a simple, structured and intuitive as well as presenting the results in a way that is clear and easy to interpret.
- The error of the model obtained with the validation tests has been quite small, which confirms the selection of the Gaussian dispersion model as the type of model used. Therefore, the error of the model and the program error in the determination of the concentration of contaminant are different concepts. The total error of the program is almost impossible to determine because includes the error in the forecast of meteorological variables which in the end is a matter of chance, the forecast can very accurate or completely wrong. Another error in the prediction is due to the exactitude of the meteorological information: the wind speed is measured at intervals of 5 km/h, the only wind direction can take values Cardinal (N, NO...), etc.
- The error of the model could be improved introducing more input variables of the program, both meteorological and source emission or field, which is a problem since the meteorological variables that are obtained of AEMET are limited and this complicate the input data from the user interface. These decisions have, as in many fields of engineering, a compromise between improve the model and the increasing the complexity of the input data. The Gaussian atmospheric dispersion model is the one that meets better the specifications of the project, as the weather information obtained from the AEMET API along with some simple input data that the user enters used to calculate concentration.

VII. FUTURE DEVELOPMENTS

This project leaves the door open to future developments. The main ones are presented below:

- Improve climate information: one of the possibilities is to use addition weather information from other sources to increase the robustness of the weather forecast. The methods to estimate some of the meteorological variables, such as solar radiation, can be more complex and accurate.
- Include particles in the model: suspended particles are pollutants with a different behavior because they are solid or liquid and have a fall speed modeled by the Stokes equations. Information about the particles should be included as input of the program.

- Effect of complex terrain: include corrections of the model when the terrain presented in the study is complex (variable ground level, slopes...) from empirical equations.
- Incorporate the chemical reactions of the pollutants: Gaussian atmospheric dispersion model has a hypothesis that contaminants do not react with the air, however this hypothesis is incorrect in some conditions. The chemical reactions can be modeled as a disintegration factor that takes into account the decrease of the contaminant.

REFERENCES

- [1] Gobierno de España Ley 26/2007, de 23 de octubre de Responsabilidad medioambiental. *BOE 24/10/2007*.
- [2] Gobierno de España, Real Decreto de aprobación del Reglamento de desarrollo de la Ley 26/2007. *BOE 23/12/2008*.
- [3] Parlamento Europeo y Consejo, Directiva 2008/50/CE.
- [4] Gobierno de España, Real Decreto 815/2013, de 18 de octubre acerca del Reglamento de emisiones industriales. *BOE 19/10/2013*.



ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERÍA ELECTROMECAÁNICA
ESPECIALIDAD ELECTRÓNICA

**Diseño y programación de un software para
prevenir el riesgo de contaminación de una
población por gases contaminantes**

Autor: Álvaro Franco Guisasola
Directora: María del Mar Cledera Castro
Pilar Palomar Herrero

Madrid

Julio 2018



Agradecimientos

A mis directoras de proyecto, por ser una guía y ayuda fundamental

A mis amigos, que han sido una parte importante de mi vida a lo largo de los años

A toda mi familia por ser un pilar de apoyo que me ha permitido llegar hasta aquí, en especial, a mi madre y mi hermano en estos últimos meses.



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

ÍNDICE DE LA MEMORIA



Índice de la memoria

Parte I	Memoria.....	17
Capítulo 1	Introducción	19
1.1	Estado del Arte	21
1.2	Motivación.....	26
1.3	Objetivos.....	27
1.4	Metodología.....	28
1.5	Recursos empleados	29
Capítulo 2	Arquitectura del software	31
2.1	Estructura del programa	31
2.1.1	Datos de entrada (Inputs)	32
2.1.2	Proceso de cálculo del modelo	34
2.1.3	Datos de salida (Outputs)	36
2.2	Diagrama de clases	38
Capítulo 3	Datos de entrada	41
3.1	Introducción.....	42
3.2	Obtención datos climatológicos	44
3.2.1	API REST AEMET	44
3.2.2	Clase Api.....	45
3.2.3	Códigos de error.....	51
3.3	Estabilidad atmosférica.....	52
3.3.1	Marco teórico	53
3.3.2	Estabilidad atmosférica según F. Pasquill	58
3.3.3	Ajuste de los datos climatológicos	60



3.4	Viento.....	64
3.4.1	Velocidad del viento	64
3.4.2	Dirección del viento	66
3.5	Altura efectiva del penacho	67
3.5.1	Ecuaciones de Briggs	70
3.5.2	Problema de discontinuidad	73
3.5.3	Corrección de las ecuaciones de Briggs	74
3.6	Contaminante.....	75
3.7	Altura de mezcla.....	76
3.8	Clase DatosEntrada.....	77
Capítulo 4	Modelo.....	80
4.1	Modelos atmosféricos de Dispersión de Contaminantes	80
4.1.1	Tipos de modelos de dispersión	82
4.2	Modelo de dispersión Gaussiano.....	87
4.2.1	Determinación de las desviaciones normales	91
4.3	Validación del modelo	94
4.3.1	Validación Kincaid	95
4.3.2	Validación con resultados del programa ISC3	98
4.4	Clase Modelo.....	100
Capítulo 5	Interfaz de Usuario.....	103
5.1	Guide de Matlab	104
5.1.1	Manejo de los elementos de una interfaz GUIDE	106
5.2	Interfaz de usuario del programa	107
5.2.1	Datos de entrada (Inputs)	108
5.2.2	Salidas del programa (Outputs).....	116
5.3	Tratamiento de varias fuentes de emisión.....	119
Capítulo 6	Resultados.....	121
6.1	Resultados de Validación.....	121
6.1.1	Resultados del estudio Kincaid	121
6.1.2	Resultados con el programa ISC3	124



6.2	Resultados del programa	126
<i>Capítulo 7</i>	<i>Conclusiones.....</i>	<i>131</i>
<i>Capítulo 8</i>	<i>Futuros desarrollos</i>	<i>133</i>
<i>Capítulo 9</i>	<i>Bibliografía.....</i>	<i>135</i>
<i>Parte II</i>	<i>Presupuesto.....</i>	<i>139</i>
<i>Capítulo 1</i>	<i>Mediciones</i>	<i>141</i>
<i>Capítulo 2</i>	<i>Precio Unitario</i>	<i>142</i>
<i>Capítulo 3</i>	<i>Sumas parciales.....</i>	<i>143</i>
<i>Capítulo 4</i>	<i>Presupuesto General</i>	<i>144</i>



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

ÍNDICE DE LA MEMORIA



Índice de figuras

Figura 1. Programa AERMOD.....	23
Figura 2. Programa CALPUFF	23
Figura 3. Programa DISPER	24
Figura 4. Planificación de las tareas del proyecto	28
Figura 5. Diagrama de los datos de entrada del programa	32
Figura 6. Diagrama del proceso de cálculo del modelo	34
Figura 7. Diagrama de los datos de salida del programa.....	36
Figura 8. Diagrama de clases del programa	38
Figura 9. Diagrama de los datos de entrada	43
Figura 10. Diagrama adiabático seco	54
Figura 11. Gradiente ambiental de temperatura	55
Figura 12. Condiciones inestables.....	55
Figura 13. Condiciones neutrales	56
Figura 14. Condiciones estables.....	57
Figura 15. Efecto del grado de estabilidad atmosférica en las plumas.....	57
Figura 16. Clases de estabilidad Pasquill	59
Figura 17. Gradiente vertical del viento	64
Figura 18. Altura efectiva de la chimenea.....	68
Figura 19. Discontinuidad en la determinación de las concentraciones.....	73
Figura 20. Diagrama lógico para el cálculo de la elevación de la pluma.....	74
Figura 21. Representación del modelo de dispersión gaussiano de una fuente de emisión de altura efectiva H.....	88
Figura 22. Efecto de la reflexión del suelo sobre la dispersión del contaminante	90



Figura 23. Efecto de la altura de mezclado L en la dispersión vertical del contaminante	91
Figura 24. Desviación estándar en el eje y (Fuente: Turner, 1970)	92
Figura 25. Desviación estándar en el eje z (Fuente: Turner, 1970).....	92
Figura 26. Área del estudio de Kincaid	96
Figura 27. Entorno de diseño de GUIDE Matlab	104
Figura 28. Interfaz gráfica de usuario del programa	107
Figura 29. Interfaz: Datos de localización.....	108
Figura 30. Ejecución del programa cuando el municipio es correcto	109
Figura 31. Mensaje de error al introducir un municipio incorrectamente.....	109
Figura 32. Interfaz: Datos horarios.....	110
Figura 33. Interfaz: datos de la fuente de emisión	111
Figura 34. Interfaz: datos del terreno	112
Figura 35. Interfaz: parámetros del mapa.....	113
Figura 36. Configuración de la cuadrícula de puntos (Mapa).....	114
Figura 37. Interfaz: datos de la población	115
Figura 38. Interfaz: mapa de concentraciones.....	116
Figura 39. Interfaz: información meteorológica.....	117
Figura 40. Interfaz: tabla de concentraciones máximas de la población.....	118
Figura 41. Comparación de los valores de RHC observados y del modelo para el día 12 de mayo de 1980 del estudio	123
Figura 42. Comparación de los valores de RHC observados y del modelo para el día 3 de abril de 1980 del estudio.....	123
Figura 43. Mapa de la zona para el cálculo de concentraciones (Puertollano). Fuente: Google Maps	127
Figura 44. Ejecución del programa para el caso de ejemplo.....	130



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

Índice de tablas



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

Índice de tablas



Índice de tablas

Tabla 1. Cuadro comparativo de los modelos presentados en el estado del arte ..	25
Tabla 2. Datos de entrada del modelo y su clasificación	42
Tabla 3. Propiedades y métodos de la clase Api	45
Tabla 4. Propiedades de la clase Api.....	45
Tabla 5. Métodos de la clase Api	47
Tabla 6. Estructura de estaciones	48
Tabla 7. Estructura de la predicción de un municipio	49
Tabla 8. Estructura de la predicción de un día	50
Tabla 9. Períodos horarios de las predicciones	51
Tabla 10. Códigos de error HTTP	52
Tabla 11. Clases de estabilidad atmosférica según Pasquill	58
Tabla 12. Clasificación de las clases de estabilidad de Pasquill en función de variables atmosféricas	60
Tabla 13. Correspondencia de la radiación	61
Tabla 14. Términos meteorológicos para la nubosidad.....	62
Tabla 15. Estados del cielo y nubosidad	63
Tabla 16. Valores del coeficiente n	66
Tabla 17. Direcciones del viento	67
Tabla 18. Contaminantes que son reflejados por el suelo	75
Tabla 19. Criterio de Klug para la determinación de la altura de la capa de mezcla en función de la clase de estabilidad de Pasquill-Gifford	77
Tabla 20. Elementos de la clase DatosEntrada.....	77
Tabla 21. Propiedades de la clase DatosEntrada	78



Tabla 22. Métodos de la clase DatosEntrada	79
Tabla 23. Valores de I, J, K para σ_y en función de la clase de estabilidad.....	93
Tabla 24. Valores de I, J, K para σ_z en función de la clase de estabilidad.....	94
Tabla 25. Campos de las emisiones del set de validación.....	96
Tabla 26. Formato de la información meteorológica ISC3	97
Tabla 27. Ubicaciones de las estaciones de medición del estudio	98
Tabla 28. Inputs utilizados en la validación tanto para el ISC3 como el programa desarrollado	99
Tabla 29. Elementos de la clase Modelo.....	100
Tabla 30. Métodos de la clase Modelo.....	101
Tabla 31. Componentes de GUIDE.....	105
Tabla 32. Características de la fuente.....	111
Tabla 33. Estructura de los archivos de resultados	119
Tabla 34. Medidas estadísticas del error del modelo frente a los valores reales observados	124
Tabla 35. Comparación entre los valores del programa ISC3 y los del programa desarrollado	125
Tabla 36. Datos de entrada de las fuentes de emisión.....	128
Tabla 37. Concentraciones máximas en la población para el caso ejemplo.....	130
Tabla 39: Mediciones de las herramientas y software	141
Tabla 40: Mediciones de la mano de obra.....	141
Tabla 42: Precio unitario de las herramientas y el software.....	142
Tabla 43: Precio por hora de mano de obra.....	142
Tabla 45: Coste total de las herramientas y software	143
Tabla 46: Coste total de mano de obra directa	143
Tabla 47: Presupuesto general.....	144



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

Índice de tablas



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

Índice de tablas



Índice de ecuaciones

Ecuación 1. Corrección de la velocidad del viento	65
Ecuación 2. Correlación de Carson y Moses para determinar la elevación de la pluma	68
Ecuación 3. Determinación de la tasa de emisión de calor de una chimenea	69
Ecuación 4. Correlación de Thomas, Carpenter y Colbaugh para la determinación de la elevación de la pluma	69
Ecuación 5. Parámetro de flujo de flotación	70
Ecuación 6. Ecuaciones de Briggs en condiciones neutrales o inestables	71
Ecuación 7. Distancia hasta el punto de máxima elevación de la pluma	72
Ecuación 8. Ecuación de Briggs en condiciones estables	72
Ecuación 9. Parámetro estabilidad	72
Ecuación 10. Ecuación completa del modelo de dispersión gaussiano.....	88
Ecuación 11. Término de la dispersión horizontal a lo largo del eje y	89
Ecuación 12. Término de la dispersión vertical cuando el contaminante no es reflejado.....	89
Ecuación 13. Término de dispersión vertical adicional cuando se considera la reflexión del contaminante por el suelo	90
Ecuación 14. Término de dispersión vertical por efecto de la altura de la capa de mezcla.....	90



Ecuación 15. Cálculo de la desviación estándar por McMullen	93
Ecuación 16. Cálculo del estadístico RHC.....	122



Parte I MEMORIA



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

Memoria



Capítulo 1 INTRODUCCIÓN

Desde que la Revolución Industrial inició en el siglo XVIII, los procesos de producción de las fábricas, el desarrollo del transporte y el uso de los combustibles han incrementado la concentración de diferentes contaminantes atmosféricos (CO₂, NO_x, SO_x, partículas,...) exponencialmente. Estas sustancias contaminantes provocan un efecto sobre la salud de las personas, problemas en el sistema respiratorio y cardíacos principalmente, así como un efecto sobre el medio ambiente como es el efecto invernadero o la destrucción de la capa de ozono. En los últimos años se ha comenzado a legislar a este respecto con el fin de frenar estos efectos; Europa es pionera a este respecto pues desde 2001 empezó a legislar acerca de techos nacionales de emisión de contaminantes atmosféricos con el fin de conseguir a largo plazo proteger la salud humana y el medio ambiente.

Con la ley 26/2007, de 23 de octubre, de Responsabilidad Medioambiental [1] por medio de la cual se incorpora al ordenamiento jurídico la normativa europea del Parlamento Europeo del 21 de abril de 2004 sobre la responsabilidad medioambiental con la prevención y reparación de daños medioambientales. Esta ley promueve que los operadores que ocasionen daños al medio ambiente o amenacen con ocasionarlo deben adaptar las medidas necesarias para prevenir su causa, o en caso de que se produzca el daño, repararlo. Posteriormente con el Real Decreto 2090/2008 [2], se obliga a realizar un análisis de riesgo medioambiental que puede causar cualquier instalación, analizando el valor económico del daño potencial que pueden provocar.



En adición a estas leyes, existe la normativa acerca de la calidad del aire que establece las concentraciones máximas de cada contaminante en el ambiente que se recoge en la Directiva 2008/50/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 21 de mayo de 2008 [3] teniendo en cuenta las directrices de la OMS (Organización Mundial de la Salud) así como la normativa acerca de las emisiones industriales que se pueden emitir de cada contaminante (concentraciones) que se recoge en el Real Decreto 815/2013, de 18 de octubre, acerca del Reglamento de emisiones industriales [4].

Dentro de este marco legal, se sitúa el ámbito de este proyecto que consiste en desarrollar un programa que permita estimar la contaminación que produce una incineradora sobre una población, de tal forma que se respete toda la normativa acerca de la calidad del aire expuesta. El programa permitirá evaluar si alguno de los contaminantes sobrepasa el valor establecido dentro de la normativa, tomando así las decisiones que se consideren para reducir los valores de dicha concentración de contaminante hasta cumplir los valores máximos establecidos.



1.1 ESTADO DEL ARTE

En este apartado, se expondrán los diferentes modelos de dispersión atmosférica. En la actualidad existen una gran cantidad de modelos que permiten simular la el efecto de diferentes contaminantes en el aire (contaminación atmosférica) de diferente tipología. Estos modelos se dividen principalmente en dos categorías: modelos analíticos y modelos numéricos [5].

Los modelos analíticos son los modelos más sencillos. Estos modelos se utilizan para las primeras aproximaciones al problema. Se basan en ecuaciones simples, lo que permite una obtención de resultados rápida. Permiten simulaciones en una dimensión (1D) o dos dimensiones (2D). Estos modelos son sencillos de emplear y no requieren datos de entrada excesivamente complejos pero esto provoca que las hipótesis de partida de estos modelos sean muy simplificadas (medios homogéneos, estacionario,...) y no funcionen correctamente cuando estas hipótesis no se cumplen.

Los modelos numéricos requieren de datos de entrada más complejos en cuanto a su facilidad de obtención o a su procesamiento. Estos modelos se basan en ecuaciones más complejos y requieren de métodos numéricos para la obtención de resultados. Estos modelos permiten simulaciones en tres dimensiones (3D) y son modelos que contemplan variaciones espaciales y temporales, por lo que son mucho más complicados de diseñar e implementar. Estos modelos dan resultados más ajustados a la realidad que los modelos analíticos pero requieren de un amplio conocimiento de los sistemas simulados (climatología, dinámicas de terreno,...)



A continuación se presentan diferentes programas que utilizan modelos de dispersión atmosférica que existen en la actualidad [6]:

- **SCREEN 3**. Es un programa desarrollado por la USEPA (United States Environmental Protection Agency) que utiliza un modelo analítico de dispersión atmosférica sencillo recomendado para el análisis de emisiones para proyectos en su fase inicial de diseño.

- **ALOHA**. Es un programa desarrollado por la USEPA y NOAA que utiliza un modelo analítico diseñado para estimar las zonas de riesgo asociadas a la emisión de compuestos contaminantes. Calcula la dispersión de una nube de gas basándose en las características físicas y niveles de referencia de cada compuesto en las condiciones atmosféricas en las que se produce la emisión.

- **AERMOD** (Figura 1) Es un programa desarrollado por la USEPA basado en un modelo numérico de penacho gaussiano en estado estacionario que incorpora la dispersión basada en la estructura de la capa límite incluyendo tratamientos de fuentes de área, de volumen y puntuales (chimeneas) y terrenos complejos y simples. Permite además modelar efectos dinámicos provocados por variaciones de las condiciones atmosféricas, con un modelo adicional denominado AERMET y los diferentes elementos en las inmediaciones de las fuentes como edificios.

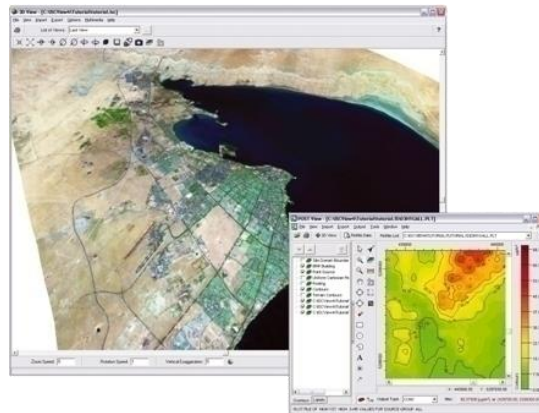


Figura 1. Programa AERMOD

- **CALPUFF** (Figura 2) Es un programa desarrollado por la USEPA basado en un modelo numérico lagrangiano de nubes aisladas y simula el efecto de las condiciones meteorológicas variante en el tiempo y espacio sobre el transporte, transformación química y eliminación de los contaminantes. La escala de aplicación va desde decenas hasta centenas de kilómetros.

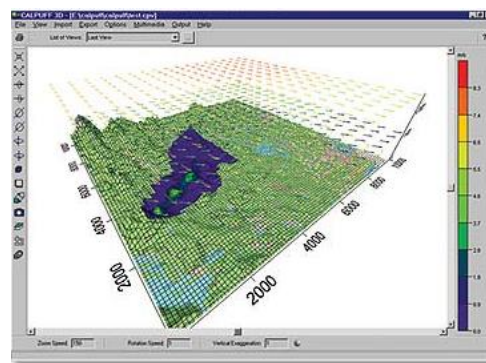


Figura 2. Programa CALPUFF

- **PHAST**. Es un programa desarrollado por DNV (Det Norske Veritas) basado en un modelo numérico para el análisis de peligros. Calcula la descarga inicial, la dispersión del contaminante y los efectos posteriores.



- **DISPER.** Es un programa desarrollado por Canarina Software Ambiental basado en un modelo numérico que permite evaluar la dispersión de diferentes contaminantes basándose en el modelo ISCST (Industrial Source Complex Short Term Model) de la EPA.

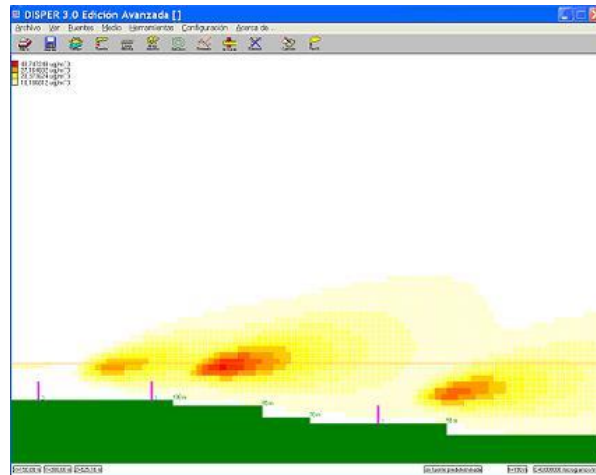


Figura 3. Programa DISPER

Una comparación de los diferentes programas que se presentan, especificando sus capacidades, tipo, ventajas e inconvenientes y el uso que habitualmente se les da se presenta en la Tabla 1.



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

<i>Programa</i>	<i>Tipo de modelo</i>		<i>Ventajas</i>	<i>Inconvenientes</i>	<i>Aplicación</i>
Screen 3	Análítico	Gaussiano	-Sencillez de uso y rapidez -Conservador (simula las peores condiciones) -Gratuito	-No permite introducir varias fuentes de emisión -Limitaciones en terrenos complejos -No tiene en cuenta las reacciones químicas ni los procesos de decaimiento	Análisis sencillo de las emisiones Fases iniciales de proyectos
Aloha	Análítico	Gaussiano	-Diferentes fuentes de emisión -Modelización de edificios -Parámetros meteorológicos y del terreno sencillos	-Resultados poco precisos cuando las condiciones de mezcla son bajas -Límite de 10 km y una hora	Estimar zonas de riesgo provocadas por la emisión de compuestos contaminantes
AERMOD	Numérico	Gaussiano	-Permite el tratamiento de todo tipo de fuentes: área, volumen y puntuales -Se pueden introducir desde parámetros sencillos del terreno hasta tan complejos que requieran de un módulo adicional (AERMAP) -Considera condiciones meteorológicas complejas con el módulo AERMET.	-Elevada complejidad -Requiere de experiencia para su uso -Los cálculos del modelo pueden durar horas o incluso días ante datos de entrada complejos -No considera las reacciones químicas de los contaminantes	Estimar las concentraciones del contaminante con gran exactitud cuando se dispone de información meteorológica y del terreno detallada
CALPUFF	Numérico	Lagrangiano	-Las condiciones meteorológicas pueden ser variables en espacio y tiempo -No estacionario -Escala de decenas de cientos de kilómetros.	-Elevada complejidad -Requiere de un gran número de datos de entrada del modelo -Tiempos de ejecución del programa elevados	Cuando las distancias de transporte del contaminante son largas en condiciones meteorológicas cambiantes
PHAST	Numérico	Euleriano	-Gran cantidad de sustancias contaminantes en una base de datos -Modeliza la mezcla de compuestos -Modela otros parámetros: inflamabilidad, toxicidad,...	-Licencia de pago -Conocimientos avanzados para su utilización -Gran cantidad de datos de entrada (150) -No modela emisiones de partículas a la atmósfera	Emisiones contaminantes de corta duración provocadas por accidentes (análisis de riesgos)
DISPER	Numérico	Gaussiano	-Sencillez de uso y rapidez -Visualización de los resultados de forma gráfica con diferentes opciones -Permite introducir varias fuentes de emisión	-No tiene en cuenta las reacciones químicas ni los procesos de decaimiento -Los datos de entrada del modelo son demasiado simplificados	Análisis de las emisiones de una o varias fuentes de emisión puntuales

Tabla 1. Cuadro comparativo de los modelos presentados en el estado del arte



1.2 MOTIVACIÓN

Este proyecto consiste en desarrollar un programa basado en un modelo de dispersión atmosférica que permita estimar los efectos de la contaminación de una planta incineradora de residuos sobre una población cercana.

Como ya se ha expuesto en la sección de estado del arte, existen diferentes programas que permiten la simulación de este escenario pero no son software libre, requiriendo el uso de licencias de uso con un elevado precio, por lo que se ha optado por desarrollar un modelo específico para este caso con Matlab.

Este software permitirá simular no sólo el caso de uno los contaminantes como es el caso de los programas ya existentes, sino realizar simulaciones de los diferentes contaminantes producidos por la fuente de emisión.

El programa también obtendrá los datos de entrada meteorológicos directamente de AEMET por lo que no será necesario introducir los datos de entrada manualmente en el programa como se realiza en todos los programas existentes sino que se obtendrán directamente de la API de AEMET.



1.3 OBJETIVOS

Los objetivos del proyecto son:

- Seleccionar el modelo de dispersión más adecuado para las características de este proyecto para lo que será necesario comparar los diferentes modelos de dispersión atmosférica que se pueden utilizar, con sus ventajas e inconvenientes.
- Identificar las variables de entrada del modelo, para seleccionar de donde obtener estas variables de entrada (estructura de datos obtenidas de la API, especificadas por el usuario, ...)
- Diseño y programación de un software basado en el modelo de dispersión seleccionado, con el fin de controlar la contaminación producida por la incineradora.
- Validación del modelo programado, realizando diversas pruebas de validación para comprobar que el modelo utilizado se ajusta a la realidad, el software está correctamente programado y comparar los resultados con los que obtiene en las mismas condiciones otro programa perfectamente validado.
- Desarrollo de una interfaz de usuario para el software que permita la visualización de la información y cambiar diferentes parámetros del modelo, buscando un manejo intuitivo y sencillo.



1.4 METODOLOGÍA

Para llegar a la consecución de los objetivos propuestos, se definen una serie de tareas que se planifican de acuerdo a la Figura 4. Estas tareas se subdividen principalmente en cuatro etapas: una primera etapa de documentación acerca de los elementos que componen el proyecto como son las fuentes de emisión del contaminante, los tipos de contaminante y los modelos de dispersión atmosférica, una segunda en la que se realizará una comparativa de los diferentes modelos que se pueden utilizar en el software y entre estos seleccionar el modelo que se va a utilizar, una tercera etapa del desarrollo del software y en último lugar una comparativa de los resultados del modelo con otras alternativas que proponen otros modelos y otras pruebas de validación.

Tareas	Oct	Nov	Dic	Ene	Feb	Mar	Abril	Mayo	Jun	Jul
Documentación acerca de las fuentes de emisión y los contaminantes										
Documentación acerca de los modelos de dispersión atmosférica										
Selección del modelo de dispersión										
Diseño del programa										
Obtención de las variables de entrada del programa (meteorológicas, contaminantes, ...)										
Implementación del modelo en el programa										
Optimización del modelo										
Desarrollo de la interfaz de usuario										
Pruebas del software (validación)										
Comparación de los resultados con otros modelos										
Redacción de la memoria										

Figura 4. Planificación de las tareas del proyecto



1.5 RECURSOS EMPLEADOS

Los recursos fundamentales que se utilizaron en desarrollo de este proyecto fueron las siguientes:

- Matlab/Simulink versión 2015a/2017a: esta herramienta se utilizó para el desarrollo del software y de la interfaz de usuario del programa.

- Normativa: toda la normativa acerca de la calidad de aire y de las emisiones de contaminantes.

- Documentación: toda la documentación recopilada acerca de los diferentes modelos de dispersión atmosférica, de la estimación de parámetros meteorológicos,...

- Información meteorológica: predicciones y lecturas meteorológicas para utilizar en el modelo de dispersión, obtenidos de la Agencia Española de Meteorología (AEMET) a través de su API.



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL



Capítulo 2 ARQUITECTURA DEL SOFTWARE

Este capítulo presenta la arquitectura del software que se ha desarrollado en este proyecto. La arquitectura del software se define como el nivel de diseño que hace foco a aspectos más allá de los algoritmos y las estructuras de datos, como son el diseño y especificación de la estructura global del sistema [7]. La estructura general del sistema se especifica en la sección 2.1, donde se muestra como se manejan los datos de entrada (*inputs*), los cálculos del modelo y los datos de salida (*outputs*). La programación que se ha seguido para desarrollar el software ha sido una programación orientada a objetos, por lo que es necesario mostrar las clases que componen el programa, y su estructura, recogido en la sección 2.2 de este capítulo.

2.1 ESTRUCTURA DEL PROGRAMA

La estructura general del programa tiene unas partes diferenciadas. En primer lugar estaría la parte del programa encargada de los datos de entrada (*inputs*) (Figura 5), que se encarga de obtener estos datos, procesarlos hasta obtener los datos de tal forma que puedan ser utilizados por el modelo de dispersión atmosférica y en último lugar estructurarlos en una clase de *DatosEntrada*. Luego estaría el proceso de cálculo del modelo (Figura 6), un proceso iterativo que calcula las concentraciones del contaminante para cada punto definido (distribuidos en el espacio y el tiempo), utilizando un modelo de dispersión atmosférica a partir de los datos de entrada del modelo. En último lugar, una vez se han obtenidos los resultados del modelo, éstos resultados se tienen que procesar para obtener unos datos de salida (*outputs*) que se muestren al usuario a través de la interfaz de usuario (Figura 7).

2.1.1 DATOS DE ENTRADA (INPUTS)

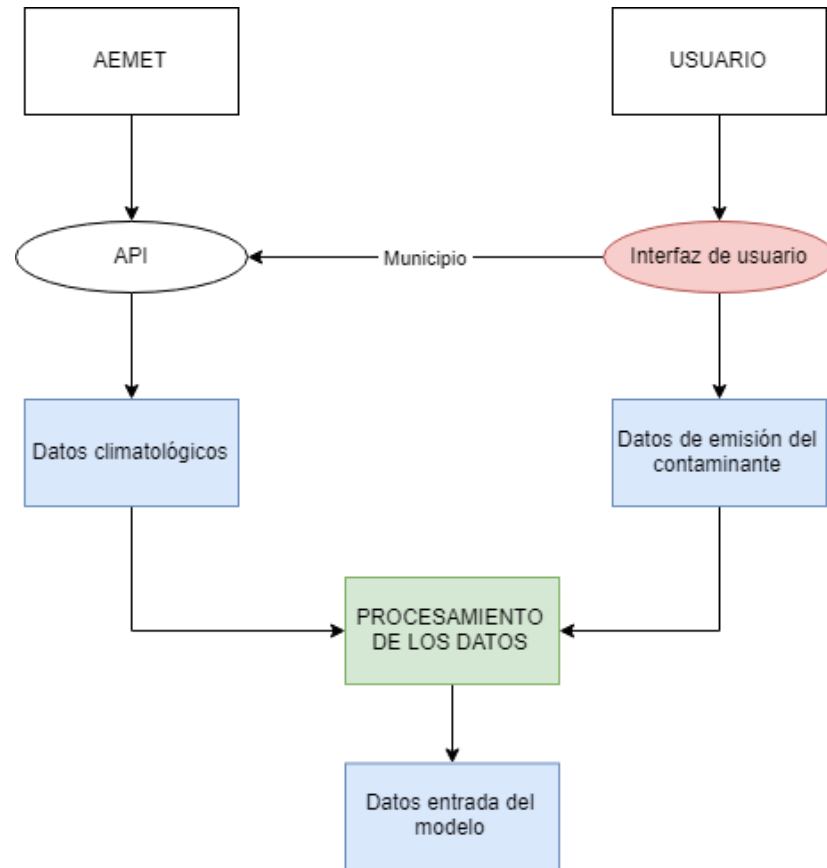


Figura 5. Diagrama de los datos de entrada del programa

Como se muestra en la Figura 5, el flujo de los datos de entrada del programa sigue el siguiente proceso:

- Los datos climatológicos, se obtienen de la Agencia Estatal de Meteorología (AEMET) a través de su API web. Para obtener una parte de estos datos climatológicos de la API es necesario introducir el municipio para el que se desea obtener la predicción meteorológica, que es un dato introducido por el usuario a través de la interfaz de usuario. Los datos climatológicos que se obtienen de la API de AEMET son la predicción meteorológica de los siguientes tres días al día en el que se hace la consulta (datos de temperatura,



nubosidad, viento,...) y los valores climatológicos de la estación entre los que está la radiación solar.

- El usuario, por medio de la interfaz de usuario también desarrollada en este proyecto, introduce de forma sencilla e intuitiva los datos de las fuentes de emisión del contaminante (altura de la chimenea, diámetro de la chimenea, posición de la fuente de emisión, velocidad de los gases de emisión, temperatura de los gases de emisión, la tasa de emisión y el tipo de contaminante) así como otros datos de entrada necesarios para poder calcular el modelo como son el tipo de terreno, el municipio, los parámetros del mapa, la población, el límite máximo de contaminante permitido o la altura de cálculo.
- Una vez se han obtenido tanto los datos climatológicos de AEMET como los datos especificados por el usuario a través de la interfaz de usuario, estos datos tienen que ser procesados hasta obtener los datos de entrada que utiliza el modelo de dispersión gaussiano (Capítulo 3).
- Los datos de entrada del modelo, una vez se han procesado, se instancian dentro la clase *DatosEntrada*.

2.1.2 PROCESO DE CÁLCULO DEL MODELO

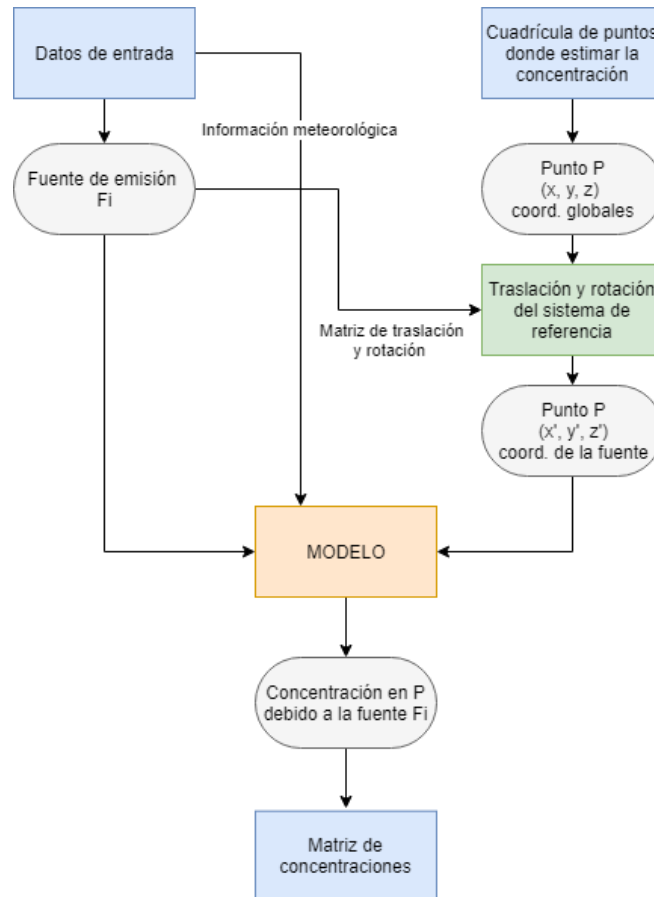


Figura 6. Diagrama del proceso de cálculo del modelo

El proceso de cálculo de concentraciones con el modelo de dispersión atmosférica es iterativo. En cada iteración se calcula la concentración del contaminante para un punto del espacio P (uno de los puntos de la cuadrícula de puntos donde se tiene que estimar la concentración del contaminante) que se produce por las emisiones de una fuente F_i (una de las fuentes de emisión del contaminante). El punto P del espacio tiene coordenadas en sistema de referencia global (común a todas las fuentes de emisión) (x, y, z) ; pero estas coordenadas no están en el sistema de referencia que utiliza el modelo de dispersión, que es un sistema de referencia



relativo a cada fuente de emisión y a la dirección del viento por lo que es necesario obtener las coordenadas del punto P en coordenadas de la fuente de emisión. Con este fin, se realiza una traslación y rotación del sistema de referencia, utilizando matrices de translación y rotación, hasta obtener las coordenadas del punto P en coordenadas relativas a la fuente (x', y', z') .

Utilizando las coordenadas (x', y', z') , la información relativa a la fuente de emisión F_i y la información climatológica, se determina la concentración del punto P. Este valor de concentración se va estructurando en una matriz de concentraciones en la que cada columna representa la concentración del contaminante provocada por la fuente F_i .



2.1.3 DATOS DE SALIDA (OUTPUTS)

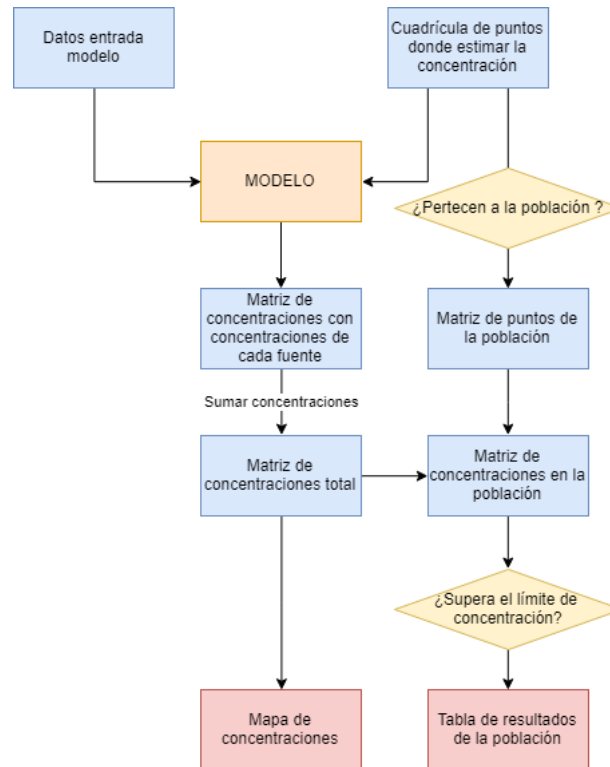


Figura 7. Diagrama de los datos de salida del programa

Siguiendo el diagrama mostrado en la Figura 7, hasta obtenerse los datos de salida del programa se sigue este proceso:

- Los resultados del modelo de dispersión se almacenan en una matriz de concentraciones en que cada columna representa la concentración que aporta cada fuente de emisión, por lo que el primer paso, es sumar todas las concentraciones que producen cada una de las fuentes en cada punto para obtener una matriz con las concentraciones totales en cada punto.



- Por otro lado, de entre todos los puntos en los que se ha calculado la concentración con el modelo, algunos están dentro de los límites de la población (Matriz de puntos de la población) por lo que cruzando por un lado los datos de la Matriz de concentraciones total con los datos de la Matriz de puntos de la población, resulta la Matriz de concentraciones de la población.
- Una vez se tienen los valores de las concentraciones en cada punto de la población, se obtiene el valor máximo de concentración del contaminante en la población y se compara con el dato de entrada del programa de valor límite de concentración de contaminante para determinar si se supera o no dicho límite. Los resultados de las concentraciones máximas de la población así como si se ha superado o no el límite de concentraciones establecido se muestran a través de la interfaz de usuario en formato de tabla (Tabla de resultados de la población).
- La matriz de concentraciones totales, se muestra a través de la interfaz de usuario en formato de gráfico (Mapa de concentraciones) en el que cada píxel del gráfico tiene un color en función del valor de concentración de esa cuadrícula. En este gráfico se incluyen también las fuentes de emisión del contaminante y la población.

2.2 DIAGRAMA DE CLASES

Un diagrama de clases dentro del Lenguaje Unificado de Modelo (UML) es un tipo de estructura estática que describe la estructura de un sistema mostrando las clases que componen dicho sistema, sus atributos, sus operaciones (o métodos) y las relaciones que existen entre los objetos [8]. El diagrama de clases del programa es el de la Figura 8.

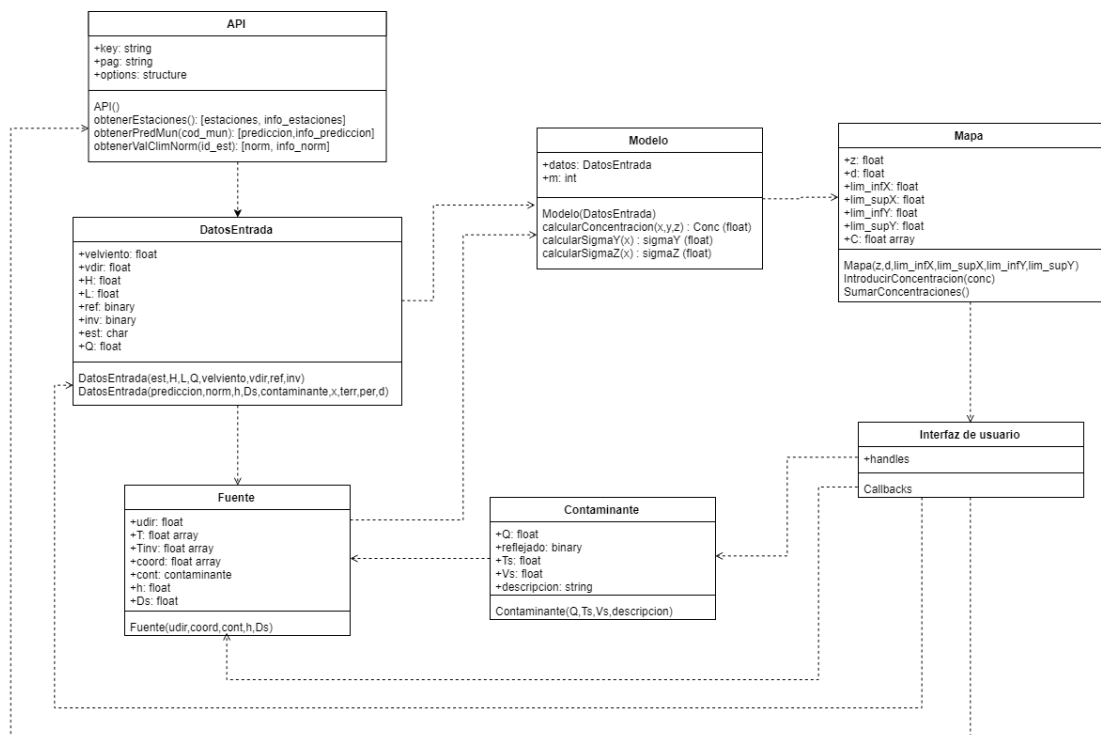


Figura 8. Diagrama de clases del programa

Las clases del programa se van exponiendo a lo largo del documento:

- La clase API en la sección 3.2.2.
- La clase DatosEntrada en la sección 3.8.
- La clase Modelo en la sección 4.4.
- La clase Fuente y Contaminante en la sección 5.3.
- La clase Interfaz de usuario en la sección 5.1.



- La clase Mapa contiene los datos relativos al mapa de concentraciones, teniendo como atributos los límites del mapa, la altura de cálculo, el tamaño de la cuadrícula y la matriz de concentraciones.



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL



Capítulo 3 DATOS DE ENTRADA

En este capítulo se exponen los datos de entrada (inputs) del modelo que se utilizan a la hora de calcular la concentración de contaminante. Estos datos son principalmente datos climatológicos, que se obtienen de la Agencia Estatal de Meteorología (AEMET) a través de su API como se explica en la sección 3.2. Cada uno de los datos de entrada del modelo se detalla en las subsiguientes secciones:

- Estabilidad atmosférica (3.3)
- Viento (3.4)
- Altura efectiva del penacho (3.5)
- Contaminante (3.6)
- Altura de mezcla (3.7)

Finalmente, en el último apartado 3.8 se explica la clase *DatosEntrada* puesto que la programación del software se estructura como una programación orientada a objetos. En esta clase se recoge todos los inputs que se introducen en el modelo de contaminación atmosférica.



3.1 INTRODUCCIÓN

El modelo de contaminación atmosférica utiliza una serie de datos de entrada para poder calcular la concentración del contaminante. Estos datos de entrada o inputs del modelo se dividen en dos categorías: los datos climatológicos y los datos de las fuentes de emisión de contaminante. En este proyecto, los datos climatológicos se descargan de forma automática de la API de AEMET (Agencia Estatal de Meteorología) mientras que los datos de las fuentes de emisión del contaminante son especificados, de forma manual, por el usuario a través de la interfaz.

Los datos de entrada del modelo se especifican en la Tabla 2, clasificándose entre datos climatológicos o datos de la emisión de contaminante.

<i>Dato de entrada / Input</i>	<i>Tipo de dato de entrada</i>	<i>Explicación</i>
Velocidad del viento	Climatológico	Es la velocidad horizontal del viento a lo largo de la línea de pluma en [m/s]
Dirección del viento	Climatológico	Es la dirección del viento en grados respecto la dirección norte
Altura efectiva del penacho	Climatológico/Contaminante	Es la altura efectiva del penacho a partir de la que se desarrolla medida en [m] desde el nivel del suelo
Altura de mezcla	Climatológico	Altura desde el nivel del suelo hasta la altura de mezcla en [m]
Reflejado	Contaminante	Valor binario que vale 1 si el contaminante se considera reflejado por el suelo, en caso contrario 0
Inversión	Climatológico	Valor binario que vale 1 si se tiene en cuenta la altura de mezcla en el modelo
Estabilidad	Climatológico	Clasificación de la estabilidad atmosférica de F. Pasquill (A,B,C,D,E o F)
Tasa de emisión	Contaminante	Flujo másico de emisión del contaminante a través de la fuente en [g/s]

Tabla 2. Datos de entrada del modelo y su clasificación

Los datos de entrada del modelo, y los datos de entrada al programa que por un lado se extraen de AEMET (climatológicos) o son especificados por el usuario a través de la interfaz (contaminante) no coinciden puesto que es necesario procesar los datos de entrada del programa para que puedan ser introducidos al modelo. Algunos ejemplos de esto son la estabilidad atmosférica, que es un parámetro de entrada del modelo, pero no es posible obtenerla directamente de las variables meteorológicas que proporciona AEMET, sino que es necesario procesar la información de estas variables meteorológicas para determinar la clase de estabilidad atmosférica; o bien determinar si el contaminante es reflejado o no, puesto que el usuario a través de la interfaz únicamente especifica el tipo de contaminante de la fuente de emisión (NO_x , CO ,...).

Por tanto los datos meteorológicos que se obtienen de la API de AEMET, así como los datos especificados por el usuario tiene que ser procesados para determinar los datos de entrada del modelo. El proceso general que siguen los datos de entrada se resume en la Figura 9, y se detalla en las siguientes secciones de este capítulo.

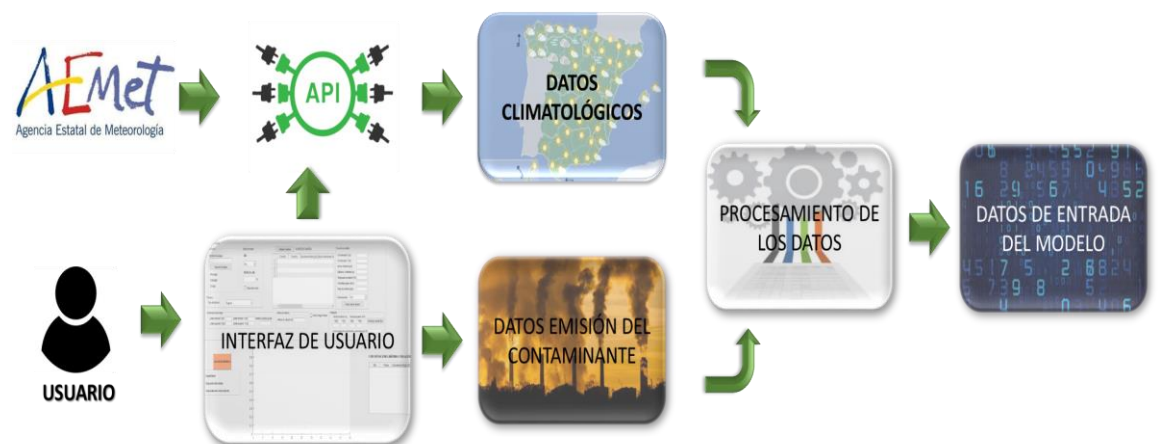


Figura 9. Diagrama de los datos de entrada



3.2 OBTENCIÓN DATOS CLIMATOLÓGICOS

Los datos meteorológicos que utiliza el software provienen de la Agencia Estatal de Meteorología (AEMET) que es el organismo nacional encargado de la prestación de los servicios meteorológicos. De entre todos los datos y servicios meteorológicos que se ofrecen, los utilizados en este proyecto se pueden obtener de manera gratuita de acuerdo al Anexo II de la resolución de 30 de diciembre de 2016 de AEMET recogida en el BOE nº4 de 5 de enero de 2016 [9], en concreto Valores normales de climatología (código 4142) y Predicción por municipios. Tiempo actual (código 5431).

La información meteorológica se obtiene a través de AEMET OpenData que es un API REST (Application Programming Interface REpresentational State Transfer).

3.2.1 API REST AEMET

Una API (del inglés: *Application Programming Interface*) es un conjunto de subrutinas, funciones y procedimientos que ofrece un ente (en este caso, AEMET) para ser utilizado por un software de un tercero para la obtención de datos, información, documentos,... [10]

En concreto, la API de AEMET, es una API REST que consiste en una API basada en el estándar HTTP (*HyperText Transfer Protocol*, el protocolo de comunicación que permite las transferencias de información a través de internet/web), de tal forma que permite hacer uso de un servicio web dentro de una aplicación distinta, en este caso, del programa desarrollado. Para acceder a la API de AEMET es necesario de una API Key, que sirve de identificador para contabilizar e imputar los accesos que realiza un usuario a la API.



3.2.2 CLASE API

La programación de las comunicaciones que realiza el software con la API de AEMET puesto que se trata de una programación orientada a objetos, se realiza dentro de la clase *Api*. Los componentes de la clase *Api* se muestran en la Tabla 3.

<i>Clase</i>	<i>Api</i>
<i>Propiedades</i>	key pag options
<i>Métodos</i>	obtenerEstaciones obtenerPredMun obtenerValClimNorm

Tabla 3. Propiedades y métodos de la clase *Api*

Las propiedades de la clase se detallan en la Tabla 4.

<i>Propiedad</i>	<i>Explicación</i>	<i>Valor</i>
key	Es la API key con la que se establece la conexión con AEMET	<code>/?api_key=[valores de la API key]</code>
pag	URL de la OpenData de AEMET, con la que empiezan todas las peticiones de datos a la API	<code>https://opendata.aemet.es/opendata/api/</code>
options	Especifica los parámetros de RESTful webservice de Matlab	<code>weboptions('ContentType','json','Timeout',60)</code>

Tabla 4. Propiedades de la clase *Api*



La función de Matlab que se utiliza dentro la clase para poder leer datos de la API es 'webread' [11] que permite leer contenido de servicios web RESTful, como es el caso de esta API REST, especificado por el input de la función 'url'. Esta función tiene unas opciones por defecto dentro de 'weboptions' [12] que no son las correctas para acceder a la API de AEMET. En concreto, las opciones de 'Timeout' y 'ContentType' tienen que modificarse para el correcto funcionamiento del programa.

La opción de 'Timeout' permite especificar la duración del tiempo de espera de la conexión de la solicitud hecha a través de la función como un valor entero positivo; el valor por defecto es de 5 segundos pero éste no es suficiente para realizar la solicitud a la API de AEMET por lo que se tiene que especificar un tiempo mayor, en concreto, 60 segundos que sí que permiten la conexión con la API.

La otra opción que es necesario modificar es la de 'ContentType' que indica el tipo de contenido del output de la función al que se convierte la respuesta del servidor; el valor que tiene por defecto es 'auto' que no especifica ningún tipo de contenido lo que provoca que la respuesta del servidor sea una cadena de caracteres (string) lo que hace inviable el procesamiento de los datos por lo que es necesario especificar que este campo en la petición al servidor sea del tipo 'json' que es un formato de texto ligero para el intercambio de datos utilizado por JavaScript que permite que las respuestas de la API de AEMET sean estructuras de datos en lugar de cadenas de caracteres lo que hace viable su procesamiento.

Los métodos de la clase *Api*, especificando cuales son los inputs y los outputs de dichos métodos así como su función se muestran en la Tabla 5.



<i>Método</i>	<i>Descripción</i>	<i>Input</i>	<i>Output</i>
obtenerEstaciones	Obtiene un listado con todas las estaciones meteorológicas de AEMET así como sus identificadores (ID)	-	Estructura de estaciones Estructura de información de estaciones
obtenerPredMun	Obtiene la predicción meteorológica de un municipio de los 3 siguientes días	Código de municipio	Estructura de predicción Estructura de información de la predicción
obtenerValClimNorm	Obtiene los valores climatológicos normales históricos de una estación entre los años 1981-2010	ID de estación	Estructura de los valores normales Estructura de la información de los valores normales

Tabla 5. Métodos de la clase Api

El input del método `obtenerPredMun` es el código del municipio del que se quiere obtener la predicción meteorológica. Este código de municipio (compuesto por dos dígitos que se corresponden con la provincia en la que se sitúa el municipio y otros tres dígitos que especifican el municipio) se corresponde con el código dado por el INE (Instituto Nacional de Estadística) [13], que se recogen en un documento Excel utilizado por el programa para obtener el código del municipio deseado por el usuario.

El input del método `obtenerValClimNorm` es el ID de la estación de la que se quiera obtener los valores históricos meteorológicos; este ID es propio de AEMET por lo que se hace necesario el método `obtenerEstaciones`, en el que se devuelve una estructura que contiene todas las estaciones de AEMET con sus respectivos códigos de identificación (ID).



El output del método `obtenerEstaciones` es una estructura que consta de 291 filas, que se corresponden con las 291 estaciones meteorológicas de AEMET que tiene repartidas a lo largo del territorio español, con 7 campos cada uno que especifican la información de cada una de las estaciones (Tabla 6). El campo de Indicativo es el que se corresponde con el ID de estación que es necesario como input para el método de `obtenerValClimNorm`.

<i>Campo</i>	<i>Descripción</i>	<i>Tipo de dato</i>
Latitud	Latitud de la estación	string
Provincia	Provincia donde reside la estación	string
Indicativo	Indicativo climatológico de la estación	string
Altitud	Altitud de la estación	string
Nombre	Ubicación de la estación	string
Indsinop	Indicativo sinóptico	string
Longitud	Longitud de la estación	string

Tabla 6. Estructura de estaciones

El output del método `obtenerValClimNorm` se corresponde con los valores climatológicos normales que se tienen del período temporal desde 1981 hasta 2010 para la estación especificada en el parámetro de ID de estación. Estos valores conforman una estructura de 13 filas, que se corresponden con los meses del año (primera fila es el mes de enero, segunda fila es el mes de febrero,...) y una última fila que se corresponde con el valor normal anual, con 475 campos que contienen toda la información climatológica. De entre todos estos campos, entre los que están por ejemplo, las velocidades de las rachas máximas de viento o las precipitaciones medias mensuales/anual; el valor que se necesita a la hora de determinar la estabilidad atmosférica de Pasquill (sección 3.3) es la radiación solar mensual/anual. Los valores normales referidos a la radiación solar, son el valor máximo, el valor mínimo, el valor medio, la mediana y una serie de estadísticos de



este valor de radiación (frecuencia, desviación típica,...); de estos valores, el que se ha decidido utilizar para determinar la estabilidad atmosférica es el valor de la **media** (aritmética) de la radiación solar medida en unidades de decenas de W/m^2 .

El output del método `obtenerPredMun` es una estructura que contiene la información de la predicción de los siguientes tres días así como unos campos con información adicional que se exponen en la Tabla 7. La predicción de cada uno de los días es una estructura cuyos campos se detallan en la Tabla 8. La predicción meteorológica de cada día contiene mucha información, pero de toda, los campos que se utilizan para estimar los datos de entrada del modelo son los relativos al viento, temperatura, fecha y estado del cielo (aparecen sombreados en la Tabla 8).

<i>Campos</i>	<i>Subcampos</i>	<i>Descripción</i>
Origen	Productor	'AEMET'
	Web	'www.aemet.es'
	enlace	url de la predicción del municipio
	language	'es' (español)
	copyright	©AEMET
	notalegal	'www.aemet.es/es/nota_legal'
Elaborado	Día en el que se elabora la predicción	
Nombre	Nombre del municipio	
Provincia	Provincia en la que se sitúa el municipio	
Predicción	Día 1	Contiene la predicción meteorológica de los siguientes tres días en forma de estructura
	Día 2	
	Día 3	

Tabla 7. Estructura de la predicción de un municipio



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

<i>Campos</i>	<i>Subcampos</i>	<i>Descripción</i>	<i>Unidades/Formato</i>
Probabilidad de Precipitación	Valor	Valor de probabilidad de precipitación	%
	Período	Período de validez para la probabilidad de precipitación	horas
Cota de nieve	Valor	Altura a partir de la cual se prevé nieve	metros
	Período	Período de validez para la cota de nieve	horas
Estado del cielo	Valor	Código de AEMET para el cielo	código
	Descripción	Descripción del estado del cielo	string
	Período	Período de validez del estado del cielo	horas
Viento	Período	Período de validez para el viento	horas
	Dirección	Dirección del viento (N,NE,E,SE,S,SO,O,NO,C)	string
	Valor	Velocidad del viento	km/h
Racha máxima	Período	Período de validez para la racha máxima	horas
	Valor	Valor de la racha máxima de viento	km/h
Temperatura	Máxima	Temperatura máxima	grados Celsius (°C)
	Mínima	Temperatura mínima	
	Dato	Temperatura para cada período del día	
Sensación Térmica	Máxima	Sensación térmica máxima	grados Celsius (°C)
	Mínima	Sensación térmica mínima	
	Dato	Sensación térmica para períodos del día	
Humedad relativa	Máxima	Valor máximo de humedad relativa	%
	Mínima	Valor mínima de humedad relativa	
	Dato	Valores de humedad relativa para períodos del día	
Uv Max		Índice ultravioleta máximo	IUV
Fecha		Fecha de validez de la predicción	date

Tabla 8. Estructura de la predicción de un día



Como se puede ver la predicción meteorológica que proporciona la API de AEMET se estructura en períodos horarios del día. Estos períodos son franjas horarias en las que se predice el valor de una magnitud climatológica como el viento o la temperatura. Los períodos que se establecen son los que se muestran en la Tabla 9.

<i>Número período horario</i>	<i>Hora de inicio</i>	<i>Hora fin</i>
1	00	24
2	00	12
3	12	24
4	00	06
5	06	12
6	12	18
7	18	24

Tabla 9. Períodos horarios de las predicciones

3.2.3 CÓDIGOS DE ERROR

La API REST responde a cada solicitud que se le realiza vía web, con un código de respuesta HTTP de acuerdo a la norma RCF 2616 sobre el estándar de HTTP [14]. Es importante tener en cuenta estos códigos que permiten saber si la petición que se ha realizado a la API de AEMET se ha llevado a cabo con éxito o por el contrario se ha producido un error (pudiendo identificarse el tipo de error gracias al código de error). El software tiene en cuenta estos códigos de error (Tabla 10) para en el caso de que se haya producido uno de estos errores, se alerte al usuario a través de la interfaz de usuario mostrando el tipo de error que se ha producido y no se continúe con la ejecución del código sin la información meteorológica que se extrae de la API de AEMET.



<i>Código HTTP</i>	<i>Tipo de código</i>	<i>Descripción</i>
200	2xx Peticiones correctas	La respuesta del servidor ha sido correcta
400	4xx Errores del cliente	La solicitud contiene sintaxis errónea
401	4xx Errores del cliente	Petición no autorizada
404	4xx Errores del cliente	Petición sin datos, no se encuentra la página o el recurso solicitado
429	4xx Errores del cliente	Petición que sobrepasa los límites del servicio

Tabla 10. Códigos de error HTTP

3.3 ESTABILIDAD ATMOSFÉRICA

La estabilidad atmosférica es una propiedad del aire que describe su tendencia a permanecer en su posición original, estable, o a elevarse, inestable. es un factor fundamental a la hora de predecir la concentración de los contaminantes en la atmósfera. Los coeficientes de dispersión horizontal y vertical (σ_y y σ_z) se calculan de acuerdo a unas fórmulas empíricas que son función de la clase de estabilidad atmosférica como se explicará más adelante en el Capítulo 4, puesto que el movimiento del aire (y por tanto, de los contaminantes) depende en gran medida de la estabilidad atmosférica. La clase de estabilidad atmosférica también se utiliza como parámetro para estimar la velocidad del viento a la altura del penacho, para calcular la sobreelevación del penacho y para determinar la altura de mezcla.



3.3.1 MARCO TEÓRICO

La estabilidad atmosférica está relacionada con dos factores fundamentales: el gradiente vertical de temperatura y la humedad relativa ambiental.

El gradiente vertical de temperatura [15] [16] se define como la variación de la temperatura del aire con respecto a la altitud. Este gradiente es variable a lo largo del día y de la zona, estando relacionado con diferentes variables climatológicas. Este gradiente se considera positivo si la temperatura aumenta con la altura, mientras que se considera negativo en el caso contrario de que la temperatura vaya disminuyendo a medida que aumenta la altura. El comportamiento de la atmósfera (movimiento del aire y los contaminantes) depende estrechamente de la estabilidad atmosférica, y ésta a su vez depende del gradiente vertical de temperaturas.

Un concepto clave a la hora de determinar la estabilidad atmosférica es el gradiente de temperatura adiabático seco (GTAS) que se define como el gradiente que experimenta un gas ideal seco desplazándose por la atmósfera verticalmente hacia arriba en un proceso adiabático. Un gas ideal es aquel que se comporta de acuerdo a la ley de los gases ideales y sigue una ecuación de estado simplificada. Un proceso adiabático es aquel en el que no se produce transferencia de calor ni de masa a través de las fronteras de la porción de aire considerada, de tal modo, que si la masa de aire es comprimida, el aire se calienta. El gradiente de temperatura adiabático seco es de $-9,8^{\circ}/\text{km}$, de tal forma que el aire se enfría $9,8^{\circ}\text{C}$ cada 1000m de altitud. Este valor es constante, independientemente de la temperatura ambiental. Un diagrama adiabático (Figura 10) muestra la relación entre la elevación y la temperatura, de tal modo que se muestra como varía la temperatura partiendo de diferentes temperaturas iniciales pero teniendo en cuenta que la pendiente de las rectas (gradiente) permanece constante.

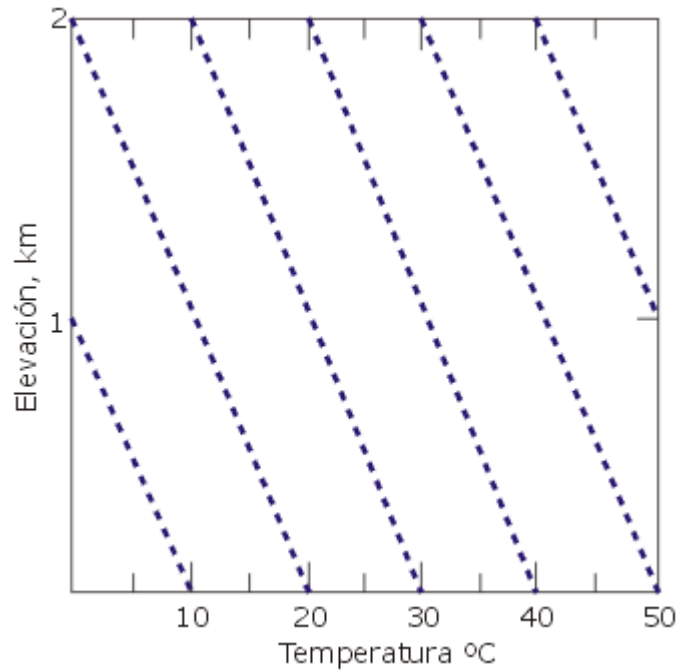


Figura 10. Diagrama adiabático seco

Fuente: "http://www.bvsde.paho.org/cursoa_meteoro"

El gradiente ambiental de temperatura (GTA) es la variación real de temperatura que experimenta una porción de aire al ascender por la atmósfera. Este gradiente es el resultado de complejas interacciones entre los distintos factores climatológicos, por lo que no ni siquiera es un valor constante, como se aprecia en la Figura 11. Este gradiente puede ser mayor o menor que el GTAS, incluso puede que se produzca el fenómeno de la inversión cuando la temperatura aumenta a medida que lo hace la altura. El grado de estabilidad atmosférica se determina a partir de la diferencia de temperatura entre una porción de aire y el aire circundante lo que provoca el movimiento de esa porción de aire. Se definen de acuerdo a esto cuatro condiciones básicas de estabilidad atmosférica: condiciones inestables, neutrales, estables y extremadamente estables. Estas condiciones se establecen cuando el gradiente ambiental de temperatura (GTA) es mayor, igual o menor (en valor absoluto).

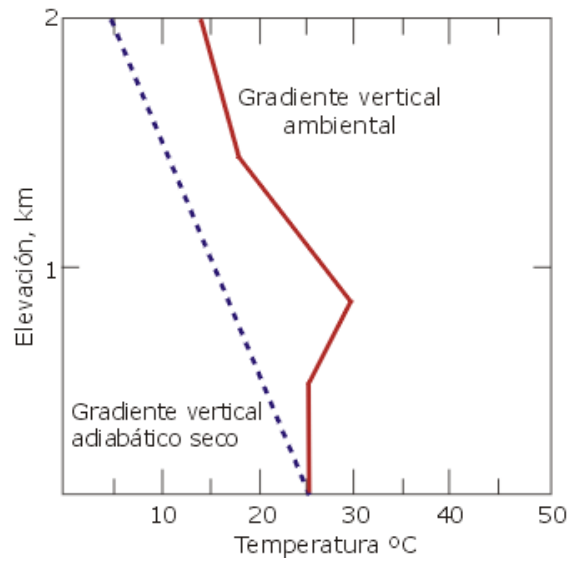


Figura 11. Gradiente ambiental de temperatura

Fuente: "http://www.bvsde.paho.org/cursoa_meteoro"

- 1) Cuando el GTA es **mayor** que el GTAS, las condiciones son inestables (Figura 12). En estas condiciones, la circulación vertical de aire en ambas direcciones aumenta y se produce una mezcla vertical considerable. Las condiciones inestables se producen durante los días soleados con bajas velocidades de viento y con una fuerte insolación.

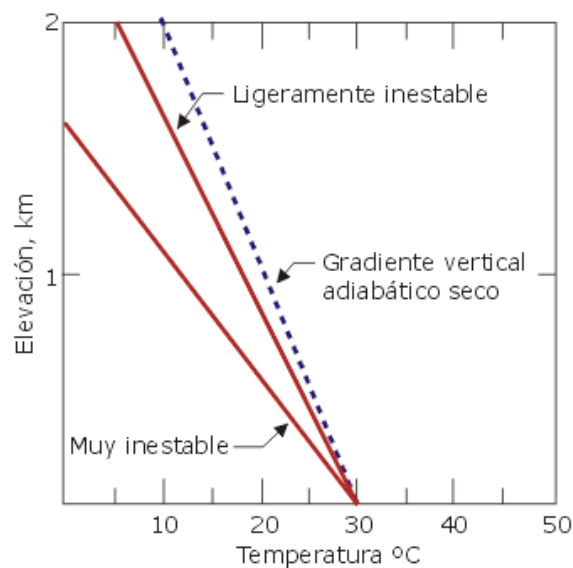


Figura 12. Condiciones inestables

Fuente: "http://www.bvsde.paho.org/cursoa_meteoro"



- 2) Cuando el GTA es **igual que** el GTAS (o prácticamente igual), las condiciones son neutrales (Figura 13). Estas condiciones no provocan ni frenan el movimiento vertical del aire. Se producen cuando hay grandes capas de nubes que impiden el calentamiento o enfriamiento de la superficie o cuando el viento es muy elevado.

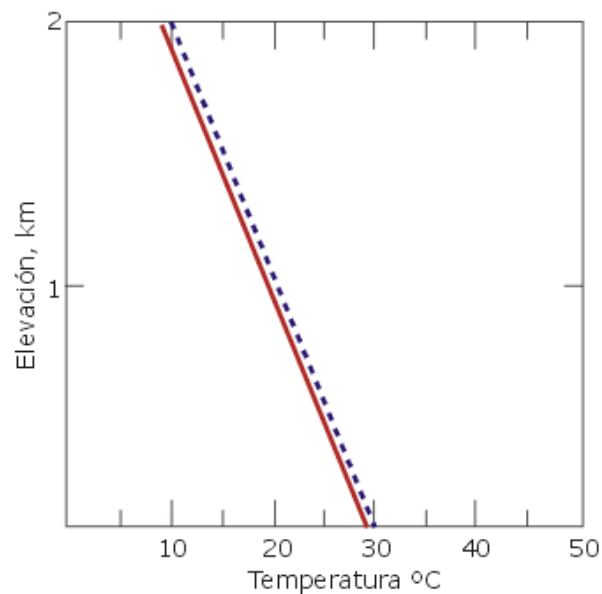


Figura 13. Condiciones neutrales

Fuente: "http://www.bvsde.paho.org/cursoa_meteoro"

- 3) Cuando el GTA es **menor que** el GTAS, las condiciones atmosféricas se consideran estables (Figura 14). Bajo estas condiciones el aire resiste la circulación vertical, por lo que el movimiento vertical se inhibe. Se producen normalmente durante la noche o cuando el viento es casi nulo. Estas condiciones pueden llegar a ser extremas, en lo que consideraría condiciones extremadamente estables en donde el aire frío cercano a la superficie es atrapado por una capa de aire caliente sobre éste (normalmente en condiciones de inversión atmosférica).

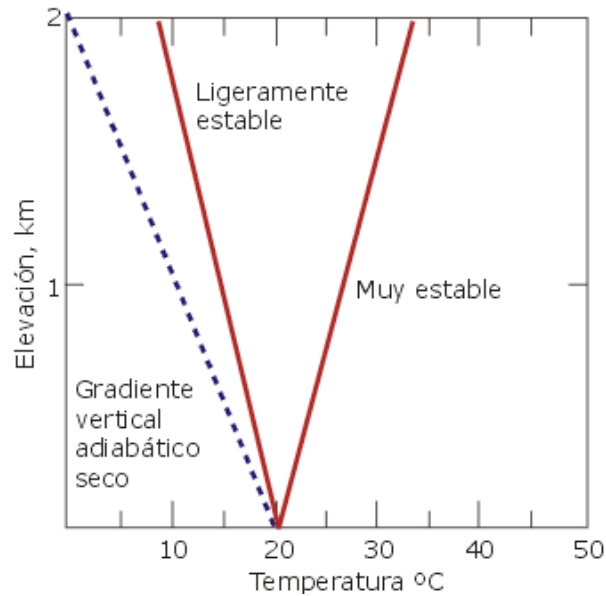


Figura 14. Condiciones estables

Fuente: "http://www.bvsde.paho.org/cursoa_meteoro"

El grado de estabilidad atmosférica y la altura de mezcla tienen un efecto importante en las concentraciones de contaminantes en el aire. La combinación de los movimientos verticales y horizontales del aire, provocados por estos factores, influye en el comportamiento de las plumas de fuentes puntuales (chimeneas) como se puede apreciar en la Figura 15.

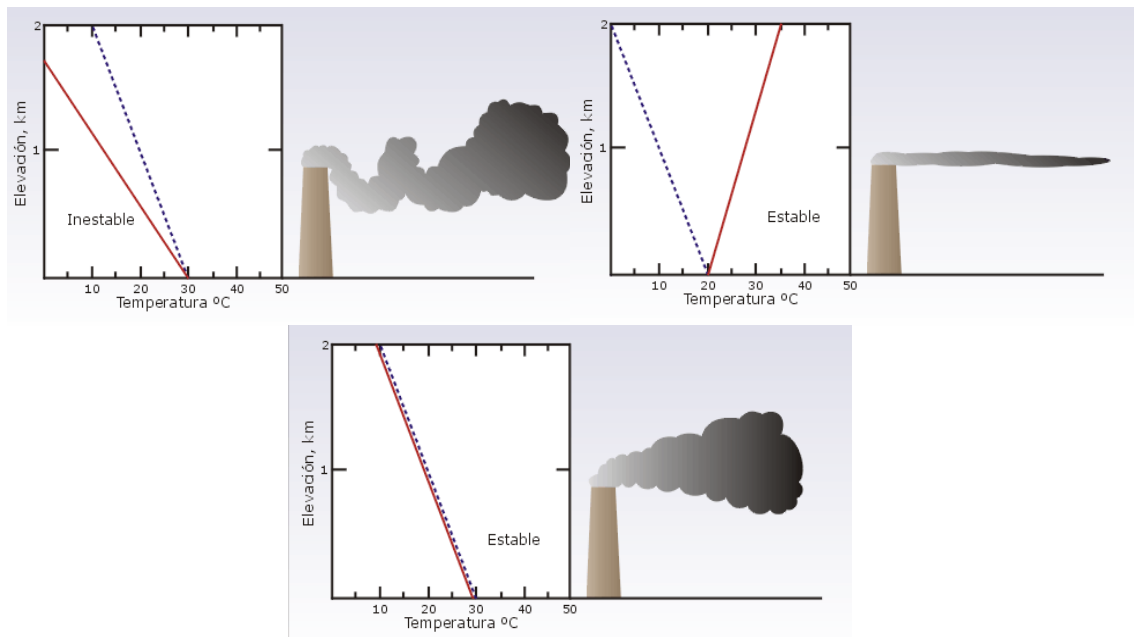


Figura 15. Efecto del grado de estabilidad atmosférica en las plumas



3.3.2 ESTABILIDAD ATMOSFÉRICA SEGÚN F. PASQUILL

F. Pasquill [17] propuso un método que permite clasificar las diferentes condiciones de estabilidad atmosférica en 6 clases de forma sencilla a partir de las condiciones atmosféricas. La principal ventaja que ofrece esta clasificación es que su aplicación es posible con información meteorológica convencional suministrada por el servicio meteorológico local, en este caso, AEMET. Pasquill propuso seis categorías de estabilidad que se presentan en la Tabla 11.

<i>Categoría</i>	<i>Clase de estabilidad</i>
A	Extremadamente inestable
B	Moderadamente inestable
C	Ligeramente inestable
D	Neutral
E	Ligeramente estable
F	Estable

Tabla 11. Clases de estabilidad atmosférica según Pasquill

Esta clasificación de la estabilidad atmosférica está relacionada con la clasificación de la estabilidad expuesta en la sección 3.3.1, siendo las diferentes clases de estabilidad diferentes valores del gradiente térmico ambiental como se puede ver en la Figura 16.

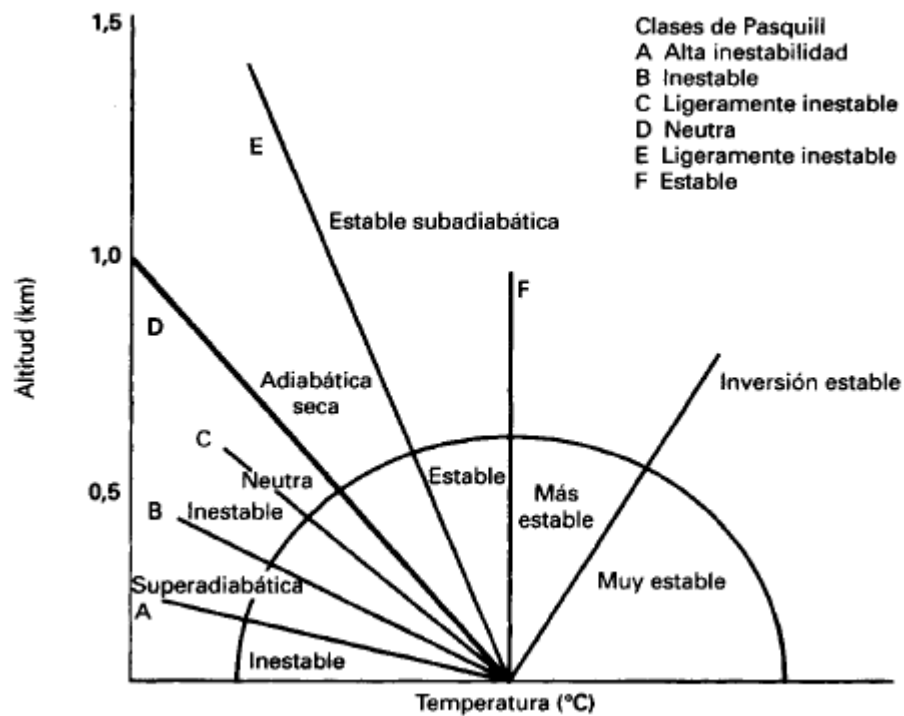


Figura 16. Clases de estabilidad Pasquill

El método permite asociar cualquier situación atmosférica a alguna de las seis categorías propuestas. Los factores que se consideran determinantes en la clasificación son:

- La velocidad del viento
- La nubosidad
- La radiación solar que llega a la superficie terrestre

Estos tres factores, se obtienen de los datos climatológicos que proporciona la API de AEMET al software. Los dos primeros, se adquieren de la predicción meteorológica que se hace de cada municipio, mientras que el tercero se toma la radiación solar media que se produce durante ese mes (es un valor que no varía de un año a otro por lo que se puede obtener de los valores históricos registrados por las estaciones meteorológicas) en la estación meteorológica más cercana a ese municipio. Este valor de radiación se puede estimar de forma más exacta [16] con



métodos más complejos que tienen en cuenta el día del año, la latitud, la longitud y otro conjunto de parámetros como la estabilidad de Turner, pero se ha optado por utilizar en el software este método simplificado, avalado técnica y científicamente, acorde a los objetivos propuestos en este proyecto.

Posteriormente, Gifford [18] caracteriza las clases de estabilidad propuestas por Pasquill de acuerdo a la Tabla 12 (que es la que se ha utilizado en el programa para determinar la clase de estabilidad de Pasquill).

Velocidad del viento a 10m (m/s)	Insolación durante el día			Condiciones nocturnas	
				Nubosidad	
	Fuerte	Moderada	Ligera	$\geq 4/8$	$\leq 3/8$
<2	A	A-B	B	E	F
2-3	A-B	B	C	E	F
3-4	B	B-C	C	D	E
4-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Tabla 12. Clasificación de las clases de estabilidad de Pasquill en función de variables atmosféricas

3.3.3 AJUSTE DE LOS DATOS CLIMATOLÓGICOS

De acuerdo a la Tabla 12, es necesario determinar la velocidad del viento, la insolación y la nubosidad para poder clasificar la estabilidad atmosférica. Estos parámetros no se corresponden directamente con los datos climatológicos que se extraen de la API de AEMET (Tabla 8 y el valor de radiación solar) por lo que es necesario realizar ajustes a estos datos climatológicos para que se correspondan con los parámetros de la tabla.



La velocidad del viento es la más sencilla pues únicamente es necesario un cambio de unidades, pues el valor meteorológico que se obtiene de AEMET está en unidades de km/h, mientras que el valor de la Tabla 12 de la velocidad del viento está en m/s. ($1\text{m/s} = 3,6\text{ km/h}$).

La radiación solar que se obtiene de AEMET es un valor promedio de la radiación solar de ese mes (como un histórico de los años 1980-2010), en la estación meteorológica más cercana medida en decenas de W/m^2 . La clasificación de la estabilidad atmosférica que se hace en la Tabla 12, establece parámetros de radiación solar fuerte, moderada o débil pero sin establecer valores numéricos, por lo tanto, se hace necesario una correspondencia de esta división de radiación solar con valores numéricos. Esta correspondencia es la que se muestra en la Tabla 13 [16].

<i>Radiación [W/m^2]</i>	<i>Valor numérico</i>
Fuerte	>580
Moderada	580-290
Débil	<290

Tabla 13. Correspondencia de la radiación

Se consideró la posibilidad de ajustar este parámetro de radiación de acuerdo a la nubosidad del cielo, pero finalmente no se contempló porque no se puede concluir el efecto de la nubosidad sobre la radiación solar en la superficie de la tierra pues existen resultados de que la radiación puede aumentar, disminuir o no variar debido al efecto de las nubes. El efecto sobre la radiación depende del tipo de nubes que estén presentes en la atmósfera, que es un parámetro que no es posible estimar con la información meteorológica con la que cuenta este proyecto por lo que la nubosidad no se ha tenido en cuenta a la hora de determinar el valor de la radiación solar sobre la superficie [19].



La nubosidad es un factor fundamental a la hora de determinar la clase de estabilidad atmosférica en las horas nocturnas y que se mide en octavas (múltiplos de 1/8). De acuerdo a la Tabla 12, hay que distinguir entre cuando la nubosidad es mayor o igual que 4/8 y cuando ésta es menor. La variable meteorológica que se obtiene de la API de AEMET con la que se corresponde la nubosidad es *Estado del cielo* (despejado, poco nuboso, cubierto, intervalos nubosos con lluvia escasa,...). La relación de esta variable de *Estado del cielo* con la nubosidad se obtiene del Manual de uso de términos de meteorológicos de la Agencia Estatal de Meteorología [20] de acuerdo a la Tabla 13.

<i>Intervalo de nubosidad (octavas)</i>	<i>Adjetivación (término utilizado)</i>
$0 \leq N \leq 1/8$	Despejado
$2/8 \leq N \leq 3/8$	Poco nuboso
$4/8 \leq N \leq 6/8$	Nuboso
$N \geq 7/8$	Cubierto

Tabla 14. Términos meteorológicos para la nubosidad

Los posibles valores del *Estado del cielo* que establece AEMET son 48. Estos valores pueden entrar dentro de que la nubosidad sea mayor o igual que 4/8 (nuboso y cubierto) o menor de 4/8 (poco nuboso y despejado) para poder clasificar de acuerdo a la Tabla 12. La correspondencia entre la nubosidad y las posibles descripciones del *Estado del cielo* es la que se muestra en la Tabla 15.



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

<i>Estado del cielo</i>	<i>N</i>	<i>Estado del cielo</i>	<i>N</i>	<i>Estado del cielo</i>	<i>N</i>
Despejado	$\leq 3/8$	Muy nublado con lluvia escasa	$\geq 4/8$	Nublado con nieve	$\geq 4/8$
Despejado noche	$\leq 3/8$	Cubierto con lluvia escasa	$\geq 4/8$	Nublado con nieve noche	$\geq 4/8$
Poco nublado	$\leq 3/8$	Intervalos nublados con lluvia	$\leq 3/8$	Muy nublado con nieve	$\geq 4/8$
Poco nublado noche	$\leq 3/8$	Intervalos nublados con lluvia noche	$\leq 3/8$	Cubierto con nieve	$\geq 4/8$
Intervalos nublados	$\leq 3/8$	Nublado con lluvia	$\geq 4/8$	Intervalos nublados con tormenta	$\leq 3/8$
Intervalos nublados noche	$\leq 3/8$	Nublado con lluvia noche	$\geq 4/8$	Intervalos nublados con tormenta noche	$\leq 3/8$
Nublado	$\geq 4/8$	Muy nublado con lluvia	$\geq 4/8$	Nublado con tormenta	$\geq 4/8$
Nublado noche	$\geq 4/8$	Cubierto con lluvia	$\geq 4/8$	Nublado con tormenta noche	$\geq 4/8$
Muy nublado	$\geq 4/8$	Intervalos nublados con nieve escasa	$\leq 3/8$	Muy nublado con tormenta	$\geq 4/8$
Cubierto	$\geq 4/8$	Intervalos nublados con nieve escasa noche	$\leq 3/8$	Cubierto con tormenta	$\geq 4/8$
Nubes altas	$\geq 4/8$	Nublado con nieve escasa	$\geq 4/8$	Intervalos nublados con tormenta y lluvia escasa	$\leq 3/8$
Nubes altas noche	$\geq 4/8$	Nublado con nieve escasa noche	$\geq 4/8$	Intervalos nublados con tormenta y lluvia escasa noche	$\leq 3/8$
Intervalos nublados con lluvia escasa	$\leq 3/8$	Muy nublado con nieve escasa	$\geq 4/8$	Nublado con tormenta y lluvia escasa	$\geq 4/8$
Intervalos nublados con lluvia escasa noche	$\leq 3/8$	Cubierto con nieve escasa	$\geq 4/8$	Nublado con tormenta y lluvia escasa noche	$\geq 4/8$
Nublado con lluvia escasa	$\geq 4/8$	Intervalos nublados con nieve	$\leq 3/8$	Muy nublado con tormenta y lluvia escasa	$\geq 4/8$

Tabla 15. Estados del cielo y nubosidad



3.4 VIENTO

El viento es una variable meteorológica fundamental para determinar la concentración de los contaminantes pues la velocidad y dirección del viento controlan el transporte de los contaminantes. La velocidad del viento es también empleada para determinar otros parámetros del modelo como la clase de estabilidad atmosférica o la altura efectiva del penacho.

3.4.1 VELOCIDAD DEL VIENTO

La velocidad del viento es una variable meteorológica que por convenio internacional, se mide a una altura de 10 metros. Es necesario considerar que esa velocidad no es constante con la altitud por lo que es necesario realizar un ajuste de la velocidad. La velocidad del viento, al igual que la temperatura, presenta un gradiente vertical que depende de la altura (Figura 17).

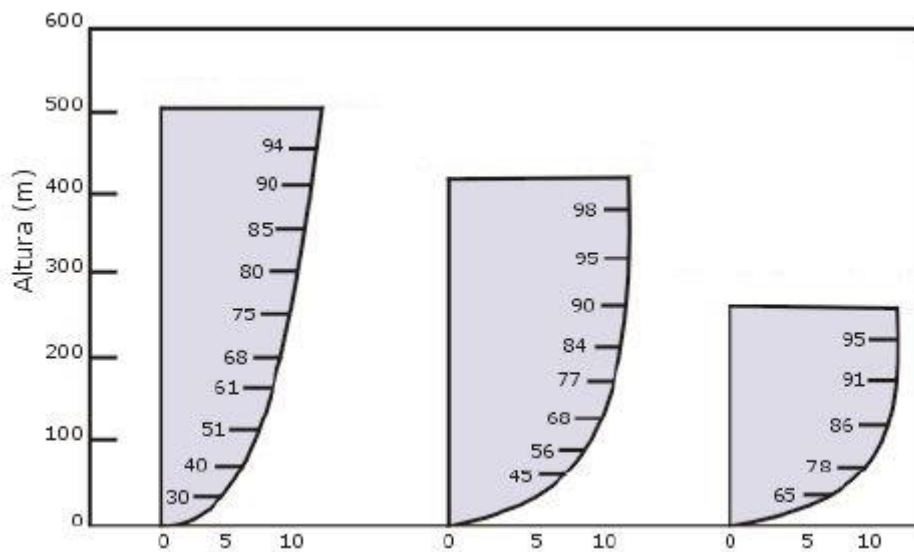


Figura 17. Gradiente vertical del viento



La altura a la que se efectúa la medida del viento con un anemómetro es a 10 metros, mientras que la fuente virtual que considera el modelo de dispersión de gases utilizado se localiza a una altura del penacho que normalmente será mayor que 10 metros. Este gradiente que presenta la velocidad del viento con la altura no es constante; la localización de árboles, elevaciones del terreno y la presencia de edificios son factores que modifican el perfil de velocidad vertical del viento puesto que la rugosidad del terreno afecta al movimiento del aire. La rugosidad del terreno, en cual se esté determinando la difusión de un contaminante es por tanto un factor que se ha de tener en cuenta en los datos de entrada del programa, para poder calcular la velocidad del viento correctamente.

La Ecuación 1 permite calcular la velocidad del viento (U) en función del tipo de terreno y la altura de la fuente de emisión:

$$U_H = U_a \left(\frac{H}{h_a} \right)^p$$

Ecuación 1. Corrección de la velocidad del viento

en donde:

- U_H : velocidad del viento a la altura efectiva del penacho en m/s
- U_a : velocidad del viento a la altura de referencia en m/s
- H : altura efectiva del penacho en m
- h_a : altura de referencia en m (normalmente 10m)
- n : exponente constante que depende del tipo de terreno y la clase de estabilidad atmosférica

El exponente n depende del tipo de terreno (plano o rugoso) y de la clase de estabilidad atmosférica según Pasquill de acuerdo a la Tabla 16.



Clase de estabilidad	Coeficiente <i>n</i>	
	Terreno plano	Terreno rugoso
A	0,10	0,15
B	0,15	0,15
C	0,20	0,20
D	0,25	0,25
E	0,25	0,40
F	0,30	0,60

Tabla 16. Valores del coeficiente *n*

3.4.2 DIRECCIÓN DEL VIENTO

La dirección del viento se define como la orientación del vector del viento en la dirección horizontal. En meteorología la dirección del viento se define como la dirección desde la cual sopla el viento y se mide en grados en la dirección de las agujas del reloj a partir de la dirección norte. De tal forma que un viento del oeste, sopla del oeste a 270° de la dirección norte. La dirección del viento es la que marca la dirección del transporte de la pluma en el modelo gaussiano de dispersión de gases contaminantes.

La dirección del viento medida respecto a la dirección norte (viento que sopla del norte) en grados se distribuye según la Tabla 17. Es importante remarcar que la dirección norte del viento (0°) es viento que sopla desde esa dirección y por tanto el transporte de los contaminantes sería de norte a sur (180° respecto a la dirección norte).



<i>Dirección del viento</i>	<i>Grados respecto a la dirección norte (°)</i>
N	0
S	180
E	90
O	270
NE	45
NO	315
SE	135
SO	225

Tabla 17. Direcciones del viento

3.5 ALTURA EFECTIVA DEL PENACHO

La pluma que sale de la fuente de emisión (chimenea), antes de comenzar la dispersión del contaminante sufre una elevación como consecuencia de la cantidad de movimiento vertical producido por las emisiones de la chimenea con una velocidad específica vertical (perpendicular a la velocidad del viento) y como consecuencia también del efecto de las altas temperaturas a las que normalmente se producen las emisiones que provocan un efecto de flotabilidad positiva de los gases contaminantes.

Esta elevación de la pluma (Δh) tiene como consecuencia una altura adicional a la altura de la chimenea (h), por lo que la altura efectiva del penacho es de $H = h + \Delta h$ (Figura 18).

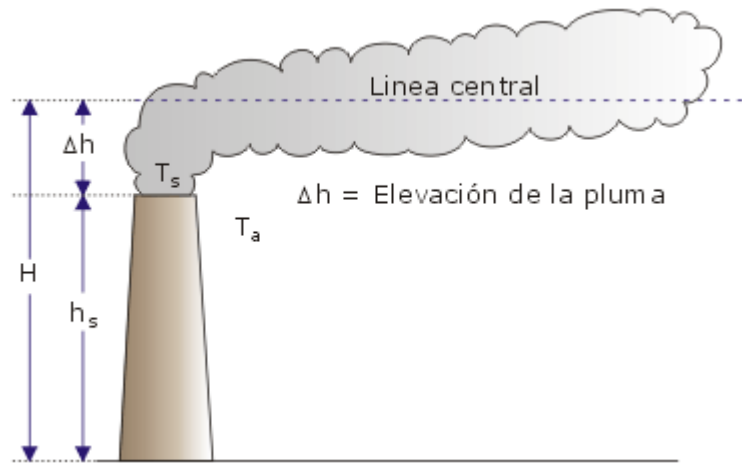


Figura 18. Altura efectiva de la chimenea

Se han realizado diversos estudios acerca de cómo determinar esta sobreelevación del penacho. Uno de estos estudios es el realizado por Carson y Moses [21] que fueron comparando los resultados que obtenían de esta elevación utilizando diferentes ecuaciones empíricas que tienen en cuenta la velocidad del gas de la chimenea (V_s) que considera la cantidad de movimiento vertical así como el efecto de flotación térmica motivado por la diferencia de temperatura entre los gases de emisión de la chimenea (T_s) y la temperatura ambiental (T_a) que propusieron la Ecuación 2.

$$\Delta h = -0.029 \frac{V_s d}{u} + 2.62 \frac{(Q_h)^{1/2}}{u}$$

Ecuación 2. Correlación de Carson y Moses para determinar la elevación de la pluma

en donde:

- Δh : Elevación de la pluma en m
- V_s : velocidad de salida del gas de la chimenea en m/s
- d : diámetro de salida de la chimenea en m
- u : velocidad del viento a la altura de la chimenea en m/s
- Q_h : tasa de emisión de calor de la chimenea en kJ/s



Teniendo en cuenta que hay que calcular Q_h (Ecuación 3):

$$Q_h = \dot{m}C_p(T_s - T_a)$$

Ecuación 3. Determinación de la tasa de emisión de calor de una chimenea

en donde:

- \dot{m} : flujo másico de gas contaminante en la chimenea en kg/s
- C_p : calor específico a presión constante del gas contaminante de la chimenea en kJ/kg·K.
- T_s : temperatura de salida a la salida del gas contaminante de la chimenea en K.
- T_a : temperatura ambiental a la altura de la chimenea en K

Otro de los estudios para determinar la altura de la chimenea fue llevado a cabo por Thomas, Carpenter y Colbaugh [22] centrándose en chimeneas de alturas significativas en las que la flotabilidad de la pluma tenía mucha más relevancia, parámetro que subestiman las otras ecuaciones planteadas hasta ese momento. La Ecuación 4 es la que se concluyó de ese estudio.

$$\Delta h = \frac{V_s d}{u} \left[1.5 + 2.68 \cdot 10^{-3} P d \left(\frac{T_s - T_a}{T_s} \right) \right]$$

Ecuación 4. Correlación de Thomas, Carpenter y Colbaugh para la determinación de la elevación de la pluma

Siguiendo la misma nomenclatura que la Ecuación 2 y la Ecuación 3, incluyendo la variable P, la presión barométrica a la salida de la chimenea en kPa.



Aunque en esos años se realizaron muchos estudios para determinar la elevación de la pluma, además de los ya mencionados, finalmente Briggs [23] en 1969 realizó un estudio en el que analizaba todos los modelos de la elevación de la pluma que se habían planteado hasta ese momento y en el que propone una serie de ecuaciones que se conocen comúnmente como “las ecuaciones de Briggs” que son las más utilizadas por casi todos los modelos de dispersión gaussianos. Estas ecuaciones son las que se han decidido utilizar finalmente en este proyecto para calcular la elevación de la pluma.

3.5.1 ECUACIONES DE BRIGGS

Las ecuaciones de Briggs de 1969 han sido utilizadas ampliamente en los modelos de dispersión a lo largo de los años, principalmente por los modelos utilizados por la Agencia de Protección del Medio Ambiente (EPA) de Estados Unidos. Las ecuaciones de Briggs, al igual que la gran mayoría de las relaciones para calcular la elevación de la pluma utiliza como parámetros la velocidad de los gases a la salida de la chimenea, la diferencia de temperatura entre la emisión de los gases de la chimenea y la temperatura ambiental y el diámetro de la chimenea. Las ecuaciones de Briggs no son una única relación sino son diferentes ecuaciones en función del grado de estabilidad atmosférica y de la fuerza de ascensión del flujo de los gases de la chimenea.

Todas las ecuaciones de Briggs utilizan el parámetro de flujo de flotación (F) que determina la fuerza de ascensión de los gases de la chimenea y se mide en m^4/s^3 y se calcula como:

$$F = \frac{gV_s d(T_s - T_a)}{4T_s}$$

Ecuación 5. Parámetro de flujo de flotación



donde:

- g : la aceleración de la gravedad en m/s^2 .
- V_s : la velocidad de salida del gas de la chimenea en m/s .
- d : diámetro de la salida de la chimenea en m .
- T_s : temperatura de salida de los gases de la chimenea en K .
- T_a : temperatura ambiental en K .

Una vez calculado el parámetro F , las ecuaciones de Briggs se dividen en dos. Unas ecuaciones cuya aplicación es en condiciones atmosféricas neutrales e inestables, y otras para atmósferas estables.

Las ecuaciones de Briggs que se utiliza en condiciones atmosféricas neutrales o inestables (clase de estabilidad A, B, C y D) son:

$$\Delta h \begin{cases} \Delta h = \frac{1,6F^{1/3}x_f^{2/3}}{U} & \text{para } x < 10h \\ \Delta h = \frac{1,6F^{1/3}(10h)^{2/3}}{U} & \text{para } x > 10h \end{cases}$$

Ecuación 6. Ecuaciones de Briggs en condiciones neutrales o inestables

donde:

- Δh : es la elevación de la pluma en m .
- F : es el parámetro de flujo de flotación en m^4/s^3 .
- h : es la altura de la chimenea en m
- U : velocidad del viento a la altura de la chimenea en m/s .
- x : es la distancia a contraviento desde la fuente de la pluma en m .
- x_f : es la distancia a contraviento desde la fuente de la pluma hasta el punto de máxima elevación de la pluma en m .



La distancia x_f se calcula con la Ecuación 7, utilizando la misma simbología que se describió anteriormente.

$$x_f \begin{cases} 2,16F^{0,4}h^{0,6} & \text{para } h < 305m \\ 674^{0,4} & \text{para } h > 305m \end{cases}$$

Ecuación 7. Distancia hasta el punto de máxima elevación de la pluma

La ecuación de Briggs que se utiliza cuando las condiciones atmosféricas dadas son estables (clases de estabilidad E y F) es:

$$\Delta h = 2,6 \left(\frac{F}{U \cdot S} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Ecuación 8. Ecuación de Briggs en condiciones estables

Siguiendo la notación de las otras ecuaciones salvo:

- S: parámetro de estabilidad que se calcula con la Ecuación 9.

$$S = g \frac{\partial \theta / \partial z}{T_a}$$

Ecuación 9. Parámetro estabilidad

El gradiente de temperatura potencial $\partial \theta / \partial z$ en [K/m] depende de la estabilidad atmosférica, aproximándose para la clase de estabilidad E como 0,020 K/m y para la clase F como 0,035 K/m [24].

3.5.2 PROBLEMA DE DISCONTINUIDAD

Utilizando las ecuaciones de Briggs expuestas en la sección 3.5.1 dentro del programa, al calcular la concentración de un contaminante en diferentes puntos del espacio se observó que se presentaba una discontinuidad en las concentraciones de dichos puntos como se muestra en la Figura 19.

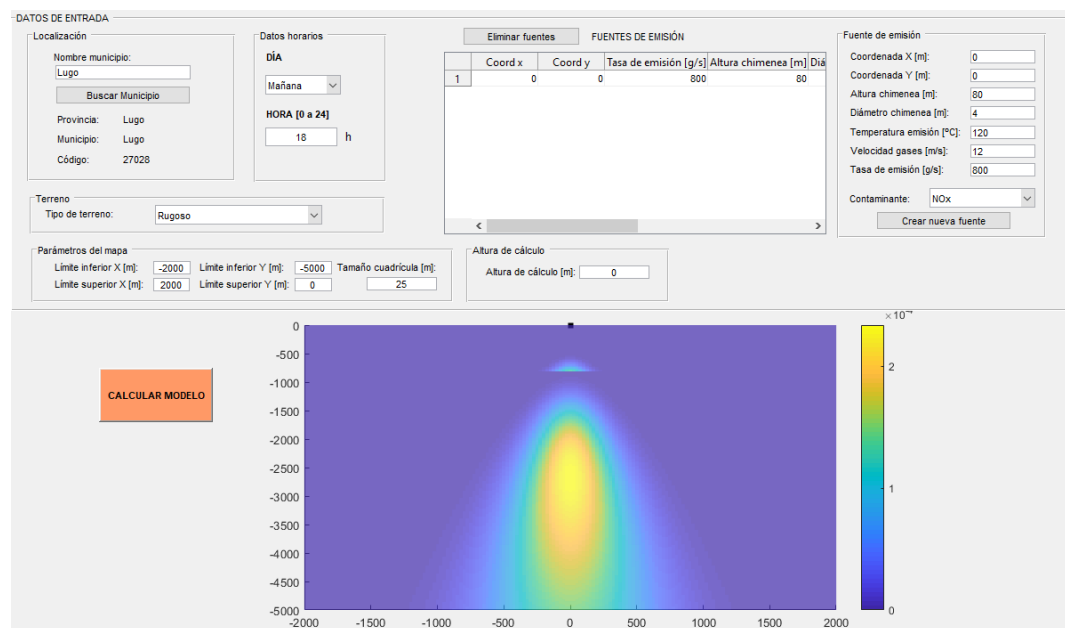


Figura 19. Discontinuidad en la determinación de las concentraciones

Evaluando en detalle los valores de las concentraciones se determinó que la discontinuidad se presenta a partir de una distancia de 800 metros al sur de la fuente (como el viento venía del Norte, $x=800$ m). La altura de la chimenea en este caso de discontinuidad está a 80 m. Estos dos valores llevan a la conclusión de que esta discontinuidad se debe a las ecuaciones de Briggs utilizadas, puesto que en condiciones neutrales o inestables, estas ecuaciones tienen una discontinuidad en el caso de $x=10h$ (como en este caso, que la altura de la chimenea h es de 80 m y la distancia x es 800 m) como se puede comprobar en la Ecuación 6. Este problema se solucionó con la utilización de otras ecuaciones de Briggs posteriores a las de 1969.



3.5.3 CORRECCIÓN DE LAS ECUACIONES DE BRIGGS

Las ecuaciones de Briggs de 1969, como se ha expuesto, sirven para evaluar la concentración de contaminante en un punto, pero no para calcular la concentración en una malla de puntos como es este caso pues presentan una discontinuidad. Briggs modificó sus ecuaciones para calcular la elevación de la pluma de 1969 en los años 1971 [25] y 1972 [26]. Finalmente en el año 2005, Beychok [27] presenta una forma de utilizar las ecuaciones de Briggs a través de un diagrama lógico sencillo (Figura 20) que finalmente ha sido utilizado para estimar la sobrelevación de la pluma en el programa.

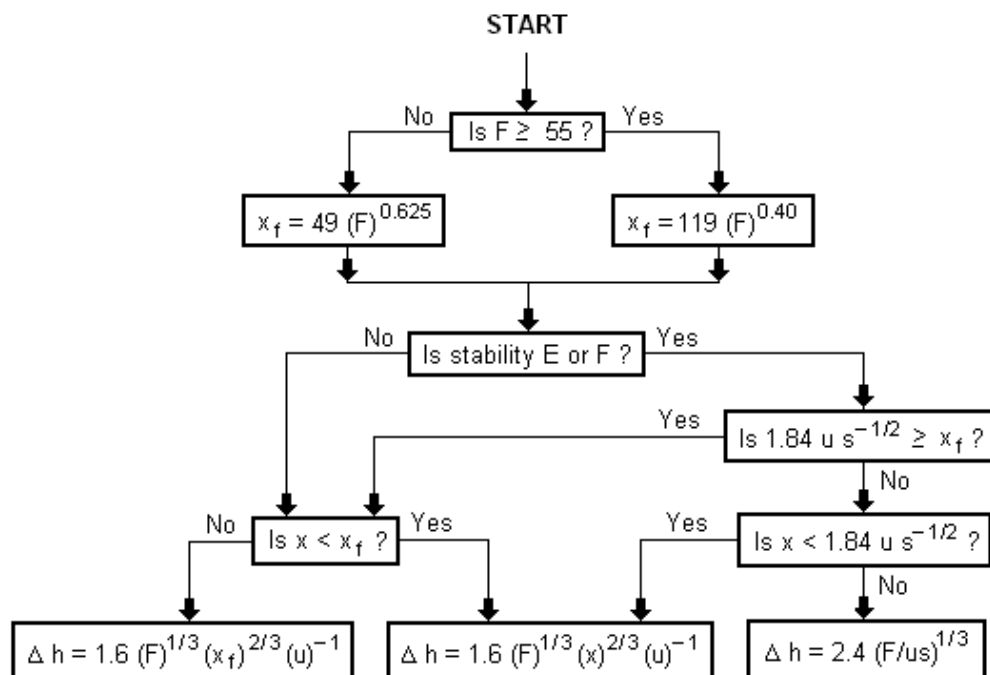


Figura 20. Diagrama lógico para el cálculo de la elevación de la pluma



Los parámetros utilizados en el diagrama son mismos que se exponen en las ecuaciones de Briggs de la sección 3.5.1: F parámetro de flujo de flotación y s parámetro de estabilidad. La distancia hasta el punto de máximo elevación de la pluma desde la fuente de emisión (x_f) en este caso se calcula de forma distinta. Esta forma de calcular la elevación de la pluma no presenta discontinuidades a la hora de calcular las concentraciones, por lo que fue el método seleccionado en el programa.

3.6 CONTAMINANTE

Uno de los datos de entrada del modelo, es un valor binario que depende de si el contaminante considerado en el modelo se refleja en el suelo debido a la conservación de la masa o por el contrario este se queda depositado en el suelo. Este dato de entrada del modelo es importante pues las ecuaciones que utiliza el contaminante para determinar la concentración en un punto tienen un término adicional si el contaminante es reflejado.

El usuario del programa a través de la interfaz de usuario especifica el tipo de contaminante de las fuentes de emisión (chimeneas) y el programa determina si este contaminante es reflejado o no de acuerdo a la Tabla 18.

<i>Contaminante</i>	<i>Reflejado</i>
CO	Sí
Compuestos orgánicos volátiles (COV)	Sí
NO _x	No
SO ₂	No

Tabla 18. Contaminantes que son reflejados por el suelo



3.7 ALTURA DE MEZCLA

La altura de la capa de mezcla [28] constituye un parámetro básico en la modelación de la dispersión de los contaminantes atmosféricos, pues la zona inferior a esta altura es donde ocurre el transporte de los contaminantes y su dispersión. Para el cálculo de esta altura de mezcla existen varias alternativas en función de los datos de los que se disponen, algunas de estas alternativas son extremadamente sencillas y otras son de elevado complejidad que necesitan mediciones de diferentes variables meteorológicas a diferentes alturas de la atmósfera (como puede ser a través de los sistemas SODAR acrónimo de *Sound Detection And Ranging*). Esta altura de mezcla es por tanto una variable que limita la dispersión vertical de los contaminantes.

La US-EPA recomienda el método de Holzworth para el cálculo de la altura de la capa de mezcla. Este método proporciona dos veces por día (en la mañana y en la tarde) la altura de la capa de mezcla a partir de los resultados de los sondeos de aire superior, y está incluido en el módulo MIXHT del procesador de datos meteorológicos Promet de la EPA. Este método estima la altura de mezcla como el punto de intersección entre el gradiente de temperatura adiabático seco (GTAS) y el gradiente real de temperaturas obtenido por sondeo. Este método es el utilizado por la EPA pues disponen de los datos de sondeo en diferentes estaciones meteorológicas del territorio de Estados Unidos, pero no puede ser utilizado en este proyecto pues no se dispone de estos datos en el territorio de España.

Por su parte, el Instituto Nacional de Meteorología, recomienda que se aplique a la hora de determinar la altura de mezcla el método de Klug [29]. Este sencillo método consiste en calcular la altura de mezcla a partir de clase de estabilidad horaria de Pasquill. El criterio de Klug para la determinación de la altura de la capa de mezcla se presenta en la Tabla 19.



<i>Clase de estabilidad</i>	A	B	C	D	E	F
<i>Altura (m)</i>	1600	1200	800	500	300	200

Tabla 19. Criterio de Klug para la determinación de la altura de la capa de mezcla en función de la clase de estabilidad de Pasquill-Gifford

3.8 CLASE DATOSENTRADA

Los datos de entrada del modelo, dentro de la programación orientada a objetos con la que se ha desarrollado el programa, configuran una clase denominada DatosEntrada. Los elementos de los que se compone esta clase se muestran en la Tabla 20.

<i>Clase</i>	DatosEntrada
<i>Propiedades</i>	u udir H L ref inv est Q
<i>Métodos</i>	DatosEntrada DatosEntradaClim

Tabla 20. Elementos de la clase DatosEntrada



Las propiedades de la clase `DatosEntrada` se detallan en la Tabla 21.

<i>GetAccess</i>	public	Permite acceder al valor de las propiedades sin restricciones
<i>SetAccess</i>	protected	Permite modificar al valor de las propiedades únicamente desde otra clase o subclase del archivo
<i>Propiedad</i>	<i>Descripción</i>	
u	Velocidad horizontal del viento a lo largo de la línea de pluma [m/s]	
udir	Dirección del viento en grados (°) respecto al Norte	
H	Altura efectiva del penacho desde el nivel del suelo [m]	
L	Altura de la capa de mezcla desde el nivel de suelo	
ref	Binario, si el contaminante es reflejado por el suelo vale 1	
inv	Binario, si se considera la altura de mezcla vale 1	
est	Clasificación de la estabilidad atmosférica de Pasquill-Gifford	
Q	Tasa de emisión del contaminante [g/s]	

Tabla 21. Propiedades de la clase `DatosEntrada`

Los métodos de la clase `DatosEntrada` son únicamente constructores de la clase que realizan todos los cálculos para estimar los datos de entrada del modelo, por lo que no devuelven nada. Los métodos, especificando su descripción, inputs y outputs aparecen en la Tabla 22.



<i>Método</i>	<i>Descripción</i>	<i>Inputs</i>	<i>Outputs</i>
DatosEntrada	Es el constructor de la clase DatosEntrada a partir de los datos de sus propiedades directamente	<p>u Velocidad horizontal del viento a lo largo de la línea de pluma [m/s]</p> <p>udir Dirección del viento en grados (°) respecto al Norte</p> <p>H Altura efectiva del penacho desde el nivel del suelo [m]</p> <p>L Altura de la capa de mezcla desde el nivel de suelo</p> <p>ref Binario, si el contaminante es reflejado por el suelo vale 1</p> <p>inv Binario, si se considera la altura de mezcla vale 1</p> <p>est Clasificación de la estabilidad atmosférica de Pasquill-Gifford</p> <p>Q Tasa de emisión del contaminante [g/s]</p>	-
DatosEntradaClim	Es el constructor de la clase DatosEntrada a partir de los datos que se obtienen tanto del usuario a través de la interfaz de usuario como los datos climatológicos que se obtienen de la API de AEMET	<p>pred Estructura que se obtiene de la API que contiene la predicción de las variables meteorológicas a lo largo de los siguientes tres días</p> <p>norm Estructura que se obtiene de la API que contiene la información climatológica de la radiación solar media</p> <p>h Altura de la chimenea desde donde se emite el contaminante [m]</p> <p>D_s Diámetro de la chimenea [m]</p> <p>cont Input de la clase contaminante que contiene la descripción del contaminante y su tasa de emisión</p> <p>x Distancia hasta la fuente de emisión [m]</p> <p>terr Tipo de terreno (rugoso o plano)</p> <p>per Período del día en el que se estima el modelo (Tabla 9)</p> <p>d Variable binaria que indica si es de día (1) o de noche (0)</p>	-

Tabla 22. Métodos de la clase DatosEntrada



Capítulo 4 MODELO

En este capítulo se presentan los diferentes modelos atmosféricos de dispersión de contaminantes que existen (4.1), especificando sus características para finalmente justificar la elección del modelo gaussiano en este proyecto. El modelo gaussiano, junto a sus ecuaciones se presenta en detalle en la sección 4.2. Los métodos de validación que se han llevado a cabo para validar el modelo empleado se explican en la sección 4.3. Por último, la programación del modelo dentro del software, al estar siendo una programación orientada a objetos, se incluye dentro de la clase Modelo (4.4).

4.1 MODELOS ATMOSFÉRICOS DE DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES

Los modelos atmosféricos de dispersión de contaminantes son herramientas físico-matemáticas que permiten simular las condiciones y el comportamiento reales del transporte y dispersión de los contaminantes como producto de la interacción entre las condiciones atmosféricas y las condiciones de las fuentes de emisión de contaminante.

Los datos de entrada que requieren los modelos de dispersión atmosférica se dividen en tres categorías:

- Datos de la fuente: que incluyen el tipo de contaminante, la tasa de emisión de contaminantes que produce la fuente, temperatura de emisión de los gases contaminantes, altura de la chimenea, diámetro de la chimenea,...



- Datos meteorológicos: tales como la velocidad del viento, la dirección del viento, la temperatura ambiental, la estabilidad atmosférica, la presión barométrica, altura de la capa de mezcla, nubosidad,...
- Datos topográficos: como es la ubicación geográfica de las fuentes, el tipo de terreno, mapas topológicos de la zona,...

Los datos de salida de los modelos normalmente son las concentraciones de contaminante en cada punto del espacio, aunque pueden variar dependiendo de la complejidad de los modelos empleados.

Los modelos de dispersión atmosférica no describen a la perfección el comportamiento de la contaminación, sino que constituyen una representación de este comportamiento por lo que se producen errores de modelado. La calidad de los resultados que producen los modelos de dispersión atmosférica dependen de factores como:

- Precisión en la determinación de las condiciones de las fuentes de emisión.
- Incertidumbre de los procesos físico-químicos que experimentan los contaminantes durante su transporte.
- Calidad y representatividad de los datos meteorológicos.
- Adecuación del modelo a la situación que se quiere determinar. Algunos modelos son más exactos para unas condiciones determinadas, pero pueden ser los peores en otras condiciones.



4.1.1 TIPOS DE MODELOS DE DISPERSIÓN

Los modelos de dispersión atmosférica se agrupan, de acuerdo a la Agencia de Protección ambiental de Estados Unidos (EPA) [30], en cinco tipos distintos:

I. Modelos gaussianos

Los modelos gaussianos son los más utilizados puesto que son los modelos que recomienda utilizar la EPA. Estos modelos presentan una excelente aproximación matemática a la dispersión de contaminantes, basándose en que los contaminantes se dispersan de acuerdo a una distribución Gaussiana o normal.

El modelo gaussiano tiene como hipótesis que el material proviene de una fuente de emisión es continuamente transportado en la dirección del vector de la velocidad del viento, concentrándose el contaminante en la línea central de la pluma.

Este modelo presenta buenos resultados a la hora de determinar las concentraciones de contaminantes si los contaminantes son no reactivos, es decir, no sufren alteraciones físico-químicas en la atmósfera.

II. Modelos numéricos

Los modelos numéricos, como su nombre indica son aquellos que utilizan métodos numéricos para determinar las concentraciones de contaminantes. Las ecuaciones diferenciales que rigen el comportamiento de los contaminantes atmosféricos son discretizadas utilizando métodos numéricos, por ejemplo, las diferencias finitas en el que las derivadas se



representan mediante diferencias entre valores correspondientes a puntos discretos tanto en tiempo como en espacio. El tiempo de cálculo de estos modelos es muy sensible al tamaño de los intervalos de discretización.

Estos modelos son utilizados cuando los contaminantes considerados reaccionan en la atmósfera (contaminantes reactivos), formando nuevos contaminantes secundarios. Sus aplicaciones son utilizadas cuando se produce la formación de ozono (O_3) en los procesos o cuando la conversión de SO_2 y NO_x en sulfatos y nitratos que forman la lluvia ácida. Estos modelos requieren además de bases de datos mucho más extensas y complejas, así como unas condiciones meteorológicas muy detalladas, por lo que no son utilizados ampliamente.

III. Modelos estadísticos

Los modelos estadísticos se emplean en los procesos químicos y físicos en los que no existe una clara interpretación científica o cuando lo se dispone de todos los datos de entrada del modelo que se necesitan (se puede estimar por métodos estadísticos).

Las técnicas estadísticas se basan en analizar tendencias, relaciones en la dispersión de los contaminantes y las condiciones meteorológicas, con el uso del análisis de distribuciones de frecuencias, series temporales y otros métodos (redes neuronales, métodos de clasificación,...)

Estos modelos son utilizados para predecir la evolución del transporte de los contaminantes a corto plazo en tiempo real. Las desventajas de estos modelos es que no se puede establecer la relación causa-efecto de lo que sucede en el modelo.



IV. Modelos de caja

Estos modelos asumen que los contaminantes emitidos a la atmósfera se mezcla de manera uniforme en un volumen de control (caja de aire) de dimensiones finitas. Los parámetros que utilizan son las dimensiones con viento a favor, con viento de costado y las dimensiones verticales de la caja.

Los contaminantes se consideran químicamente estables (no reactivos) y que permanecen en el aire (los contaminantes se mezclan totalmente con el aire formando una dilución).

Estos modelos se utilizan principalmente para estimar la contaminación en las ciudades.

V. Modelos físicos

Estos modelos utilizan túneles de viento, canales de agua u otros medios para modelizar el comportamiento de los fluidos. La utilización de estos modelos requiere de un alto nivel de conocimiento técnico y de la disponibilidad de los recursos necesarios para llevarlos a cabo.

Estos modelos son los que más se aproximan a la realidad, pero los recursos que se necesitan así como el nivel de conocimientos que requieren, hace que sean los menos utilizados. Suelen ser útiles para la simulación de situaciones de flujo de contaminantes complejos, como terrenos muy irregulares.



La Agencia Ambiental Europea (EEA, en sus siglas en inglés) identifica además de los tipos de modelos expuestos, dos tipos de modelos de dispersión de contaminantes más:

VI. Modelos lagrangianos

Los modelos lagrangianos consideran un número de partículas ficticias para simular la dinámica de un parámetro físico. Es decir, se simula el comportamiento de determinadas partículas para poder extrapolar así el comportamiento de los contaminantes. Las características que tienen que tener estas partículas son:

- No presentan volumen
- La masa de cada partícula tiene que ser tal que la suma de la masa de todas las partículas emitidas en una unidad de tiempo sea igual a la tasa de emisión de contaminante de la fuente (conservación de la masa).
- No consideran la flotación de las partículas
- El promedio de las trayectorias de las partículas se considera la pluma de emisión del contaminante

Estos modelos son utilizados cuando las emisiones de contaminantes son instantáneas, es decir, las emisiones son no continuas, de tal forma que la pluma no es constante sino que está “rota” o segmentada.



VII. Modelos eulerianos

Es un modelo que aproxima la dispersión de los contaminantes atmosféricos a las ecuaciones eulerianas de los fluidos. Estas ecuaciones se corresponden con las ecuaciones de Navier-Stokes cuando las componentes disipativas son despreciables frente a las componentes convectivas.

Las ecuaciones básicas de la hidrodinámica (comportamiento de los fluidos) que se utilizan en estos modelos son:

- Balance de la cantidad de movimiento
- Balance de energía
- Balance de humedad
- Leyes de los gases
- Balance de masa del aire por debajo de la altura de mezcla
- Balance de los contaminantes

De entre todos los tipos de modelos de dispersión expuestos, el modelo gaussiano es el más usado pues utiliza cálculos relativamente sencillos para determinar las concentraciones de contaminantes y además no requiere de unos datos de entrada complejos que son los que se pueden obtener de la información meteorológica, sin necesidad de realizar estudios climatológicos más complejos. Estas características son precisamente las que encajan las especificaciones de este proyecto, pues la información meteorológica que utiliza el programa es la que proporciona AEMET que se corresponde con la información meteorológica que necesita el modelo gaussiano, adicionalmente los cálculos que utiliza este modelo no son extremadamente complicados lo que facilita la implementación de las ecuaciones dentro del programa.



4.2 *MODELO DE DISPERSIÓN GAUSSIANO*

El modelo de dispersión gaussiano (Figura 21) utiliza una distribución gaussiana para determinar la dispersión de los gases contaminantes emitidos por una fuente. Las hipótesis sobre las cuales se fundamenta la formulación matemática de este modelo son:

- La velocidad del viento (u) y dirección del viento son constantes en el espacio, despreciándose las variaciones de estos parámetros a lo largo de los tres ejes.
- Todos los gases contaminantes emitidos permanecen en la atmósfera sin reaccionar (no reactivos) y sin depositarse.
- La dispersión de los contaminantes únicamente se produce en la dirección del viento según una gaussiana.
- El desarrollo del modelo se considera estacionario (pluma desarrollada), es decir, no tiene en cuenta el desarrollo en el tiempo de la pluma.
- Los ejes de coordenadas utilizados por el modelo son relativos a la fuente y a la dirección del viento, de tal forma, el *eje x* tiene la dirección y sentido del vector de velocidad del viento, *eje y* es perpendicular al viento y horizontal (paralelo al suelo) y *eje z* es perpendicular a los otros dos ejes y mide la altura desde el nivel del suelo.
- La fuente de emisión del contaminante se sitúa en $x = 0$ y a una altura efectiva de pluma de H ($H = \Delta h + h_s$).

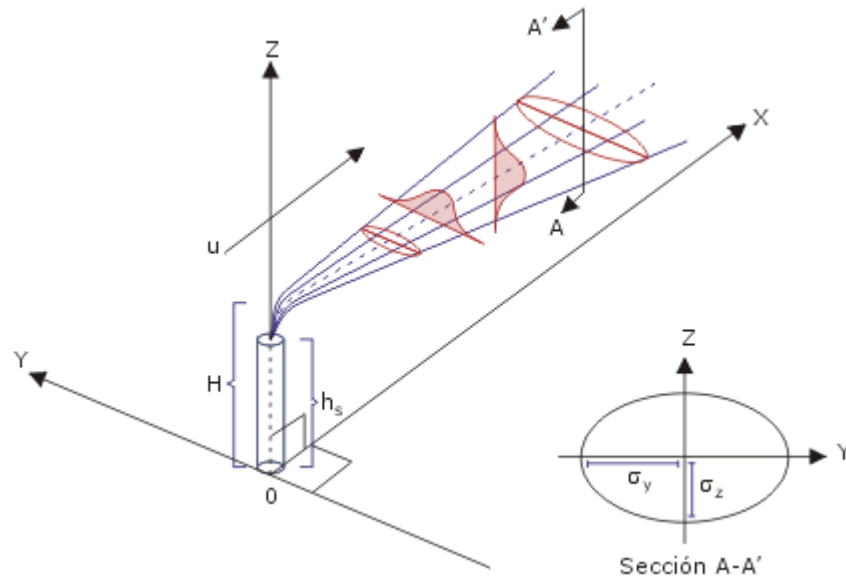


Figura 21. Representación del modelo de dispersión gaussiano de una fuente de emisión de altura efectiva H

La formulación matemática de la distribución gaussiana de contaminantes se describe a continuación:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{u} \cdot \frac{f}{\sigma_y \sqrt{2\pi}} \cdot \frac{g_1 + g_2 + g_3}{\sigma_z \sqrt{2\pi}}$$

Ecuación 10. Ecuación completa del modelo de dispersión gaussiano

donde:

- C : concentración del contaminante en g/m^3 en la posición x, y, z .
- x : distancia a la fuente en la dirección del viento a contraviento en m.
- y : distancia perpendicular al viento en el plano horizontal en m.
- z : altura desde el nivel de suelo en m.
- Q : tasa de emisión del contaminante en g/s.
- u : velocidad del viento a lo largo de la línea de pluma en m/s.
- σ_y : desviación normal horizontal de la distribución gaussiana en m.
- σ_z : desviación normal vertical de la distribución gaussiana en m.



- f : parámetro de dispersión horizontal en la dirección del eje y
- g_1 : dispersión vertical cuando el contaminante no es reflejado.
- g_2 : dispersión vertical cuando el contaminante es reflejado por el suelo
- g_3 : dispersión vertical cuando el contaminante es reflejado por la capa de mezcla atmosférica.

El término de la Ecuación 10, f es la dispersión horizontal del contaminante a lo largo del eje y , que en todos los casos se incluye en la ecuación de dispersión gaussiana y se calcula como:

$$f = \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)$$

Ecuación 11. Término de la dispersión horizontal a lo largo del eje y

El término de la Ecuación 10, g_1 corresponde al término de la dispersión del contaminante vertical cuando el contaminante no es reflejado, que se considera siempre en la ecuación, y se calcula como:

$$g_1 = \exp\left(-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right)$$

Ecuación 12. Término de la dispersión vertical cuando el contaminante no es reflejado

El parámetro g_2 tiene en cuenta una modificación que se realiza cuando se considera que contaminante se reflejará en el suelo a partir de una distancia en el eje x , al dispersarse a la atmósfera al entrar en contacto con el nivel de suelo. Para considerar esto, es necesario considerar una fuente de emisión imaginaria como se muestra en la Figura 22 situada en $z = -H$ e $y = 0$ conformando así una imagen especular de la fuente de emisión original. La concentración al tener en cuenta este

efecto es mayor pues se superponen las dos distribuciones gaussianas (fuente real y fuente imaginaria). Este parámetro se calcula de acuerdo a la Ecuación 13.

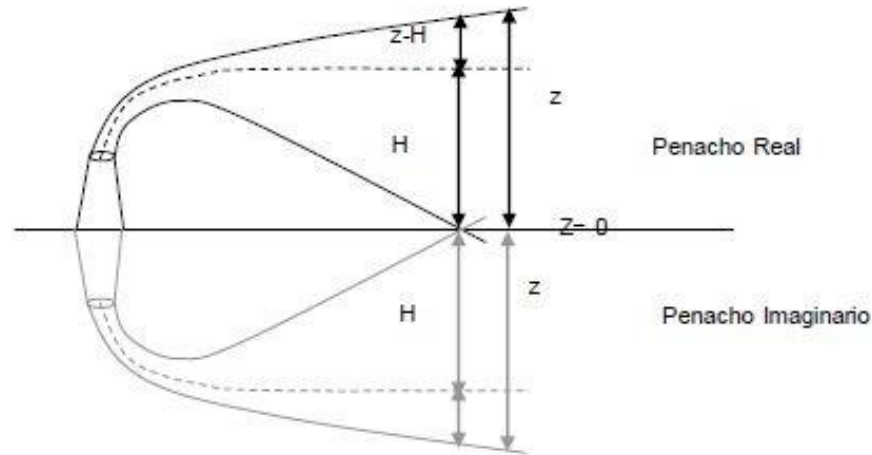


Figura 22. Efecto de la reflexión del suelo sobre la dispersión del contaminante

$$g_2 = \exp\left(-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right)$$

Ecuación 13. Término de dispersión vertical adicional cuando se considera la reflexión del contaminante por el suelo

El término de la Ecuación 10, g_3 corresponde con el término vertical de dispersión provocado por el efecto de la capa de mezcla. A partir de cierta distancia en el eje x , el contaminante ya no se puede dispersar más en la dirección z a partir de la altura de la capa de mezclado (L) debido a que por encima de ésta se produce el efecto de la inversión atmosférica, como se muestra en la Figura 23. Este parámetro g_3 se calcula como:

$$g_3 = \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ \exp\left[-\frac{(z-H-2mL)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H-2mL)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right. \\ \left. + \exp\left[-\frac{(z+H+2mL)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z-H+2mL)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}$$

Ecuación 14. Término de dispersión vertical por efecto de la altura de la capa de mezcla

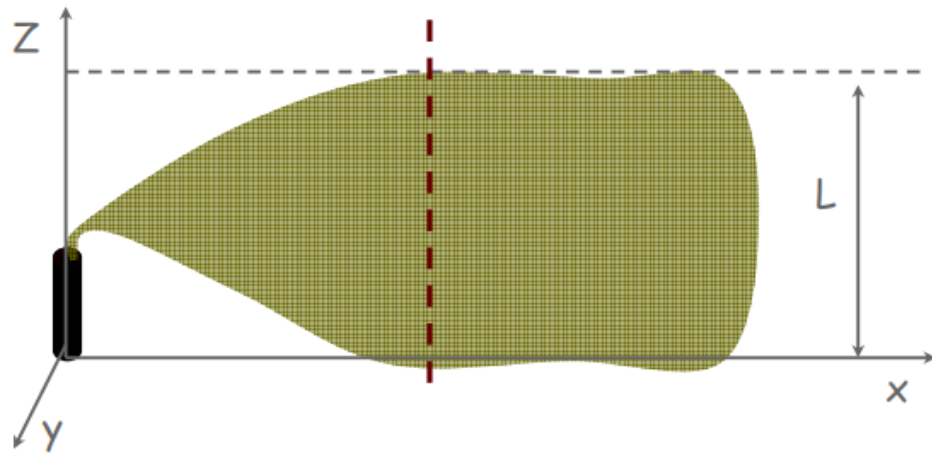


Figura 23. Efecto de la altura de mezclado L en la dispersión vertical del contaminante

El sumatorio de los cuatro términos exponenciales para el cálculo de g_3 (Ecuación 14) converge a un valor bastante rápido. En la mayoría de los casos, con el sumatorio de los términos de $m = 1$, $m = 2$ y $m = 3$ se consigue una solución correcta.

4.2.1 DETERMINACIÓN DE LAS DESVIACIONES NORMALES

Los parámetros de σ_y y σ_z son las desviaciones estándar de la curva de la distribución gaussiana en las direcciones y y z respectivamente. Estos coeficientes son función de la velocidad del viento, la nubosidad, de la radiación y de la distancia al foco de emisión en la dirección del viento (distancia en el eje x). Turner [16] propone la utilización de gráficas para aproximar el valor de σ_y y σ_z en función únicamente de la clase de estabilidad de Pasquill y de la distancia en el eje x , como se muestra en la Figura 24 y en la Figura 25.

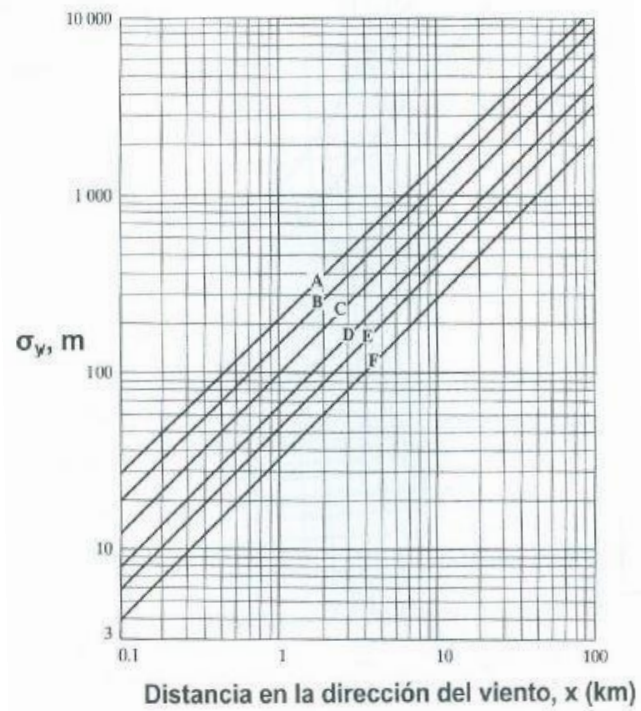


Figura 24. Desviación estándar en el eje y (Fuente: Turner, 1970)

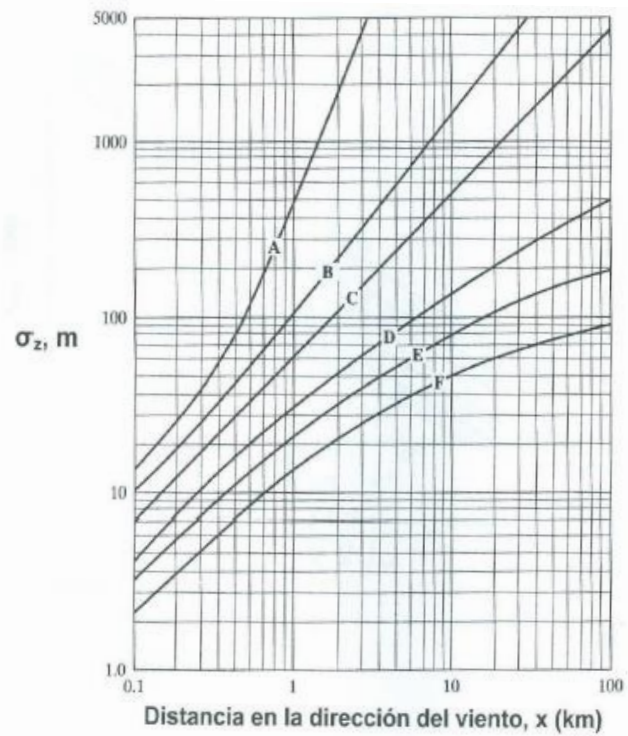


Figura 25. Desviación estándar en el eje z (Fuente: Turner, 1970)



Esta forma de obtener las desviaciones estándar a partir de las gráficas no es un método que se puede implementar en un programa, por lo que es necesario utilizar otro método en el cálculo. La alternativa que se ha utilizado en el programa es la propuesta por McMullen en 1975 [31] la cual calcula las desviaciones estándar con la Ecuación 15:

$$\sigma = \exp[I + J \ln(x) + K(\ln(x))^2]$$

Ecuación 15. Cálculo de la desviación estándar por McMullen

Las constantes empíricas I , J y K dependen de la clase de estabilidad atmosférica según Pasquill y del tipo de σ . Los valores de estas constantes se obtienen de la Tabla 23 y la Tabla 24. Estas constantes se obtuvieron al realizar un ajuste por el método de mínimos cuadrados para una función matemática que modelara las curvas propuestas por Turner.

<i>Clase de estabilidad</i>	<i>I</i>	<i>J</i>	<i>K</i>
A	-1.104	0.9878	-0.0076
B	-1.634	1.035	-0.0096
C	-2.054	1.0231	-0.0076
D	-2.555	1.0423	-0.0087
E	-2.754	1.0106	-0.0064
F	-3.143	1.0148	-0.007

Tabla 23. Valores de I, J, K para σ_y en función de la clase de estabilidad



<i>Clase de estabilidad</i>	<i>I</i>	<i>J</i>	<i>K</i>
A	4.679	-1.7172	0.277
B	-1.999	0.8752	0.0136
C	-2.341	0.9477	-0.002
D	-3.186	1.1737	-0.0316
E	-3.783	1.301	-0.045
F	-4.49	1.4024	-0.054

Tabla 24. Valores de I, J, K para σ_z en función de la clase de estabilidad

4.3 VALIDACIÓN DEL MODELO

Las pruebas de validación son una parte fundamental en la ingeniería de software. Estas pruebas de validación consisten en un proceso sistemático de revisión del software para comprobar que el sistema de software cumple con las especificaciones que se planteaban inicialmente. Entre estas pruebas de validación, se han llevado a cabo dos para la validación del modelo que estima las concentraciones de contaminante expuesto en la sección 4.2. Las pruebas que se han llevado a cabo son:

- La utilización de una base de datos que contiene las mediciones de concentración de contaminante (SO_2) de 28 sensores en un área de Illinois debido a las emisiones provocadas por una chimenea a 187 metros de altura. Este set de validación es uno de los que emplea la EPA para evaluar sus propios modelos [32].



- Los resultados de cálculo de concentración de contaminante del programa ISC3 en unas condiciones meteorológicas determinadas. Este modelo está perfectamente validado por la EPA por lo que sus resultados se pueden utilizar para comparar con los resultados que proporciona el programa desarrollado en este proyecto (incluyendo el modelo utilizado). Esta validación no solo permite comprobar los resultados finales de concentración, sino la estimación de parámetros intermedios del programa como las desviaciones estándar o la altura efectiva de la pluma.

Los resultados que se han obtenido de las pruebas de validación del modelo y del programa se presentarán más adelante en el Capítulo 6. En esta sección se explicarán cómo son las pruebas de validación que se han llevado a cabo en.

4.3.1 VALIDACIÓN KINCAID

El set de validación de Kincaid es un set utilizado por la EPA para la evaluación de sus modelos de dispersión atmosférica de contaminantes. Este set se basa en un estudio denominado Kincaid SO₂ que fue llevado a cabo en una zona rural de Illinois, Estados Unidos (Figura 26). Para llevar a cabo el estudio se realizaron emisiones continuas de dióxido de azufre (SO₂) desde una chimenea de 187 metros de altura. Las mediciones de contaminación se realizaron por 28 estaciones receptores que tomaban muestras cada hora en localizaciones que van desde 2km hasta 20km desde la fuente de emisión del contaminante. Este experimento fue realizado a lo largo de seis meses, entre abril de 1980 y junio de 1981, en los que se recabaron datos horarios de la contaminación de SO₂ (con un total de 4614 horas de muestras).

Este set de datos contiene toda la información meteorológica detallada necesaria para poder utilizar los modelos de dispersión atmosférica, incluyendo la velocidad y dirección del viento, la temperatura ambiental, y los datos de *National Weather Service* (NWS).

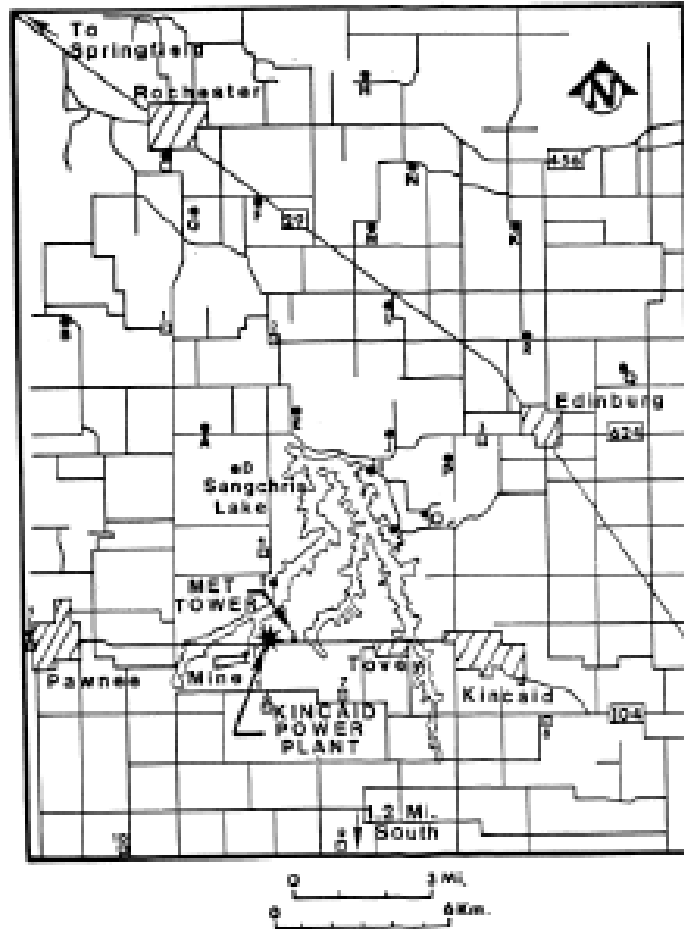


Figura 26. Área del estudio de Kincaid

Los datos de las emisiones horarias del estudio se recogen dentro de un archivo de texto que se estructura en columnas como la Tabla 25.

<i>Información horaria</i>	Q	T_s	V_s
Información en la fecha y hora de las emisión (yy-mm-dd-hh)	Tasa de emisión del contaminante en g/s	Temperatura de emisión del contaminante en K	Velocidad de emisiones de los gases contaminantes en m/s

Tabla 25. Campos de las emisiones del set de validación



La información meteorológica se presenta en el formato que utiliza ISC3, basado en el formato ASCII [33] de forma secuencial. Esta información se recoge dentro de un archivo de texto con extensión “.MET” estructurado de acuerdo a la Tabla 26.

<i>Variable</i>	<i>Columna</i>
Año (últimos dos dígitos)	1-2
Mes	3-4
Día	5-6
Hora	7-8
Dirección del viento (°)	9-17
Velocidad del viento (m/s)*	18-26
Temperatura ambiente (K)	27-32
Clase de estabilidad (A=1, B=2,...F=6)	33-34
Altura de mezcla rural (m)	35-41
Altura de mezcla urbana (m)	42-48
Exponente del perfil de viento	49-56
Gradiente potencial vertical de temperatura (K/m)	57-65
Velocidad de fricción (m/s)	66-74
Longitud de Monin-Obukhov (m)	75-84
Longitud de la superficie rugosa (m)	85-92
Código de precipitación	93-96
Precipitación (mm/hora)	97-103

Tabla 26. Formato de la información meteorológica ISC3

*Las horas de calma se identifican en los archivos de datos meteorológicos ASCII con una velocidad del viento de 0.0 m/s y dirección del viento igual a la hora anterior.



Las ubicaciones de los 28 sensores del estudio se presentan en la Tabla 27. Ubicaciones de las estaciones de medición del estudio Tabla 27.

<i>Número</i>	<i>X[m]</i>	<i>Y[m]</i>	<i>Número</i>	<i>X[m]</i>	<i>Y[m]</i>
1	83700	392390	15	91100	389420
2	78890	396510	16	91970	391420
3	82570	402050	17	97780	394320
4	84480	391050	18	94670	395320
5	86570	393030	19	89800	388550
6	85690	400340	20	85820	386950
7	83240	399720	21	82180	396050
8	89400	404320	22	86150	395680
9	88900	390950	23	92980	391850
10	89930	392270	24	77400	385400
11	94390	399230	25	85180	382900
12	90000	396650	26	87850	382950
13	89390	399290	27	87750	376020
14	90840	401350	28	80600	377880

Tabla 27. Ubicaciones de las estaciones de medición del estudio

4.3.2 VALIDACIÓN CON RESULTADOS DEL PROGRAMA ISC3

La otra validación que se ha realizado ha sido comparando los resultados del programa ISC3, que es un software desarrollado por la EPA perfectamente validado, con los resultados del programa desarrollado en este proyecto, en el cálculo de la concentración de contaminante en unas condiciones climatológicas y condiciones de la fuente de emisión determinadas.



En esta validación además de los resultados de las concentraciones, se pueden comparar los parámetros internos del programa como el cálculo de las desviaciones estándar de dispersión (σ_y y σ_z), o la altura efectiva de la pluma (H) de los gases contaminantes (que no es la misma que la altura de la chimenea por el efecto de las condiciones de velocidad y temperatura de los gases que producen una sobreelevación).

Las condiciones tanto climatológicas como de la fuente de emisión del contaminante que se han utilizado como datos de entrada para calcular las concentraciones en ambos programas se recogen en la Tabla 28.

Datos de entrada del programa (Inputs)

Condiciones atmosféricas

<i>Parámetro</i>	<i>Unidades</i>	<i>Valor</i>
Temperatura	K	291.48
Clase de estabilidad	Pasquill	B
Velocidad del viento	m/s	2.5
Altura de medida de la velocidad	m	10
Altura de la capa de mezcla	m	3000

Condiciones de la fuente de emisión

Velocidad de salida de los gases	m/s	12.2
Diámetro chimenea	m	3.81
Altura chimenea	m	68.58
Temperatura de emisión	K	394.3
Tasa de emisión	g/s	47.25

Tabla 28. Inputs utilizados en la validación tanto para el ISC3 como el programa desarrollado



4.4 CLASE MODELO

El modelo gaussiano, con todas sus ecuaciones y estimaciones de parámetros, dentro de la programación orientada a objetos con la que se ha desarrollado el software, se encuentran dentro de una clase denominada `Modelo`. Esta clase tiene los elementos que se enumeran en la Tabla 29.

<i>Clase</i>	Modelo
<i>Propiedades</i>	datosentrada m
<i>Métodos</i>	Modelo calcularConcentración calculaSigmaY calculaSigmaZ

Tabla 29. Elementos de la clase Modelo

Las propiedades de la clase Modelo son únicamente dos:

- datosentrada: es una propiedad de la clase `DatosEntrada` (sección 3.8) que contiene todos los inputs que necesita el modelo para calcular la concentración.
- m: es una propiedad que se refiere al número de términos que se consideran en la sumatorio a la hora de calcular la dispersión provocada por efecto de la altura de la capa de mezcla (Ecuación 14).



La clase `Modelo` cuenta con los métodos de la Tabla 30.

<i>Método</i>	<code>Modelo</code>
<i>Descripción</i>	Es el constructor de la clase <code>Modelo</code> a partir de los datos de entrada del modelo.
<i>Inputs</i>	<code>datosentrada</code> Son los datos de entrada del modelo (clase <code>DatosEntrada</code>)
<i>Outputs</i>	-
<i>Método</i>	<code>calcularConcentración</code>
<i>Descripción</i>	Calcula la concentración del contaminante en el punto de coordenadas (x,y,z) a partir del modelo gaussiano de dispersión atmosférica
<i>Inputs</i>	<code>x</code> Distancia en la dirección del viento hasta la fuente [m]
	<code>y</code> Distancia horizontal perpendicular al viento [m]
	<code>z</code> Altura desde el nivel del suelo [m]
<i>Outputs</i>	<code>C</code> Concentración del contaminante en (x, y, z) en g/m ³ .
<i>Método</i>	<code>calculaSigmaY</code>
<i>Descripción</i>	Este método calcula el parámetro del modelo de desviación estándar horizontal (σ_y) a partir de la clase de estabilidad atmosférica y la distancia hasta la fuente (x) con las ecuaciones de McMullen.
<i>Inputs</i>	<code>x</code> Distancia en la dirección del viento hasta la fuente [m]
<i>Outputs</i>	<code>sigmaY</code> Desviación estándar horizontal [m]
<i>Método</i>	<code>calculaSigmaZ</code>
<i>Descripción</i>	Este método calcula el parámetro del modelo de desviación estándar vertical (σ_z) a partir de la clase de estabilidad atmosférica y la distancia hasta la fuente (x) con las ecuaciones de McMullen.
<i>Inputs</i>	<code>x</code> Distancia en la dirección del viento hasta la fuente [m]
<i>Outputs</i>	<code>sigmaZ</code> Desviación estándar vertical [m]

Tabla 30. Métodos de la clase `Modelo`



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL



Capítulo 5 INTERFAZ DE USUARIO

La interfaz de usuario (UI) es el medio que utiliza el usuario para comunicarse con un equipo, dispositivo o programa. Esta interfaz ha de ser lo más sencilla y fácil de entender/accionar posible, pero esto en ocasiones no es posible, dependiendo de la complejidad de lo que está detrás. A lo largo de este capítulo, se expone el desarrollo que se ha realizado de la interfaz de usuario del programa.



5.1 GUIDE DE MATLAB

GUIDE es un entorno de programación visual (Figura 27) que ofrece el software de MATLAB para poder desarrollar una interfaz gráfica de usuario, GUI (*Graphic User Interface*) que permite la ejecución y el ingreso de datos de un programa de forma sencilla. Este entorno tiene las características básicas de todos los programas visuales como *Visual Basic* o *Visual C++*.

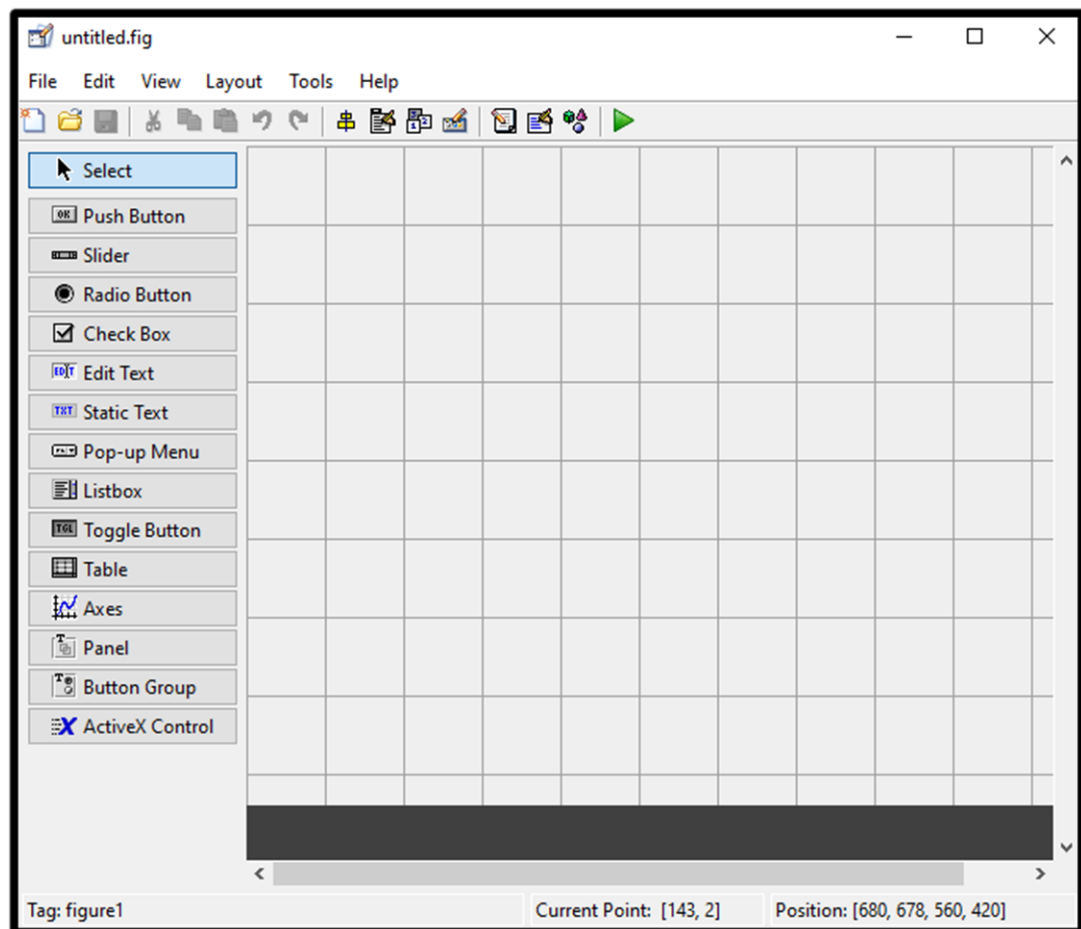


Figura 27. Entorno de diseño de GUIDE Matlab



GUIDE cuanta con diferentes componentes que se pueden incluir en la interfaz gráfica, como se muestra junto a su descripción, en la Tabla 31.

<i>Componente</i>	<i>Valor de estilo</i>	<i>Descripción</i>
Check box	'checkbox'	Indica el estado de una opción o atributo
Editable text	'edit'	Caja que permite editar texto
Pop-up menu	'popupmenu'	Muestra una lista desplegable con opciones
List Box	'listbox'	Muestra una lista de opciones deslizable
Push Button	'pushbutton'	Invoca un evento inmediatamente
Radio Button	'radio'	Indica una opción que puede ser seleccionada
Toggle Button	'togglebutton'	Solo dos estados, on u off
Slider	'slider'	Representa un rango de valores seleccionado por un botón deslizable
Static text	'text'	Muestra un string de texto
Panel button		Agrupar diferentes componentes en un grupo
Button group		Agrupar varios radio button
Table	'uitable'	Inserta una tabla
Axes	'axes'	Inserta unos ejes que se puede utilizar para representar una gráfica

Tabla 31. Componentes de GUIDE

Cada elemento de GUIDE, tiene un conjunto de opciones y propiedades a las que se puede acceder y modificar como el color de fondo, la posición, la fuente empleada,... Adicionalmente a las propiedades, cada uno de los elementos colocados en la interfaz tiene unos *callbacks* asociados en el archivo *.m* que corresponde a las subrutinas que se ejecutan al realizar una determinada acción sobre el elemento en cuestión, como al editar su valor o hacerle clic.



Una aplicación GUIDE está compuesta por dos archivos, uno *.m* y otro *.fig*. El archivo *.m* contiene el código correspondiente a los elementos de control de la interfaz de usuario y el archivo *.fig* contiene los elementos gráficos de la interfaz de usuario. Cada elemento del archivo *.fig* tiene un código asociado en el archivo *.m* en el que se realizan todas las acciones programadas.

5.1.1 MANEJO DE LOS ELEMENTOS DE UNA INTERFAZ GUIDE

Todos los valores de las propiedades de los elementos y las variables transitorias del programa desarrollado con GUIDE se almacenan dentro de una estructura, *handles*, a los cuales se puede acceder mediante su identificador dentro de la estructura de *handles* como *handles.variable1* o *handles.output*. Realmente, *handles* es una superclase que puede contener todas las clases siguiendo la estructura y semántica de la clase *handles* usada en Matlab. En cualquier aplicación de GUIDE, se encuentra la siguiente sentencia, en donde *hObject* es el identificador del objeto que se está ejecutando en ese momento, de tal forma que siempre hace referencia al objeto dentro de su propio *callback*.

```
handles.output = hObject
```

handles tiene una serie de sentencias propias dentro de Matlab que permiten diversas funciones. Estas sentencias son:

- `guidata (hObject, handles)`: esta función guarda las variables y propiedades de los elementos en la estructura de datos de la aplicación (*handles*), por lo que en cada subrutina del programa se tiene que terminar con esta sentencia.



- `get(handles.[nombrecomponente], 'Value')`: esta sentencia permite obtener los valores de los componentes de la interfaz gráfica.
- `set(handles.[nombrecomponente], 'String', string1)`: esta sentencia permite asignar el valor a los componentes de la interfaz gráfica. En la sentencia es necesario indicar el tipo de variable (*String*) que se desea asignar así como el nombre de la variable (*string1*).

5.2 INTERFAZ DE USUARIO DEL PROGRAMA

La interfaz de usuario desarrollada para este proyecto tiene como objetivo facilitar al usuario introducir los datos del programa así como para mostrar los resultados de una forma sencilla e interpretable. La interfaz gráfica de usuario del programa desarrollada con GUIDE de Matlab se muestra en la Figura 28.

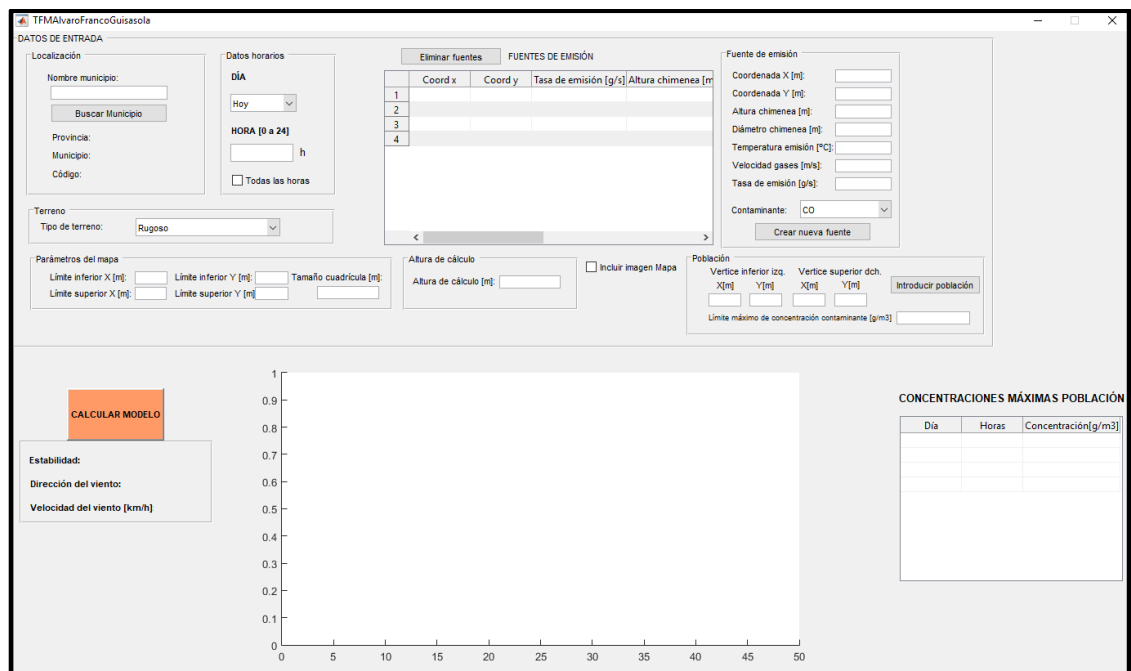


Figura 28. Interfaz gráfica de usuario del programa



5.2.1 DATOS DE ENTRADA (INPUTS)

En esta sección, se expone los diferentes datos que tiene que introducir el usuario para la ejecución del programa, incluyendo el tratamiento que hace el programa con estos datos para poder utilizar el modelo de dispersión atmosférica.

Localización

El usuario tiene que introducir el nombre del municipio en que se localiza el emplazamiento de las fuentes de emisión que se desean simular con el programa. El municipio tiene que introducirse en el programa para poder obtener la predicción meteorológica de dicho municipio de la API de AEMET para poder ser utilizada posteriormente en el modelo de dispersión atmosférico. El nombre del municipio se introduce en la interfaz en una caja de edición de texto (*edit*). Una vez introducido el nombre del municipio, el usuario tiene que hacer clic en el *push button* de Buscar Municipio para que el programa obtenga la información meteorológica (Figura 29).

The image shows a software interface window titled "Localización". It contains the following elements from top to bottom: a label "Nombre municipio:" followed by a text input field; a button labeled "Buscar Municipio"; a label "Provincia:"; a label "Municipio:"; and a label "Código:".

Figura 29. Interfaz: Datos de localización.

Una vez el programa ha obtenido la predicción meteorológica con éxito, los *static text* de la interfaz se completan con el nombre de la provincia en la que se encuentra el municipio, el nombre del municipio y el código de municipio.

El proceso que sigue el programa para obtener la predicción meteorológica del municipio introducido es el siguiente:

- Se busca el nombre del municipio en un documento Excel con el nombre de '18codmun.xlsx' que contiene todos los municipios del territorio español que figuran en el Instituto Nacional de Estadística (INE) junto a sus códigos de municipio. Si el nombre del municipio es correcto y se encuentra entre los municipios de España, el programa obtiene del documento el código de municipio asociado a ese municipio (Figura 30). Si por el contrario, el municipio que introduce el usuario no existe, el programa devuelve un mensaje de error (Figura 31).

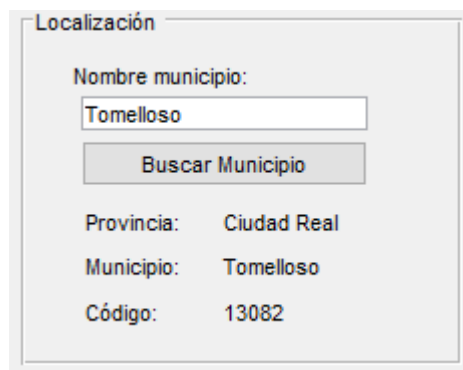


Figura 30. Ejecución del programa cuando el municipio es correcto

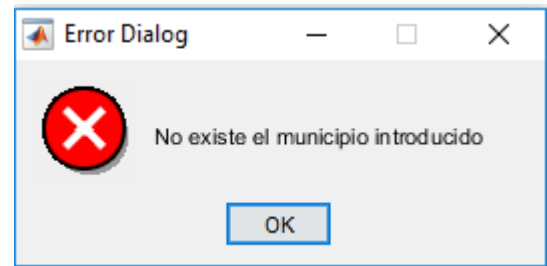


Figura 31. Mensaje de error al introducir un municipio incorrectamente

- Una vez se ha obtenido el código del municipio, el programa lee de la API de AEMET la predicción meteorológica del municipio (método *obtenerPredMun* de la clase *Api*) utilizando el código de municipio como input.
- El programa obtiene todas las estaciones meteorológicas de AEMET (método *obtenerEstaciones*), para buscar entre éstas, una que se encuentre en la misma provincia del municipio. Una vez encontrada la estación meteorológica, se utiliza el identificador de la estación como dato de entrada



para extraer de la API de AEMET los valores climatológicos normales registrados por la estación (método *obtenerValClimNorm*).

- Se almacenan la predicción meteorológica y los valores climatológicos normales dentro de la estructura *handles*.

Datos horarios

El usuario tiene que especificar la hora y el día para los que se desea predecir los valores de la concentración de contaminante. En la interfaz de usuario (Figura 32), el día se introduce en un *pop-up menu* que tiene las opciones de los tres días a los que alcanza la predicción meteorológica de AEMET (hoy, mañana y pasado mañana) y la hora en una caja de edición de texto (*edit*) como un valor entre 0 y 24, mostrando un mensaje de error en el caso de introducir cualquier otro valor. También se incluye la opción de seleccionar llevar a cabo una simulación de la contaminación a lo largo de todas las horas de los tres días, cuando se tiene activada la *check box* de Todas las horas.

Datos horarios

DÍA

Hoy

HORA [0 a 24]

h

Todas las horas

Figura 32. Interfaz: Datos horarios

Estos datos permiten especificar el día y período horario de la predicción meteorológica, y determinar si es de día o de noche que es un parámetro fundamental a la hora determinar la clase de estabilidad atmosférica.



Datos de la fuente de emisión

Unos de los datos fundamentales para un modelo de dispersión atmosférica de gases contaminantes son los datos relativos a la fuente de emisión. En la interfaz de usuario (Figura 33), se pueden introducir una o varias fuentes de emisión con sus características. Las características de cada fuente de emisión que se pueden especificar se muestran en la Tabla 32.

Figura 33. Interfaz: datos de la fuente de emisión

Característica	Componente IU	Descripción
Coordenada X	Editable Text	En coordenadas globales del mapa [m]
Coordenada Y	Editable Text	En coordenadas globales del mapa [m]
Altura chimenea	Editable Text	Altura de la chimenea [m]
Diámetro chimenea	Editable Text	Diámetro exterior de la chimenea [m]
Temperatura emisión	Editable Text	Temperatura de emisión de los gases [°C]
Velocidad gases	Editable Text	Velocidad de los gases de emisión [m/s]
Tasa de emisión	Editable Text	Tasa de emisión del contaminante [g/s]
Contaminante	Pop-up menu	Tipo de contaminante (CO, COV, SO ₂ o NO _x)

Tabla 32. Características de la fuente



Al hacer clic sobre el botón de la interfaz de *Crear Nueva Fuente*, el programa crea un objeto de la clase **Fuente** con todas las características de dicha fuente, que después se utilizarán para calcular las concentraciones que aporta cada una de las fuentes a la concentración total calculada en cada punto. Una vez creado el objeto, las características de todas las fuentes de emisión que se han ido introduciendo se muestran en la tabla de la interfaz de FUENTES DE EMISIÓN que tiene por columnas las características de la fuente.

Las fuentes de emisión introducidas por el usuario (que se muestran en la tabla) pueden eliminarse al hacer clic en el botón *Eliminar fuentes* que se encuentra en la esquina superior izquierda de la tabla.

Datos del tipo de terreno

El usuario introduce el tipo de terreno en el que se sitúan las fuentes de emisión en un *pop-up menu* (Figura 34) que tiene las opciones de ‘Rugoso’ y ‘Plano’. Este parámetro es el que se utiliza para determinar el exponente utilizado para determinar el perfil de la velocidad del viento para el cálculo del modelo (Tabla 16).

Terreno
Tipo de terreno:

Figura 34. Interfaz: datos del terreno



Parámetros del mapa

The screenshot shows a software interface titled "Parámetros del mapa". It contains several input fields and a checkbox. On the left, there are four text input fields: "Límite inferior X [m]", "Límite inferior Y [m]", "Límite superior X [m]", and "Límite superior Y [m]". To the right of these is a "Tamaño cuadrícula [m]" field. Further right is an "Altura de cálculo [m]" field. On the far right, there is a checkbox labeled "Incluir imagen Mapa".

Figura 35. Interfaz: parámetros del mapa

El modelo de dispersión atmosférica calcula la concentración del contaminante en cada punto por lo que es necesario establecer una matriz de puntos en el espacio (cuadrícula) para que el modelo evalúe la concentración en dichos puntos. El programa permite a través de la interfaz establecer una serie de parámetros que determinan la matriz de puntos que evalúa el modelo. Estos puntos son los que posteriormente se muestra su concentración en el mapa en forma de gráfico. Cada punto de la cuadrícula tiene unas coordenadas (x, y, z) . Los parámetros de los límites superior e inferior de los ejes X e Y (Figura 35) que se introducen los cuadros de texto establecen los valores máximo y mínimo que toman los ejes X e Y en la cuadrícula. El resto de los valores de la cuadrícula de puntos se calculan con el valor del parámetro *Tamaño de cuadrícula*: “ d ”, de tal forma que los valores de las coordenadas x e y se van obteniendo como incrementos de tamaño d [m]. El tamaño de cada celda de la cuadrícula es por tanto de dimensiones $d \times d$. La dirección positiva del eje Y es la dirección cardinal norte. Esta explicación se puede visualizar en la Figura 36. El dato especificado en el cuadro de texto de *Altura de cálculo* de la interfaz, establece la altura a la que se encuentra la cuadrícula con respecto a nivel del suelo en metros, y por tanto, la altura de todos los puntos que evalúa el modelo, de tal forma que si se quisiera evaluar la concentración de contaminante a nivel de suelo, habría que especificar en este campo una altura de 0.

El parámetro d (tamaño de la cuadrícula) es crítico pues su valor determina en gran medida el tiempo de ejecución del programa. Cuanto menor es el valor del parámetro, mayor resolución de concentraciones se consigue en el modelo pero a costa de aumentar enormemente el tiempo de ejecución.

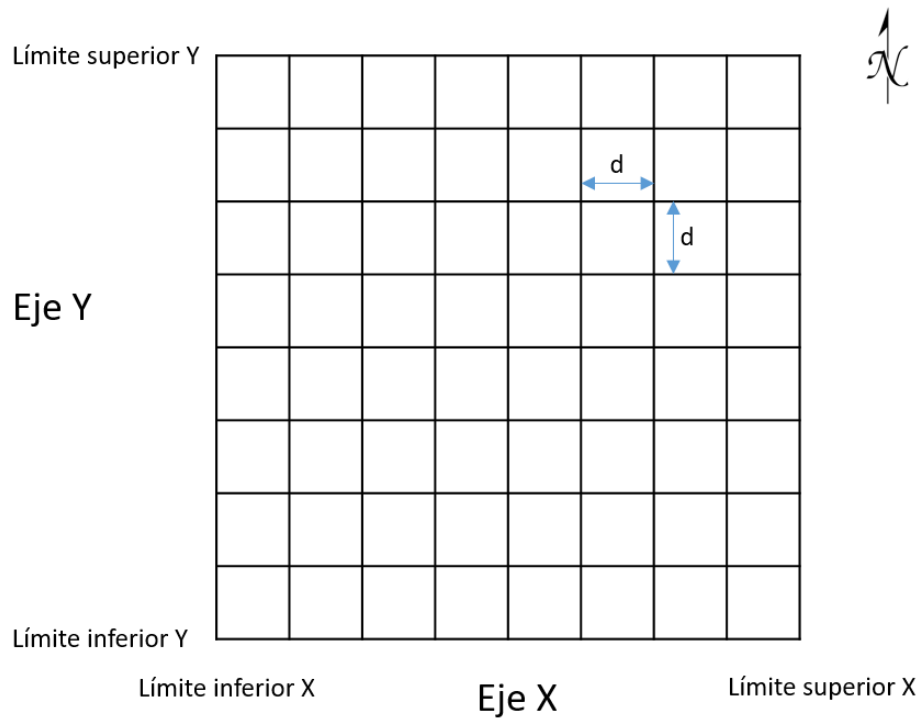


Figura 36. Configuración de la cuadrícula de puntos (Mapa)

En esta sección de la interfaz de usuario también está la opción de incluir una imagen del mapa como fondo del gráfico de concentraciones al tener activada la *check-box* de *Incluir imagen del mapa*, para facilitar la comprensión del gráfico de concentraciones. Esta imagen tiene que tener de nombre de archivo ‘Mapa.jpg’ y estar en el mismo directorio que los archivos del programa para poder incluirla en el gráfico. La imagen del mapa debe de estar orientada con dirección norte en la parte superior de la imagen para que sea válida con la información del gráfico de concentraciones. Considerando que la imagen del mapa tiene unas dimensiones de $a \times b$ metros, es importante tener en cuenta estas dimensiones a la hora de fijar los límites del mapa (si el mapa mide en horizontal 5000 metros, una opción sería especificar el límite inferior del eje X en 0 y el límite superior en 5000 metros o bien -2500m como límite inferior y 2500 como límite superior).



Datos de la población

Una de las opciones que ofrece el programa es incluir una población en la que evaluar los valores de concentración del contaminante. Los parámetros que se especifican en la interfaz de usuario son la posición de la población en el mapa. Al considerarse la población un rectángulo, su posición está determinada por las coordenadas (x, y) del vértice inferior izquierdo y el vértice superior derecho (Figura 37).

The screenshot shows a window titled 'Población'. It contains two columns of input fields. The first column is labeled 'Vertice inferior izq.' and has two sub-labels: 'X[m]' and 'Y[m]'. The second column is labeled 'Vertice superior dch.' and also has two sub-labels: 'X[m]' and 'Y[m]'. Below these columns is a single input field labeled 'Límite máximo de concentración contaminante [g/m3]'. To the right of the coordinate fields is a button labeled 'Introducir población'.

Figura 37. Interfaz: datos de la población

Otro de los parámetros que especifica el usuario, es el límite máximo de concentración del contaminante (en unidades de g/m^3) que puede alcanzarse dentro de los límites de la población. En el caso de que la concentración de contaminante en la población sea mayor que el límite establecido, esto se reflejará en la tabla de concentraciones máximas de la población (sección **¡Error! No se encuentra el rigen de la referencia.**).



5.2.2 SALIDAS DEL PROGRAMA (OUTPUTS)

Una vez especificados todos los datos de entrada del modelo por el usuario, que se explican en la sección anterior, el usuario puede hacer clic sobre el *push button* de *Calcular modelo*, para comenzar los cálculos del programa para determinar los valores de concentración del contaminante en cada uno de los puntos del mapa. La ejecución de esta parte del programa del cálculo del modelo consume bastante tiempo, dependiendo del número de puntos en los que se tiene que evaluar la concentración y del número de fuentes.

Una vez terminados los cálculos, los resultados del programa se muestran en la interfaz de usuario en un mapa de concentraciones y en una tabla que muestra las concentraciones máximas en la población. Adicionalmente se generan una serie de archivos *.mat* que contienen los valores de concentración calculados en cada uno de los puntos.

Mapa de concentraciones

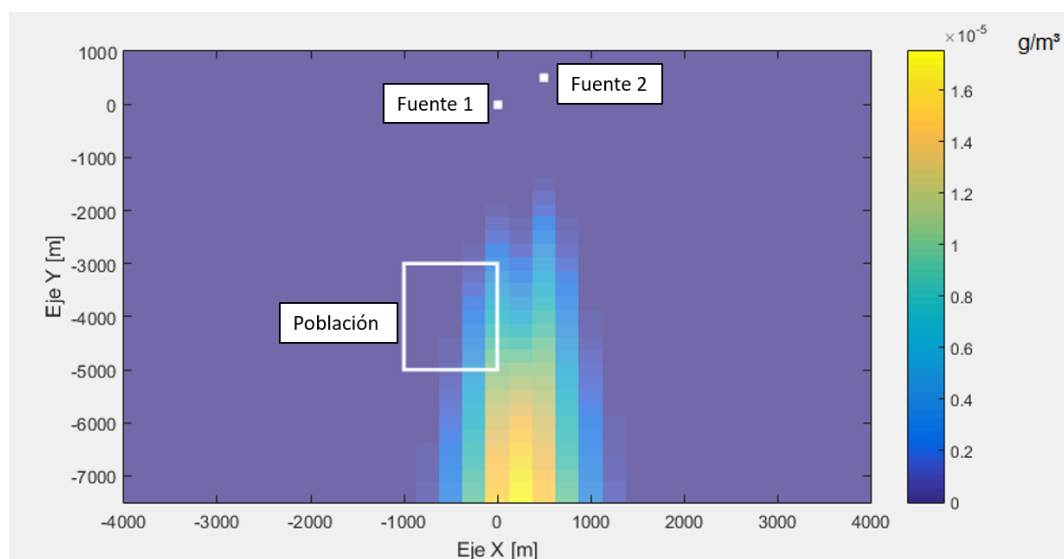


Figura 38. Interfaz: mapa de concentraciones



Como se muestra en la Figura 38, los valores de las concentraciones se muestran en un mapa en el que el color de cada píxel (que se corresponde con un punto para el que se ha calculado la concentración) representa el valor de la concentración del contaminante en ese punto del mapa. La leyenda del rango de valores de concentración y los colores asociados a cada valor se muestra en la barra colocada a la derecha del mapa en unidades de g/m^3 . La población aparece representada como un rectángulo blanco (etiqueta Población en la figura) y cada una de las fuentes de emisión del contaminante como un punto blanco (etiqueta Fuente 1 y Fuente 2 en la figura). El gráfico además incluye los ejes X e Y con sus unidades en metros.

Información meteorológica

Las variables meteorológicas de la situación que se refleja en el Mapa de concentraciones aparecen a la izquierda en la interfaz de usuario, incluyendo la clase de estabilidad de Pasquill que se ha determinado en esas condiciones meteorológicas, la dirección y la velocidad del viento (Figura 39).

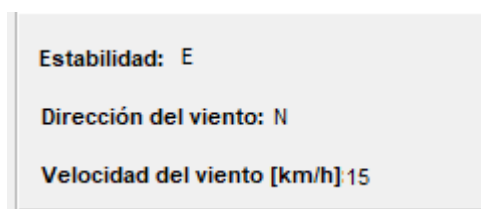


Figura 39. Interfaz: información meteorológica

Concentraciones máximas en la población

Los valores de las concentraciones de contaminante máximas en la población que se ha definido para cada intervalo horario se recogen en una tabla que contiene tres columnas: Día, Horas y Concentración [g/m^3]. Esta tabla se presenta en la Figura 40.



CONCENTRACIONES MÁXIMAS POBLACIÓN

Día	Horas	Concentración[g/r]
2018-07-14	18:00-24:00	0.000000e+00
2018-07-15	00:00-06:00	0.000000e+00
2018-07-15	06:00-12:00	0.000000e+00
2018-07-15	12:00-18:00	0.000000e+00
2018-07-15	18:00-24:00	0.000000e+00
2018-07-16	00:00-06:00	0.000000e+00
2018-07-16	06:00-12:00	0.000000e+00
2018-07-16	12:00-18:00	2.246424e-05
2018-07-16	18:00-24:00	1.045586e-05

Figura 40. Interfaz: tabla de concentraciones máximas de la población

Las celdas que contienen el valor de concentración máxima alcanzada en la población, aparecen de color verde si no superan el límite máximo de concentración de contaminante establecido como dato de entrada (input) y de color rojo en el caso de que se exceda dicho límite para facilitar la interpretación de los valores de la tabla.

Archivos de resultados

Los resultados numéricos del modelo se almacenan en forma de matriz en dos archivos generados automáticamente por la ejecución del programa, uno denominado *concentraciones.mat* que contiene los valores de concentración del contaminante en todos los puntos calculados y el archivo *concentraciones_poblacion.mat* que contiene los valores de concentración de los puntos que se encuentran dentro de los límites definidos de la población. Ambos archivos presentan la misma estructura en que cada fila es un punto para el que se ha calculado la concentración y cada columna representa un parámetro del punto. Esta estructura se define en la Tabla 33.



<i>Columna</i>	<i>Descripción</i>
1	Coordenada global X del punto [m]
2	Coordenada global Y del punto [m]
3	Coordenada global Z del punto [m]
4 a <i>n-1</i>	Concentraciones del contaminante producida por cada una de las fuentes de emisión
<i>n</i>	Concentración total del contaminante en el punto (x,y,z)

Tabla 33. Estructura de los archivos de resultados

5.3 TRATAMIENTO DE VARIAS FUENTES DE EMISIÓN

El programa permite introducir más de una fuente de emisión de contaminante como dato de entrada del modelo. El modelo de dispersión gaussiano utiliza un sistema de referencia relativo a la fuente y a la dirección del viento, y no absoluto. En cambio cuando se especifican las coordenadas del mapa donde se sitúan las fuentes de emisión en el programa, estas son coordenadas en un sistema de referencia distinto al que utiliza el modelo gaussiano por lo que es necesario considerar en el programa los distintos sistemas de referencia que se utilizan. Por tanto, se definen tantos sistemas de referencia relativos como fuentes de emisión se introduzcan en el modelo y un solo sistema de referencia global (el del mapa donde se encuentra la población, los ejes del gráfico y las fuentes) en el que están especificadas las coordenadas de la fuente. Al tener dentro del modelo tantos sistemas de referencia, se hace necesario definir matrices de translación y rotación para cada uno de los sistemas de referencia de cada fuente. Las matrices de translación y rotación para pasar de coordenadas de la fuente a coordenadas globales se construyen como:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(-udir + 90^\circ) & -\sin(-udir + 90^\circ) & 0 & x_f \\ \sin(-udir + 90^\circ) & \cos(-udir + 90^\circ) & 0 & y_f \\ 0 & 0 & 1 & z_f \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ 1 \end{bmatrix}$$



Donde:

- x, y, z : son las coordenadas de un punto en coordenadas globales (del mapa)
- x', y', z' : son las coordenadas de un punto en coordenadas de la fuente (las utilizadas por el modelo gaussiano)
- x_f, y_f, z_f : son las coordenadas de la fuente en coordenadas globales (son las coordenadas de la fuente que se definen como datos de entrada por el usuario en la interfaz).
- $udir$: dirección del viento en grados ($^{\circ}$) respecto a la dirección norte.

El inverso de la matriz de translación y rotación descrita se utiliza para pasar de coordenadas globales a coordenadas de la fuente.

Al tener que tratar con varias fuentes de emisión, cada vez que se introduce una fuente de emisión, se instancia un objeto de la clase Fuente. Dentro de las propiedades de esta clase se encuentran las matrices de translación y rotación.



Capítulo 6 RESULTADOS

En este capítulo se presentan los resultados del proyecto. Se dividen en los resultados de validación por un lado, que se obtuvieron de las dos pruebas de validación que se realizaron del programa, y en los resultados del programa por otro lado, que se obtuvieron de un ejemplo de aplicación del software.

6.1 RESULTADOS DE VALIDACIÓN

De acuerdo a las pruebas de validación del programa y del modelo que se exponen en la sección 4.3 del documento, se obtuvieron estos resultados.

6.1.1 RESULTADOS DEL ESTUDIO KINCAID

La primera prueba de validación, se realizó comparando los valores de concentración observados durante el estudio de Kincaid con los valores de concentración que calcula el modelo utilizado en este proyecto bajo las mismas condiciones meteorológicas. El estudio de Kincaid llevado a cabo por la EPA, en las que se estudió la dispersión del contaminante SO₂ (sección 4.3.1), proporciona un conjunto de datos de observación de concentración a lo largo del tiempo para diferentes horas y días, en los que las condiciones atmosféricas variaban. Este *dataset* cuenta con 169.344 muestras de concentración de SO₂, medidas en µg/m³, de las 28 estaciones de recepción ubicadas en distintos lugares, a lo largo de 6.048 horas.



Para poder comparar los valores de concentración del estudio (set de datos de validación) con los valores obtenidos por el modelo utilizado por el programa, la Agencia de Protección Medioambiental (EPA) propone que en lugar de utilizarse los valores de concentración directamente se utilicen las *robust highest concentrations* (RHC) [34] que se calculan para cada período de promediado. Este valor de concentración, RHC, se calculó tanto para los valores de concentración observados como para los valores obtenidos del modelo, con la Ecuación 16.

$$RHC = X(N) + [\bar{X} - X(N)] \cdot \ln\left(\frac{3N - 1}{2}\right)$$

Ecuación 16. Cálculo del estadístico RHC

Donde $X(N)$ es el valor mayor de las concentraciones observadas en el período de promedio (en este caso una hora), \bar{X} es el valor medio de los $N-1$ valores (excluyendo el valor máximo) y N es el número de valores de concentración que superan un valor mínimo límite.

En la Figura 41 y la Figura 42 se muestran los valores de las concentraciones (RHC) de las observaciones y calculados por el modelo para dos días distintos. Como se puede ver, el modelo utilizado se ajusta bastante bien a los valores de concentración reales (valor observación) tendiendo en la mayoría de las ocasiones a sobreestimar el valor de concentración. El modelo tiende a calcular un valor de concentración ligeramente mayor que el valor real, lo que es objetivamente mejor que subestimar dicho valor pues en la mayoría de los casos prácticos los modelos de dispersión atmosférica se utilizan para determinar valores de concentración que no deben de superar ciertos límites, como puede ser la Normativa de calidad de aire; los valores de concentración que han superado dichos límites pueden tener un valor real ligeramente mayor pero esto no supone un problema como sí ocurriría en el caso de que puedan existir valores calculados de concentración que se consideren por debajo de dichos límites cuando sus valores reales están por encima.

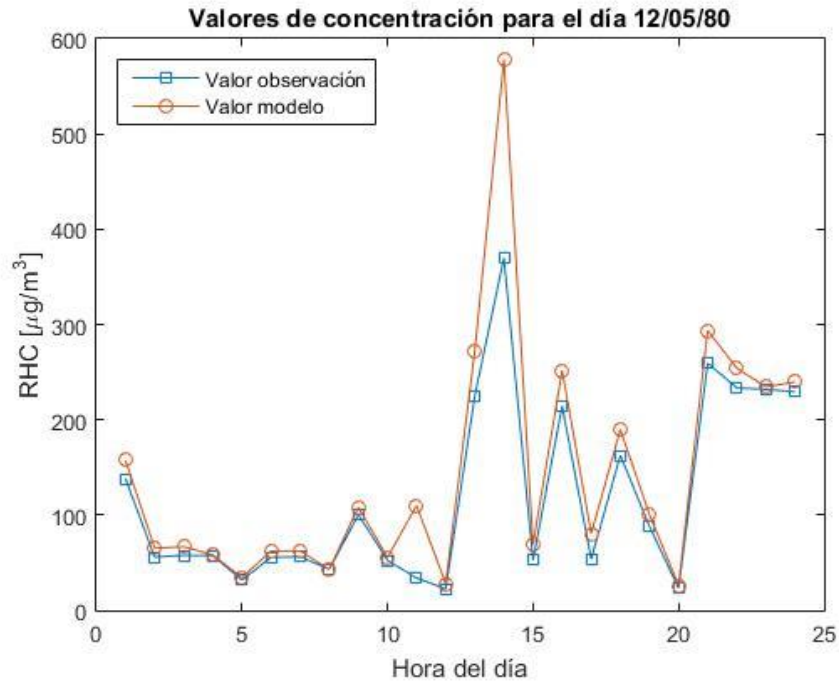


Figura 41. Comparación de los valores de RHC observados y del modelo para el día 12 de mayo de 1980 del estudio

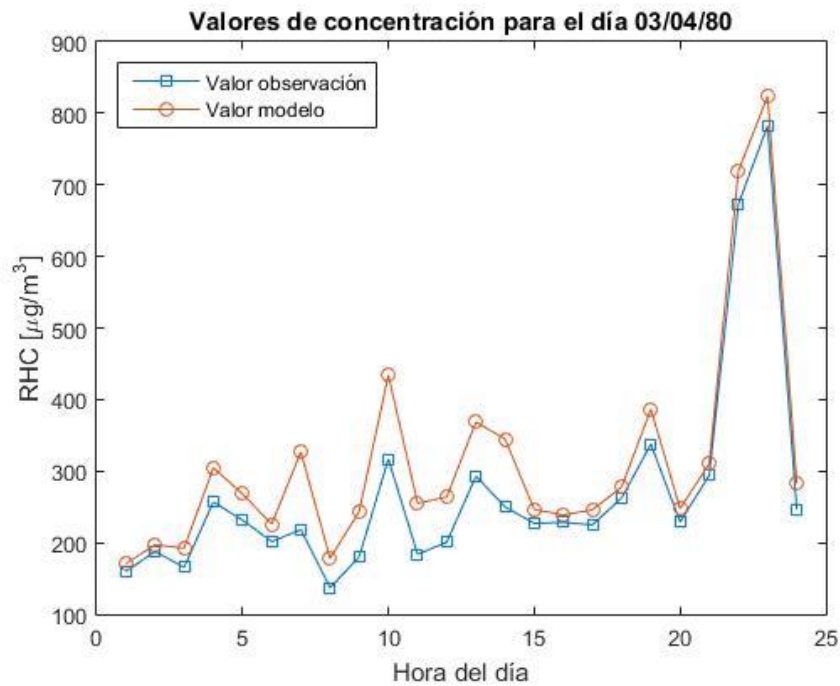


Figura 42. Comparación de los valores de RHC observados y del modelo para el día 3 de abril de 1980 del estudio



<i>Error relativo entre los resultados observados y los del modelo</i>	$\left \frac{RHC_{observado} - RHC_{modelo}}{RHC_{observado}} \right $
<i>Media</i>	34,7239%
<i>Desviación estándar (σ)</i>	47,8688%
<i>Error relativo máximo</i>	845,1617%

Tabla 34. Medidas estadísticas del error del modelo frente a los valores reales observados

Los resultados estadísticos del error que tiene el modelo se presentan en la Tabla 34. El error relativo del modelo es de un 35% aproximadamente (en media) lo que se considera un error bastante aceptable para un modelo gaussiano de dispersión atmosférica. La desviación estándar que presenta el modelo no es un valor demasiado alto, de tal forma, que la variabilidad que presenta el error del modelo no es demasiado grande lo que supone que los resultados del modelo son bastante correctos.

6.1.2 RESULTADOS CON EL PROGRAMA ISC3

La segunda prueba de validación que se ha realizado ha sido comparando los resultados del programa *ISC3*, software desarrollado por la EPA que está perfectamente validado y testado, con los resultados del programa desarrollado en este proyecto a la hora de determinar la concentración de contaminante en unas condiciones climatológicas y condiciones de la fuente de emisión determinadas, que se exponen en la sección 4.3.2. Esta prueba de validación permite además de comparar los valores de concentración de ambos, comparar los valores de variables internas del modelo como son los valores de σ_y y σ_z o de la altura efectiva de la pluma (H). Esta comparativa se ve en la Tabla 35.



x [km]	Valores de ISC3				Valores del programa desarrollado			
	Conc. [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	σ_y	σ_z	H [m]	Conc. [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	σ_y	σ_z	H [m]
0,4	0	67,683	40	299,534	0	68,2071	41,8017	236,6834
0,8	1,062	126,213	85,566	299,534	0,3226	128,4586	86,4075	333,0155
1,2	17,519	181,384	133,503	299,534	10,6001	185,2387	132,9398	333,0155
1,6	32,118	234,391	183,046	299,534	25,5066	239,7124	180,9608	333,0155
2	34,628	285,798	233,819	299,534	31,3873	292,4537	230,2193	333,0155
2,4	31,612	335,935	285,595	299,534	30,8338	343,8077	280,5484	333,0155
2,8	27,273	385,02	338,218	299,534	27,8095	394,0053	331,8279	333,0155
3,2	23,129	433,206	391,58	299,534	24,2698	443,2121	383,9662	333,0155
3,6	19,583	480,607	445,594	299,534	20,9510	491,5525	436,8910	333,0155
4	16,659	527,313	500,196	299,534	18,0644	539,1238	490,5432	333,0155

Tabla 35. Comparación entre los valores del programa ISC3 y los del programa desarrollado

De acuerdo con los resultados que se exponen en la Tabla 35, los valores que utilizan ambos modelos de las desviaciones estándar de la dispersión (σ_y y σ_z) son prácticamente idénticos; las pequeñas variaciones que aparecen son debidas a que las ecuaciones que utiliza ISC3 para determinar estas desviaciones son las correlaciones de O. Martin mientras que las que utiliza el programa desarrollado son las correlaciones de McMullen. Los valores de la altura efectiva de la pluma (H) son un valor constante para el programa ISC3 mientras que en el programa desarrollado esta altura es variable con la distancia hasta que la pluma se desarrolla completamente, aunque ambos valores son muy similares; el programa ISC3 utiliza las primeras ecuaciones de Briggs para determinar la altura de la pluma mientras que en el programa desarrollado se utilizan unas ecuaciones de Briggs posteriores utilizando el diagrama de Beychok. Los valores de las concentraciones medidas a nivel de suelo obtenidas por ambos programas, son valores muy parecidos, en los que las diferencias son probablemente provocadas por algunos parámetros distintos



como las desviaciones estándar y la altura efectiva de la pluma ya explicados y porque el programa ISC3 no incorpora a la ecuación gaussiana el término provocado por el reflejo de la altura de la capa de mezcla que sí incorpora el software desarrollado en este proyecto.

6.2 RESULTADOS DEL PROGRAMA

Con el fin de demostrar los resultados del programa desarrollado en este proyecto, se presenta en esta sección un ejemplo de aplicación del software. El ejemplo que se ha utilizado ha sido en la localización de Puertollano, municipio de la provincia de Ciudad Real, en Castilla-La Mancha. En los términos de este municipio, se sitúa un polígono industrial de grandes dimensiones en el que se encuentran diferentes industrias: petrolíferas, químicas, fabricación de materiales, etc. que emiten gases contaminantes a la atmósfera. Se han considerado para este ejemplo tres fuentes de emisión dentro del polígono industrial. Las características de estas tres fuentes, junto a todas sus características, que se recogen en la

<i>Fuente</i>	<i>Parámetro</i>	<i>Valor</i>
Fuente 1	Coordenada X [m]	5000
	Coordenada Y [m]	2000
	Altura chimenea [m]	50
	Diámetro chimenea [m]	3
	Temperatura emisión [°C]	120
	Velocidad gases [m/s]	15
	Tasa de emisión [g/s]	400
	Contaminante	SO ₂
Fuente 2	Coordenada X [m]	4500
	Coordenada Y [m]	1500
	Altura chimenea [m]	30



	Diámetro chimenea [m]	4
	Temperatura emisión [°C]	90
	Velocidad gases [m/s]	12
	Tasa de emisión [g/s]	300
	Contaminante	SO ₂
Fuente 3	Coordenada X [m]	4000
	Coordenada Y [m]	2700
	Altura chimenea [m]	45
	Diámetro chimenea [m]	4
	Temperatura emisión [°C]	150
	Velocidad gases [m/s]	10
	Tasa de emisión [g/s]	100
	Contaminante	SO ₂

Tabla 36 se han introducido como datos de entrada del programa a través de la interfaz de usuario. El mapa utilizado de la zona para mostrar el mapa de contaminación se muestra en la Figura 43, sacado de *Google Maps* con unas dimensiones de 7000 x 5000 m.

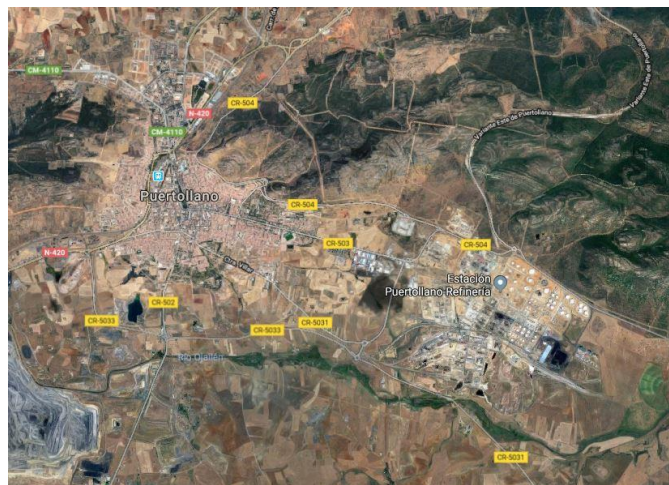


Figura 43. Mapa de la zona para el cálculo de concentraciones (Puertollano). Fuente: Google Maps



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

<i>Fuente</i>	<i>Parámetro</i>	<i>Valor</i>
Fuente 1	Coordenada X [m]	5000
	Coordenada Y [m]	2000
	Altura chimenea [m]	50
	Diámetro chimenea [m]	3
	Temperatura emisión [°C]	120
	Velocidad gases [m/s]	15
	Tasa de emisión [g/s]	400
	Contaminante	SO ₂
Fuente 2	Coordenada X [m]	4500
	Coordenada Y [m]	1500
	Altura chimenea [m]	30
	Diámetro chimenea [m]	4
	Temperatura emisión [°C]	90
	Velocidad gases [m/s]	12
	Tasa de emisión [g/s]	300
	Contaminante	SO ₂
Fuente 3	Coordenada X [m]	4000
	Coordenada Y [m]	2700
	Altura chimenea [m]	45
	Diámetro chimenea [m]	4
	Temperatura emisión [°C]	150
	Velocidad gases [m/s]	10
	Tasa de emisión [g/s]	100
	Contaminante	SO ₂

Tabla 36. Datos de entrada de las fuentes de emisión



El resto de parámetros de entrada que se utilizaron en el programa fueron:

- El cálculo de concentraciones se llevó a cabo para *Todas las horas*.
- El tipo de terreno considerado ha sido *Plano* por las condiciones del terreno que rodean el polígono industrial.
- El tamaño de la cuadrícula empleado fue de 100 metros.
- La altura de cálculo de las concentraciones fue a nivel de suelo (0 metros).
- Se incluyó la imagen de mapa de la zona (Figura 43).
- La población situada en: vértice inferior izquierdo (900,2000) m hasta vértice superior derecho en (2500,3500) m.
- El valor límite de concentración máximo del contaminante permitido en la población ha sido de $350 \mu\text{g}/\text{m}^3$, que se corresponde con el valor límite fijado por la ley [3].

Una vez introducidos todos los datos de entrada que se requieren para la ejecución del programa, se calcularon las concentraciones en cada uno de los puntos utilizando el modelo de dispersión atmosférica y se obtuvieron los valores máximos de concentración del contaminante en la población, como se puede apreciar en la Figura 44. Los valores de concentración máxima de la población que se obtuvieron del programa se resumen en la Figura 44, pues no todos los valores se pueden observar en la figura.



Día	Horas	Concentración ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Supera el límite
18 - 07 - 16	00:00 - 06:00	50,689	No
	06:00 - 12:00	806,621	Sí
	12:00 - 18:00	409,341	Sí
	18:00 - 24:00	0	No
18 - 07 - 17	00:00 - 06:00	0	No
	06:00 - 12:00	0	No
	12:00 - 18:00	0	No
	18:00 - 24:00	0	No
18 - 07 - 18	00:00 - 06:00	0	No
	06:00 - 12:00	223,642	No
	12:00 - 18:00	394,234	Sí
	18:00 - 24:00	760,301	Sí

Tabla 37. Concentraciones máximas en la población para el caso ejemplo

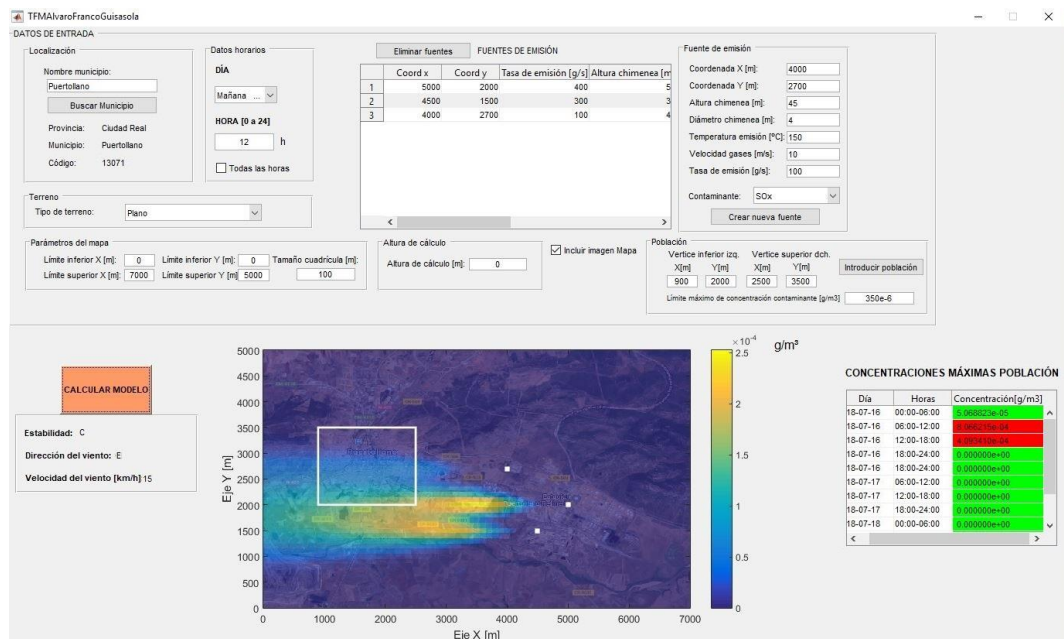


Figura 44. Ejecución del programa para el caso de ejemplo



Capítulo 7 CONCLUSIONES

Las conclusiones que se han sacado de este proyecto son:

- La utilización de la programación orientada a objetos en el desarrollo de este proyecto ha supuesto ciertas ventajas con respecto a que se hubiera llevado a cabo con una programación tradicional. Debido a la sencillez para abstraer las diferentes partes del programa y las relaciones que existen entre las estas partes, se facilita la lectura y comprensión del código del programa lo que permite solucionar los problemas del programa de forma más ágil y sencilla (*mantenibilidad*). Al dividir el programa en partes más pequeñas y compartimentadas, en clases, éstas pueden ser probadas de forma independiente y corregir los errores de cada una (*modularidad*). La facilidad de añadir, suprimir o modificar nuevos objetos permite hacer modificaciones al programa de forma sencilla sin alterar otras partes del programa (*modificabilidad*).
- La interfaz de usuario que se ha conseguido, permite introducir los datos de entrada del programa de forma sencilla, estructurada e intuitiva además de presentar los resultados de una forma clara y fácil de interpretar.
- El error del modelo que se ha obtenido con las pruebas de validación ha sido bastante pequeño, lo que ratifica la selección del modelo de dispersión gaussiano como el tipo de modelo utilizada. Hay que diferenciar por tanto el error del modelo y el error del programa en la determinación de la concentración de contaminante. El error total del programa es casi imposible de determinar pues incluye el error realizado en la predicción de las condiciones meteorológicas que al final es una cuestión de azar, la predicción puede ser muy ajustada a la realidad o bien equivocarse



complemente, lo que impide determinar claramente el error cometido en la predicción meteorológica. A este error en la predicción hay que sumar que los valores que pueden tomar las variables meteorológicas no son valores exactos sino que presentan un error de medida: la velocidad del viento se mide en intervalos de 5 km/h, la dirección del viento solo puede tomar valores cardinales (N, NO,...), etc.

- El error del modelo del programa se podría mejorar a costa de introducir más variables de entrada del programa, tanto meteorológicas como de la fuente de emisión o el terreno, lo que supone un problema pues las variables meteorológicas que se obtienen de AEMET están limitadas y no se pueden conocer valores meteorológicos más complejos además de tener que complicar la forma de introducir de los datos al programa a través de la interfaz de usuario. Estas decisiones presentan, como sucede en muchos ámbitos de la ingeniería, un compromiso entre mejorar el modelo y los datos de entrada del modelo de los que se dispone. Ante esta situación, el modelo gaussiano de dispersión atmosférico es el que mejor se ajusta a las condiciones del proyecto, pues la información meteorológica que se obtiene de la API de AEMET junto a unos sencillos datos de entrada que introduce el usuario permite calcular un valor bastante ajustado de la concentración de los contaminantes.



Capítulo 8 FUTUROS DESARROLLOS

Este proyecto deja la puerta abierta a futuros desarrollos. Los principales se presentan a continuación:

- **Mejorar la información climatológica:** como se ha expuesto, unos de los datos más importantes del modelo de dispersión atmosférico son la información meteorológica. A este respecto, una de las posibilidades es utilizar más información meteorológica además de la que se obtiene a través de la API de AEMET para aumentar la robustez de las predicciones meteorológicas. Se pueden también incorporar métodos más exactos para estimar algunas de las variables meteorológicas en el programa, como calcular la radiación solar a través de ecuaciones en lugar de tomarla directamente de los valores normales de radiación que proporciona la base de datos de las estaciones meteorológicas de AEMET.
- **Incluir las partículas en suspensión como contaminante:** los contaminantes que están contemplados dentro del programa son el monóxido de carbono (CO), el dióxido de azufre (SO₂), óxidos de nitrógeno (NO_x) y los compuestos orgánicos volátiles (COV) que se modelan de acuerdo al modelo de dispersión gaussiano, pero no las partículas en suspensión. Las partículas en suspensión, a diferencia de los otros contaminantes que están en estado gaseoso y se comportan de acuerdo a modelos de dispersión de gases, son serie de diminutos sólidos o gotas de líquido contaminantes. Estas partículas al estar en estado sólido o líquido tendrán una velocidad de caída una vez son dispersadas en la atmósfera que se modela por la ley de Stokes, que determinará la velocidad de deposición media de estas partículas en el suelo. Estos modelos, además de utilizar los datos de entrada del modelo de dispersión gaussiano, necesitan la



información relativa a las partículas contaminantes (volumen, densidad, sección y coeficiente de arrastre).

- **Efecto de terrenos complejos**: el software desarrollado permite introducir como input del modelo si el terreno es plano o rugoso, pero no permite mayores detalles del terreno, que permiten margen de mejora a la hora de calcular la concentración de los contaminantes. Cuando el terreno que se presenta no es sencillo, se utilizan correcciones del modelo que se obtienen a partir de ecuaciones empíricas que dependen de las características del terreno (desniveles, pendientes,...).
- **Incorporar la cinética de la reacción al modelo gaussiano**: el modelo gaussiano de dispersión atmosférica tiene como hipótesis que los contaminantes son no reactivos, es decir, son estables en el aire y no sufren reacciones químicas en el aire, pero esta hipótesis no siempre es válida pues en determinadas condiciones atmosféricas los contaminantes (principalmente SO_2 y NO_x) experimentan reacciones químicas que los llevan a transformarse en otras sustancias, como ácidos u otros óxidos. Estas reacciones químicas pueden ser introducidas dentro del modelo de dispersión atmosférica utilizando un factor de desintegración que tiene en cuenta el descenso de la concentración del contaminante (pues parte del contaminante reacciona químicamente con los compuestos del aire, para formar otras sustancias, lo que provoca la disminución en la cantidad de contaminante).



Capítulo 9 BIBLIOGRAFÍA

- [1] Gobierno de España, «Ley 26/2007 de 23 de octubre de Responsabilidad Medioambiental,» [En línea]. Available: <https://www.boe.es/boe/dias/2007/10/24/pdfs/A43229-43250.pdf>.
- [2] Gobierno de España, «BOE 2090/2008,» [En línea]. Available: <https://www.boe.es/boe/dias/2008/12/23/pdfs/A51626-51646.pdf>.
- [3] Parlamento Europeo y Consejo, «Directiva 2008/50/CE,» [En línea]. Available: http://www.mapama.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/atmosfera-y-calidad-del-aire/Directiva%202008-50-CE_calidad%20del%20aire_tcm30-187869.pdf.
- [4] Gobierno de España, «Real Decreto 815/2013, de 18 de octubre, Reglamento de emisiones industriales,» [En línea]. Available: <https://www.boe.es/boe/dias/2013/10/19/pdfs/BOE-A-2013-10949.pdf>.
- [5] Secretaría de Estado de Medioambiente del Gobierno de España, «Análisis de herramientas de evaluación de la difusión y comportamiento de agentes químicos en el marco de la normativa de responsabilidad medioambiental».
- [6] CIEMAT, [En línea]. Available: <http://www.ciemat.es>.
- [7] D. G. y. M. Shaw, An introduction to Software Architecture.
- [8] Wikipedia, «Diagrama de clases,» [En línea]. Available: https://es.wikipedia.org/wiki/Diagrama_de_clases.
- [9] Ministerio de Agricultura, Alimentación y Medio Ambiente, «<http://www.boe.es/boe/dias/2016/01/05/pdfs/BOE-A-2016-111.pdf>,»



- Martes 5 enero 2016. [En línea]. Available:
<http://www.boe.es/boe/dias/2016/01/05/pdfs/BOE-A-2016-111.pdf>.
- [10] «Definition API,» [En línea]. Available:
<https://www.definition.net/define/api>.
- [11] The Mathworks Inc, «Documentacion webread,» [En línea]. Available:
<https://es.mathworks.com/help/matlab/ref/webread.html#bue6guid-options>.
- [12] The MathWorks Inc, «Documentación weboptions,» [En línea]. Available:
<https://es.mathworks.com/help/matlab/ref/weboptions.html>.
- [13] Instituto Nacional de Estadística (INE), «Códigos de municipio,» [En línea]. Available: <http://www.ine.es/daco/daco42/codmun/codmunmapa.htm>.
- [14] Estándar HTTP, «Estándar HTTP RFC2616,» [En línea]. Available:
<https://www.w3.org/Protocols/rfc2616/rfc2616.html>.
- [15] R. Drake, *Mathematical Models for Atmospheric Pollutants*, 1979.
- [16] D. Turner, *Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates*, 1970.
- [17] F. Pasquill, *The Estimation of the Dispersion of Windborne Material*, 1961.
- [18] F. A. Gifford, *Use of Routine Meteorological Observation for Estimating Atmospheric Dispersion*, 1961.
- [19] D. Mtuszko, «Influence of the extent and genera of cloud cover on solar,» *INTERNATIONAL JOURNAL OF CLIMATOLOGY*, 2011.
- [20] Agencia Estatal de Meteorología AEMET, *Manual de uso de términos meteorológicos*, 2015.
- [21] J. E. C. y. H. Moses, «The Validity of Several Plume Rise Formulas,» *Journal of the Air Pollution Control Association*, 1969.
- [22] S. B. C. y. W. C. C. Fred W. Thomas, «Plume Rise Estimates for Electric Generating Stations,» *Journal of the Air Pollution Control Association*, 1970.
-



- [23] G. A. Briggs, «Plume rise,» *USAEC Critical Review Series*, 1969.
- [24] EPA, «weblakes: ISC3 Plume Rise Equations,» [En línea]. Available: https://www.weblakes.com/guides/iscst3/section6/6_1_4.html.
- [25] G. A. Briggs, «Some recent analyses of plume rise observation,» *Proc. Second Internat'l. Clean Air Congress, Academic Press*, 1971.
- [26] G. A. Briggs, «Discussion: chimney plumes in neutral and stable surroundings,» *Atmospheric Environment*, 1972.
- [27] M. R. Beychok, *Fundamentals of Stack Gas Dispersion*, 2005.
- [28] M. S. G. A. R. R. y. R. S. M. Leonor Turtós Carbonell, «Estimación de la altura de la capa de mezcla en Casablanca a partir de parametrizaciones en superficie,» 2013.
- [29] M. C. A. P. y. A. G. E. P. Vergara, «Estudio de Dispersión de Contaminantes en la Atmósfera: una Propuesta Metodológica,» 2008.
- [30] U. S. E. P. Agency, «EPA, official website of the United States Government,» [En línea]. Available: <https://www.epa.gov/>.
- [31] R. W. McMullen, «The Change of Concentration Standard Deviations with Distance,» *Journal of the Air Pollution Control Association*, 1975.
- [32] EPA, «EPA Air Dispersion Models,» [En línea]. Available: <https://www.epa.gov/scram/air-quality-dispersion-modeling-preferred-and-recommended-models#aermod>.
- [33] EPA, «Manual de usuario de ISC3,» [En línea]. Available: <https://www3.epa.gov/scram001/userg/regmod/isc3v1.pdf>.
- [34] EPA, «AERMOD Model Formulation and Evaluation,» [En línea]. Available: https://www3.epa.gov/ttn/scram/models/aermod/aermod_mfed.pdf.
-



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL



Parte II PRESUPUESTO



UNIVERSIDAD PONTIFICIA COMILLAS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)
INGENIERO INDUSTRIAL

Presupuesto



Capítulo 1 MEDICIONES

En este capítulo se establecerán las mediciones del presupuesto, es decir, la cantidad de recursos empleados.

HERRAMIENTAS y SOFTWARE

PROGRAMA	HORAS DE PROYECTO	HORAS DE USO AL AÑO
Ordenador	400	800
Matlab/Simulink	280	1000
Microsoft Office	70	800

Tabla 38: Mediciones de las herramientas y software

MANO DE OBRA

ACTIVIDAD	HORAS
Documentación	50
Diseño del programa	100
Programación	100
Pruebas de validación	80
Elaboración de la documentación	60

Tabla 39: Mediciones de la mano de obra



Capítulo 2 PRECIO UNITARIO

En este capítulo se listan los precios unitarios de cada uno de los elementos de las mediciones.

<i>HERRAMIENTAS y SOFTWARE</i>	
COMPONENTE	PRECIO (€/Ud)
Ordenador	700,00
Matlab/Simulink	6000,00
Microsoft Office	280,00

Tabla 40: Precio unitario de las herramientas y el software

<i>MANO DE OBRA</i>	
ACTIVIDAD	PRECIO (€/hora)
Documentación	25,00
Diseño del programa	50,00
Programación	40,00
Pruebas de validación	50,00
Elaboración de la documentación	30,00

Tabla 41: Precio por hora de mano de obra



Capítulo 3 SUMAS PARCIALES

En este capítulo se calcula el coste de cada uno de los distintos recursos empleados, es decir, se multiplican las mediciones por los precios unitarios. Suponemos un tiempo de amortización a 5 años de forma que la tasa de amortización es (20%).

<i>HERRAMIENTAS Y SOFTWARE</i>					
COMPONENTE	PRECIO (€)	HORAS DE PROYECTO	HORAS DE USO AL AÑO	AMORTIZACIÓN ANUAL	COSTE TOTAL (€)
Ordenador	700,00	400	800	20%	70,00
Matlab/Simulink	6000,00	280	1000	20%	336,00
Microsoft Office	280,00	70	800	20%	4,90
TOTAL					410,90€

Tabla 42: Coste total de las herramientas y software

<i>MANO DE OBRA</i>			
TAREA	PRECIO (€/hora)	HORAS	COSTE TOTAL
Documentación	25,00	50	1250,00
Diseño del programa	50,00	100	5000,00
Programación	40,00	100	4000,00
Pruebas de validación	50,00	80	4000,00
Elaboración de la documentación	30,00	60	1800,00
TOTAL			16050,00 €

Tabla 43: Coste total de mano de obra directa



Capítulo 4 PRESUPUESTO GENERAL

El presupuesto general del proyecto asciende a la suma de todas las sumas parciales.

<i>PRESUPUESTO GENERAL</i>	
APARTADO	SUMA PARCIAL (€)
Herramientas y Software	410,90
Mano de obra	16.050,00
TOTAL	16.460,90 €

Tabla 44: Presupuesto general