



**MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN DE MATERIAL PARTICULADO EN ZONA
MINERA DEL CESAR, COLOMBIA, USANDO FLUENT (CFD).**

DANIEL FERNANDO PRATO SÁNCHEZ

**UNIVERSIDAD EAN
FACULTAD DE INGENIERÍA,
PROGRAMA DE INGENIERÍA AMBIENTAL
BOGOTÁ D.C.
2012**

**MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN DE MATERIAL PARTICULADO EN ZONA
MINERA DEL CESAR, COLOMBIA, USANDO FLUENT (CFD).**

DANIEL FERNANDO PRATO SÁNCHEZ

**Trabajo de grado presentado como cumplimiento parcial de los requisitos
para obtener el título de profesional en Ingeniería Ambiental**

Director:

Dr. JOSE IGNACIO HUERTAS CARDOZO

Asesor:

JUAN FELIPE FRANCO

**UNIVERSIDAD EAN
FACULTAD DE INGENIERÍA,
PROGRAMA DE INGENIERÍA AMBIENTAL
BOGOTÁ D.C.
2012**

Nota de aceptación:

Firma del Presidente del Jurado

Firma del Jurado

Firma del Jurado

Bogotá, 10 de Julio de 2012

DEDICATORIA

Gandhi dijo:

“Nosotros debemos ser el cambio que queremos ver en el mundo”

Yo siempre he tenido la idea de que se puede cambiar la forma en que vivimos; el mundo necesita personas que marquen la diferencia, que vayan más allá de los límites, que se esfuercen por alcanzar lo inalcanzable y que quieran construir un mejor presente; yo siempre he soñado con cambiar el mundo con el único propósito de mostrar que hay un camino diferente, que con ayuda de Dios y el esfuerzo propio se pueden alcanzar metas que no se han alcanzado nunca antes.

A Dios debo mi vida, mi familia, mi profesión y todo lo bueno que me rodea. Es por eso que a él quiero dedicar este trabajo, el primero de muchos que espero terminar para contribuir con mi profesión y con mi testimonio a la construcción de un mundo mejor.

Termino resaltando que Dios es mi mayor motivación para seguir en este camino que como ya dije, apenas empieza y a él agradeceré eternamente lo que ha hecho por mí.

AGRADECIMIENTOS

- ✓ **Madre:** Por creer en mí y darme las oportunidades que me has dado, debo decir que te admiro profundamente y que valoro todo el esfuerzo que has hecho por mí durante todos estos años.
- ✓ **Familia:** Tíos que considero padres, padre, hermanos, primos; ustedes han sido parte fundamental de mi proceso de formación, sin su apoyo y dirección no sería quien hoy soy.
- ✓ **Vestigium:** Para mí es muy satisfactorio saber que encontré un grupo de personas que se unieron con un objetivo común: sembrar un proyecto de vida; ustedes son ejemplo de esfuerzo y dedicación y estoy muy orgulloso de trabajar, compartir y vivir junto a ustedes esta experiencia que día a día marca mi vida.
- ✓ **Profesores:** Eduardo Ramírez, Dra. Elizabeth León, Dr. José I. Huertas; a ustedes debo gran parte de mi formación como profesional, gracias por darme su instrucción, por guiarme y por su dedicación; gracias a eso hoy sé para donde voy y gracias a ustedes me enamoré de mi profesión y de lo que hago.

TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
GLOSARIO	12
RESUMEN	14
1. INTRODUCCIÓN.....	15
2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	18
3. JUSTIFICACIÓN	20
4. OBJETIVOS	21
4.1 OBJETIVO GENERAL	21
Modelar la dispersión de material particulado en zona minera del Cesar, Colombia, usando Fluent, una herramienta de modelación de dinámica de fluidos computacional (CFD).....	21
4.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	21
5. MARCO TEÓRICO.....	22
5.1 ESTUDIOS REALIZADOS POR EL CIMA EN MODELACIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE	22
6. METODOLOGÍAS PARA LA MODELACIÓN DE CALIDAD DEL AIRE.....	33
6.1 MODELOS FOTOQUÍMICOS	36
6.2 MODELOS ESTADÍSTICOS	37
6.2.1 Redes neuronales.....	37
6.2.2 Modelos de Monte Carlo.....	38
6.2.3 Modelos de receptores	38
6.3 MODELOS FÍSICOS Y EXPERIMENTALES.....	39
6.4 MODELOS GAUSSIANOS.....	41
6.5 SIMULACIÓN NUMÉRICA.....	42
7. MODELACIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE EN ZONA MINERA DEL CESAR USANDO FLUENT (CFD).	46
7.1 GEOGRAFÍA	47
7.1.1 Mallado.....	48
7.2 METEOROLOGÍA.....	52
7.2.1 Parámetros primarios	54

7.2.2 Parámetros secundarios	58
7.3 EMISIONES.....	59
7.3.1 Distribución de tamaño de partícula.....	62
7.4 MODELO FLUENT (CFD).....	66
7.4.1 Análisis de convergencia	69
7.4.2 Costo computacional	70
7.5 RESULTADOS	71
8. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	73
9. TRABAJO FUTURO.....	74
BIBLIOGRAFÍA	75

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1 Principales estudios realizados en modelación de calidad del aire.....	22
Tabla 2 Ecuaciones que describen los fenómenos físicos que ocurren en la dispersión de contaminantes atmosféricos.....	34
Tabla 3 Alternativas de modelación de la calidad del aire	34
Tabla 4 Valores para las condiciones de frontera.....	53
Tabla 5 Inventario de emisiones de PST	61
Tabla 6 Inventario de emisiones para PM ₁₀	61
Tabla 7: Parámetros de entrada para el modelo CFD	67
Tabla 8 Dirección, velocidad y altura usada para cada una de las simulaciones..	68
Tabla 9 <i>Concentración</i>	¡Error! Marcador no definido.

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1 Ubicación de la zona de explotación minera del Departamento del Cesar, Colombia.....	18
Figura 2 Concentración anual de PST obtenida usando AERMOD	24
Figura 3 Identificación de áreas contaminadas de acuerdo a sus niveles de concentración usando AERMOD.....	25
Figura 4 a. kilogramo de TSP emitido por miligramo de carbón producido por 7 compañías mineras en Colombia durante el 2009 en función de su producción anual. b. kilogramo de PM ₁₀ emitido por miligramo de carbón producido por 7 compañías mineras en Colombia durante el 2009 en función de su producción anual.....	28
Figura 5 a. contribución de emisiones de TSP de las actividades relacionadas con la minería a cielo abierto para el caso de producción de carbón in Colombia durante el 2009. b. contribución de emisiones de PM ₁₀ de las actividades relacionadas con la minería a cielo abierto para el caso de producción de carbón in Colombia durante el 2009.	28
Figura 6 a. Contribución promedio de emisiones de TSP para cada área considerada como fuente de emisión. b. Contribución promedio de emisiones de PM ₁₀ para cada área considerada como fuente de emisión.	30
Figura 7 Ilustración de la operación del modelo fotoquímico tipo euleriano.	37
<i>Figura 8 Ilustración del funcionamiento de una red neuronal</i>	38
Figura 9 Ilustración del funcionamiento de los modelos de receptores.....	39
<i>Figura 10 Modelos físicos hechos a escala (Izquierda), modelos de simulación numérica (Derecha)</i>	40
<i>Figura 11 Modelo experimental en ciudades (Izquierda), simulación numérica (Derecha)</i>	40
<i>Figura 12 Ilustración del principio fundamental sobre el cual operan los modelos de calidad del aire tipo Gaussiano</i>	41
<i>Figura 13 Resultados de simular numéricamente la dispersión de CO₂ alrededor de una chimenea usando ANSYS. Se muestra la concentración de CO₂ obtenida para un plano vertical que pasa por el centro de la chimenea y está alineado con la dirección del viento</i>	43
Figura 14 Descripción general de una metodología CFD	44
Figura 15 Metodología CFD para la solución del modelo de la calidad del aire....	45
Figura 16 Distribución de la rosa de los vientos por velocidad y dirección de viento	47
Figura 17 Visualización de la zona minera usando Global Mapper 13	48
Figura 18 Visualización de la zona minera en AutoCAD	48

Figura 19 Macro utilizada para crear elementos 2D	49
<i>Figura 20 Proceso de mallado en HyperMesh a partir de una macro para crear elementos 2D.....</i>	<i>49</i>
<i>Figura 21 Celdas 2D y 3D en una malla estructurada</i>	<i>50</i>
Figura 22 Celdas 2D y 3D en una malla no estructurada	50
<i>Figura 23 Tipos de malla 3D: izquierda no estructurada, medio estructurada y derecha hibrida</i>	<i>51</i>
<i>Figura 24 A. Localización de las fuentes de emisión; B. Construcción de elementos 3D; C-D. Definición de las condiciones de frontera</i>	<i>52</i>
<i>Figura 25 Identificación de las condiciones de frontera</i>	<i>53</i>
Figura 26 Frecuencia de distribución de las velocidades de viento	54
<i>Figura 27 Rosa de vientos estación meteorológica Calenturitas</i>	<i>55</i>
Figura 28 Ilustración del perfil de velocidad del viento sobre diferentes tipos de superficies.....	56
<i>Figura 29 Perfil de velocidad para uno de los casos que se modelaron</i>	<i>56</i>
<i>Figura 30 Perfil de temperatura para uno de los casos que se modelaron</i>	<i>57</i>
<i>Figura 31 a. Variación de la altura de capa de mezcla durante el día. b. Variación de la temperatura con respecto a la altitud.....</i>	<i>58</i>
<i>Figura 32 A. producción de carbón vs Kg de PST emitidos por año. B. Área cubierta vs kg de PST emitidas por año.</i>	<i>60</i>
Figura 33 Fuentes de emisión en la zona minera.....	60
Figura 34 Mecanismo de deposición de partículas en Fluent	62
<i>Figura 35 Distribución lognormal de material particulado</i>	<i>63</i>
<i>Figura 36 Distribución Rosin-Rammler.....</i>	<i>64</i>
<i>Figura 37 Valor de n para la linealización de la distribución de partículas en Fluent.....</i>	<i>66</i>
<i>Figura 38 Simulación en las 16 direcciones</i>	<i>67</i>
Figura 39 Gráfica de Residuales durante la convergencia	69
Figura 40 Monitor de concentración en la superficie durante la simulación	70
<i>Figura 41 Concentración en dirección Norte (superior izquierda), Sur (inferior izquierda), Oriente (Superior derecha), Occidente (inferior derecha).</i>	<i>71</i>

GLOSARIO

AERMOD: es un modelo de dispersión Gaussiano que analiza de forma estable y robusta la concentración y deposición de la contaminación atmosférica originada por diversas fuentes (*U.S. Environmental Protection Agency 2004*).

CAPA DE MEZCLA: esta se define como la capa de la atmósfera en la cual se desarrolla el proceso de dispersión y mezcla de los contaminantes debido a fenómenos turbulentos asociados a desequilibrios térmicos y/o mecánicos. (*José I. Huertas, et al, 2008*).

CFD: significa Dinámica de Fluidos Computacional y por sus siglas en inglés, Computational Fluid Dynamics, es un modelo que desarrolla numéricamente la física de las ecuaciones que gobiernan el flujo de un fluido (*Dr. John F. Wendt, 2009*).

CONVERGENCIA: es la capacidad que tiene un conjunto de ecuaciones algebraicas para representar la solución analítica de un conjunto de ecuaciones diferenciales, si es que esta existe. Las ecuaciones se dice que convergen si la solución numérica tiende a la solución analítica cuando el espaciado del mallado o el tamaño del elemento tienden a cero (*Rafael Ballesteros et al., 2003*).

EMISIÓN: se define como la descarga de una sustancia o elemento al aire, ya sea en estado sólido, líquido o gaseoso o una combinación de estos (*Susana Torno Lougedo, 2008*).

FLUENT: es un software que contiene amplias capacidades de modelado físico necesario para modelar el flujo, la turbulencia, la transferencia de calor, y las reacciones de las aplicaciones industriales que van desde el flujo de aire sobre el ala de un avión a la combustión en un horno, de columnas de burbujas a las plataformas petroleras, desde el flujo sanguíneo a los semiconductores, fabricación y diseño de plantas de tratamiento de aguas residuales. (<http://www.ansys.com/Products/Simulation+Technology/Fluid+Dynamics/ANSYS+Fluent>)

GEOGRAFÍA: en el contexto de este trabajo la geografía es uno de los parámetros de entrada en la metodología de modelación; allí se define el área de modelación y se genera la malla para hacer la simulación.

INVENTARIO DE EMISIONES: es un listado actualizado de contaminantes atmosférico por fuente, de un área geográfica específica y durante un periodo de tiempo determinado (*Susana Torno Lougedol, 2008*).

ISC3: por sus siglas Industrial Source Complex 3 (ISC3) es un modelo de dispersión gaussiano en estado estacionario que puede ser utilizado para determinar las concentraciones de contaminantes de una gran variedad de fuentes asociadas a un complejo industrial. (U.S. Environmental Protection Agency <http://www.epa.gov/ttn/catc/cica/9904s.html>)

METEOROLOGÍA: es un parámetro de entrada en la metodología de modelación; allí se definen las condiciones de frontera de la simulación, como dirección del viento, perfiles de velocidad, temperatura, entre otras.

MODELO DE CALIDAD DEL AIRE: es aquel que utiliza técnicas matemáticas y numéricas para simular los procesos físicos y químicos que afectan a los contaminantes en su dispersión y transformación en la atmósfera.

PM₁₀: son partículas sólidas o líquidas que tienen un diámetro menor a 10µm (Sinha and Banerjee, 1997; Chakraborty et al., 2002).

TSP: partículas suspendidas totales (Total Suspended Particulate); son aquellas partículas sólidas o líquidas presentes en el aire de tamaño suficientemente reducido, menores a veinticinco micras de diámetro (Sinha and Banerjee, 1997; Chakraborty et al., 2002).

RESUMEN

La zona minera del Cesar está ubicada en la región Norte de Colombia, al occidente de la cordillera oriental de los Andes. La producción de carbón en esta región es cercana a las 70 Mton/año lo que la convierte en una de las áreas mineras a cielo abierto más grandes del mundo. Desde el año 2007 y según la información de la red de monitoreo de calidad del aire de la autoridad ambiental Colombiana en la región, la concentración de partículas suspendidas totales (PST) y material particulado respirable (PM_{10}) en las inmediaciones de la zona minera exceden los límites establecidos por la normativa nacional. En diferentes ejercicios previos se han modelado las condiciones de calidad del aire de la zona haciendo uso de herramientas computacionales tales como ISC3 y AERMOD.

El trabajo que aquí se presenta tiene como objetivo hacer uso de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) como nueva alternativa para la modelación de las condiciones de calidad del aire en la región minera del Cesar; el cual resuelve las ecuaciones que gobiernan el modelo físico del problema, obteniendo campo de velocidad, y concentraciones a lo largo de un volumen de estudio. Como parte de este trabajo se diseñó una metodología orientada a facilitar la apropiación del modelo, donde se incluye la definición de los parámetros de entrada al modelo que son geografía, meteorología y emisiones. Los resultados preliminares obtenidos de las treinta y seis (36) modelaciones que se realizaron con CFD, sugieren una representación significativa de la condición de calidad del aire de la zona.

Así mismo, estos resultados evidencian que las concentraciones de PST y PM_{10} en inmediaciones de la zona minera sobrepasan los estándares nacionales y los valores considerados como perjudiciales para la salud de las personas por la Organización Mundial de la Salud (concentraciones promedio anuales de hasta $100\mu\text{g}/\text{m}^3$ y $70\mu\text{g}/\text{m}^3$ respectivamente).

1. INTRODUCCIÓN

La contaminación atmosférica es una problemática a la que cada vez se le atribuyen más efectos sobre la salud y el medio ambiente; por esta razón surge la necesidad de estudiar el comportamiento de las partículas desde el momento en que salen de la fuente de emisión, y su recorrido en la atmósfera, principalmente sobre grandes entornos geográficos donde la contaminación afecta directa o indirectamente una población.

La contaminación atmosférica producida por actividades antropogénicas da origen a enfermedades respiratorias como la silicosis, que bajo exposiciones prolongadas de tiempo, según estudios realizados por Pope y colaboradores como parte del // *Estudio para la Prevención del Cáncer (C. Arden Pope, 1997)*, existe una relación entre la contaminación atmosférica (para este caso en partículas que contienen sílice libre) y el cáncer pulmonar; los efectos ocasionados por exposición a altas concentraciones de material particulado se pueden observar en episodios agudos y crónicos de contaminación, entre ellos, el incremento de enfermedades cardiovasculares y cáncer de pulmón. A nivel ambiental, se presenta deterioro de los ecosistemas, reducción de la visibilidad en la zona de trabajo (*Wheeler et al., 2000; NIOSH, 2005*), aumentando el riesgo de accidentes, tales como sedimentación de material particulado sobre el suelo y detrimento de la calidad de aguas superficiales, por lo que las afecciones generadas por el material particulado son cada vez más críticas y se han diversificado en cuanto a los efectos que puede llegar a generar sobre la salud humana.

Se define material particulado como una compleja mezcla de partículas suspendidas en el aire que varían en tamaño y composición dependiendo de sus fuentes de emisiones. (*Extractos de la 7a. Conferencia ETH en Combustión Generadora de Nanopartículas, Zurich Agosto 2003*)

Entre las actividades que más contribuyen a la generación de material particulado, de acuerdo a la clasificación en fuentes fijas de emisión, se encuentran la minería y obra civil, metalurgia, producción de energía y la explotación y manipulación de materiales granulares.

El Ministerio del Medio Ambiente y Desarrollo Sostenible de Colombia ha venido haciendo esfuerzos para mejorar los mecanismos de prevención y control de la calidad del aire sobre las diferentes industrias y actividades involucradas en la emisión de material particulado a la atmósfera. Por esta razón ha desarrollado políticas que brindan los lineamientos y recomendaciones necesarios para realizar procesos de modelación de la calidad del aire y que permiten evaluar todas las

fuentes fijas y móviles de contaminación atmosférica en el país; entre ellas están las siguientes:

1. Protocolo para el control y vigilancia de las emisiones atmosféricas generadas por fuentes fijas
2. Protocolo para la vigilancia y seguimiento del módulo aire del sistema de información ambiental.
3. Protocolo para el monitoreo y seguimiento de la calidad del aire.

Los modelos de calidad del aire y específicamente los modelos de dispersión, son herramientas que permiten evaluar la contribución de una determinada fuente de emisión a cualquier punto receptor, de esta forma, se pueden definir e implementar estrategias apropiadas de control de emisiones.

Los modelos de dispersión atmosférica de contaminantes, para el caso específico del material particulado, se basan en la descripción matemática de los procesos atmosféricos, en los que los efectos como la concentración de contaminantes se generan por causas como la evolución de las partículas en el aire, la dinámica de la atmósfera y las fuentes de emisión. Para representar de forma adecuada estos fenómenos se necesita de la solución de diferentes sistemas de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, lo que implica un problema matemático complejo.

Existe una gran variedad de modelos de dispersión y cada uno de ellos está diseñado para ser usado en condiciones determinadas. Por ende, para escoger un modelo de calidad del aire se deben tener en cuenta una serie de variables y condiciones que cambian desde los datos de entrada requeridos hasta la metodología que usa cada uno para resolver el problema.

Entre los modelos más usados para la modelación se encuentran:

- ✓ *Modelos Analíticos:* Integran la ecuación de transporte-difusión después de asumir ciertas hipótesis importantes, que restringen su marco de aplicación. Un caso particular de solución analítica es la conocida expresión Gaussiana.
- ✓ *Modelos Estadísticos:* Estos permiten conocer la concentración de los contaminantes a partir de parámetros meteorológicos y después de haber obtenido relaciones empíricas por medio de series históricas de mediciones de contaminación; pero no es necesario tener un inventario de emisiones.
- ✓ *Modelos numéricos:* En este tipo de modelos, las concentraciones se calculan a partir del inventario de emisiones, de las condiciones meteorológicas, de las

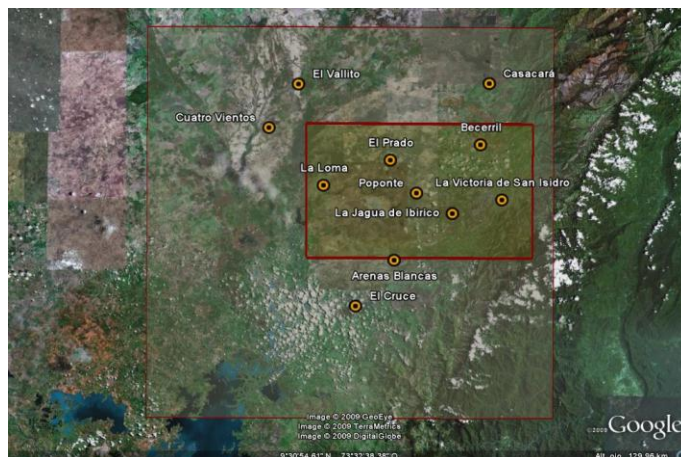
características del terreno y en algunos casos se considera la eliminación de contaminantes por deposición o reacciones químicas. Para ello, se resuelven ecuaciones diferenciales que caracterizan la dispersión, mediante el método de volúmenes finitos.

Debido a la exactitud de los modelos numéricos, en este trabajo se hace la simulación de la dispersión de material particulado en la zona minera del Cesar, Colombia usando una herramienta de modelación numérica como lo es Fluent, un programa basado en la dinámica de fluidos computacional (CFD).

2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

La zona minera del Cesar, ubicada en la región Norte de Colombia, es considerada como una de las zonas mineras a cielo abierto más grandes del mundo, con una producción aproximada de 70 Mton/año. Ésta se encuentra al occidente de la cordillera oriental de los Andes y se caracteriza por ser una zona plana y semidesértica. En la Figura 1 se muestra en la parte superior, la ubicación de la zona de explotación y en la parte inferior, la ubicación de las minas que operan en la región.

Figura 1 Ubicación de la zona de explotación minera del Departamento del Cesar, Colombia



Fuente: Google Earth

Dado el impacto ambiental de la actividad minera en la región, el Ministerio de Medio Ambiente y Desarrollo Sostenible en Colombia decidió establecer un programa de aire limpio que permitiera la reducción de los impactos generados por la actividad minera, al mismo tiempo que se mantuvieran los niveles de producción; Por esta razón, en el 2009 desarrolló la *Guía Nacional de Modelación de Calidad del Aire* [15] en conjunto con el Centro de Investigación en Mecatrónica Automotriz, CIMA del Tecnológico de Monterrey, para establecer los lineamientos que cada mina y en general cada actividad industrial que genere emisiones, debe empezar a cumplir.

El CIMA evaluó el impacto generado por cada una de las empresas que operan en la región utilizando AERMOD, un modelo de dispersión de estado estable que asume que la distribución de las partículas presenta un comportamiento Gaussiano de pluma en estado estacionario que simula la dispersión de los contaminantes en el aire y su deposición; realiza sus cálculos tomando en cuenta las características del terreno y la presencia de edificios cercanos a la fuente de emisión, los cuales pueden afectar la dispersión de la pluma; usa datos del clima de la capa superior atmosférica. Es un modelo regulatorio de la EPA de Estados Unidos y es considerado como el modelo de última generación (*U.S. Environmental Protection Agency 2004*). Sin embargo, este modelo está diseñado para modelar fenómenos en ambientes diferentes a los dados en una zona tropical donde está ubicada la región minera.

Por lo anterior, es necesario validar los resultados obtenidos con AERMOD con un modelo más robusto. Entonces se decide modelar la dispersión del material particulado en la zona minera usando CFD, un modelo que resuelve las ecuaciones que determinan el modelo físico del problema permitiendo una representación más precisa del fenómeno.

3. JUSTIFICACIÓN

La minería de carbón a cielo abierto es una de las actividades que más contribuyen a la generación de material particulado, seguido de la metalurgia, producción de energía y explotación y manipulación de materiales granulares.

Las actividades mineras que generan material particulado son perforación, explosiones controladas, carga y descarga de escombros, carga y descarga del carbón, el transporte por carretera por caminos sin pavimentar y las pérdidas de vertederos de escombros expuestos al aire libre y plantas de manejo de carbón. (*Chakraborty et al., 2002*)

Las políticas enfocadas a la prevención de impactos son de hecho, las más económicas y con las que se obtienen mejores resultados a nivel social y ambiental. Dado el gran impacto económico que representa la minería a cielo abierto en Colombia, la autoridad ambiental ha optado por utilizar modelos de calidad de aire para encaminar acciones hacia el cuidado y protección de los ciudadanos, al mismo tiempo que impulsa el desarrollo económico de la región.

Mediante este trabajo se pretende modelar la dispersión de material particulado en la zona minera a cielo abierto del Cesar por medio de CFD (Computational Fluid Dynamics, por sus siglas en inglés), que desarrolla numéricamente la física de las ecuaciones que gobiernan el flujo de un fluido.

La pertinencia de este trabajo se debe a la necesidad de comparar los inventarios de emisiones de la zona minera del Cesar, con los arrojados usando CFD para determinar la exactitud de dichos inventarios y de esta forma tener información más precisa de los impactos que genera la actividad minera en el Cesar, Colombia. De esta forma se pretende desarrollar un instrumento de toma de decisiones más confiable.

4. OBJETIVOS

4.1 OBJETIVO GENERAL

Modelar la dispersión de material particulado en zona minera del Cesar, Colombia, usando Fluent, una herramienta de modelación de dinámica de fluidos computacional (CFD).

4.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- ✓ Estudiar los trabajos realizados por el grupo CIMA-Energía en modelación de la dispersión de material particulado en zona minera a cielo abierto.
- ✓ Desarrollar una metodología que permita optimizar el número de corridas del modelo.
- ✓ Modelar en ANSYS Fluent 14.1 un año de operación.

5. MARCO TEÓRICO

5.1 ESTUDIOS REALIZADOS POR EL CIMA EN MODELACIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE

A continuación se muestran algunos de los avances más importantes en materia de modelación de calidad del aire usando CFD:

Tabla 1 Principales estudios realizados en modelación de calidad del aire.

Título	Autor (es)	Metodología	Resultados
Air quality impact assessment of multiple open pit coal mines in northern Colombia	José I. Huertas, María E. Huertas, Enrique D. González. 2011	AERMOD	Se encontró una gran correlación entre los valores obtenidos con la modelación y los medidos en las estaciones de monitoreo.
Computational fluid dynamics analysis of aerosol deposition in Pebble Beds	Mkhosi, Margaret Msongi. 2007	ANSYS, Fluent	Se demostró que se puede estimar deposición de aerosoles en camas de grava obteniendo una alta correlación con los valores experimentales
Estudio exploratorio del uso de CFD Para modelar la dispersión y deposición de material particulado en zonas mineras a cielo abierto	Eloy Vilchis Contreras, 2010.	ANSYS, Fluent	Validaron las corridas con una prueba experimental donde se observó que los resultados numéricos siguen la misma tendencia a los resultados experimentales
A computational study of particulate emissions from an open pit quarry under neutral atmospheric conditions	S.A Silvester, I.S. Lowndes, D.M. Hargraves, 2009	ANSYS, Fluent	Encontraron que la dispersión del material particulado depende de la dirección de viento y que bajo condiciones estables entre un 30 y 60% de las emisiones producidas por la actividad son retenidas dentro de los límites de la cantera.

<p>The application of an improved multi-scale computational modeling techniques to predict fugitive dust dispersion and deposition within and from surface mining operations</p>	<p>S.A Silvester, I.S. Lowndes, S.W Kingman and D.M. Hargraves, 2008.</p>	<p>ANSYS, Fluent</p>	<p>Proponen el desarrollo de 3 modelos a escala para representar de forma más precisa el comportamiento de las emisiones, pues necesitan un modelo más robusto que utilice CFD para poder predecir el comportamiento de microclimas dentro de la cantera.</p>
--	---	----------------------	---

A partir de ahora se explicarán más detalladamente algunos de los trabajos mencionados en la Tabla 1.

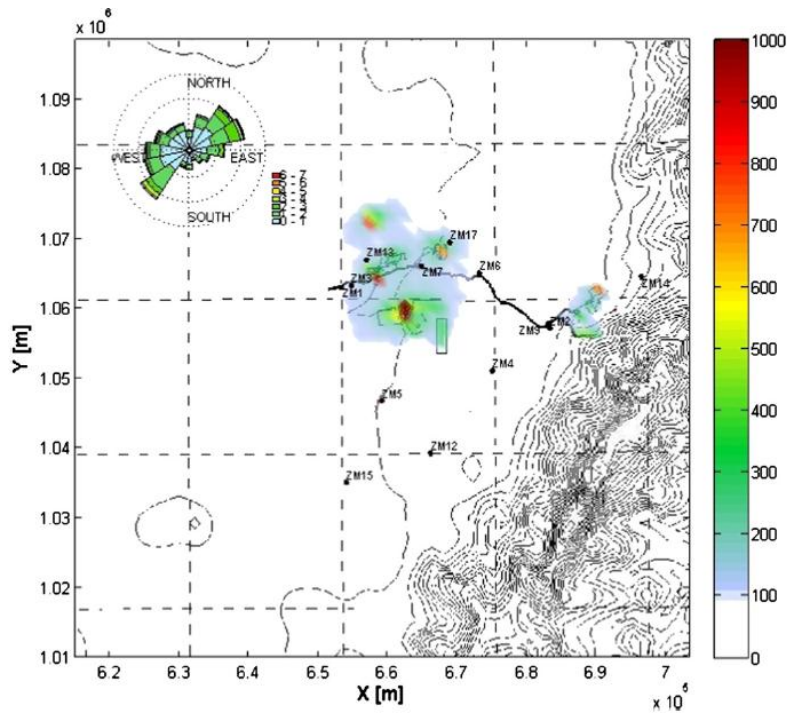
En el Centro de Investigación de Mecatrónica Automotriz (CIMA), Tecnológico de Monterrey, Campus Toluca, el Doctor José Huertas ha hecho estudios en conjunto con el Ministerio de Medio Ambiente en Colombia para evaluar el impacto en la calidad del aire generado por la actividad minera en el norte de país.

En su artículo “Air quality impact assessment of multiple open pit coal mines in northern Colombia” reporta que desde el 2006, el Ministerio de Ambiente inició una red de monitoreo de calidad del aire para TSP y PM₁₀ donde encontró que se estaban excediendo los estándares diarios y anuales de concentración para estos contaminantes. Debido a esto deciden establecer un programa de descontaminación para la región, al mismo tiempo que determinaban el impacto de la actividad minera en la calidad del aire e identificar las regiones consideradas como críticas según sus niveles de concentración.

El modelo usado para estimar las concentraciones de PST fue AERMOD, donde se encontró una gran relación entre los resultados medidos y los arrojados por el modelo, obteniendo un nivel de confianza del 99.5%. En la Figura 2 se muestran los resultados de concentración de PST obtenidos por AERMOD usando la meteorología reportada para el 2009 y se encontró habían áreas cercanas a las minas que excedían los estándares anuales de concentración de PST.

Los resultados mostraron que las áreas con grandes concentraciones corresponden a la ubicación de las fuentes de emisiones y sus concentraciones disminuyen conforme aumenta la distancia de la fuente de emisión.

Figura 2 Concentración anual de PST obtenida usando AERMOD

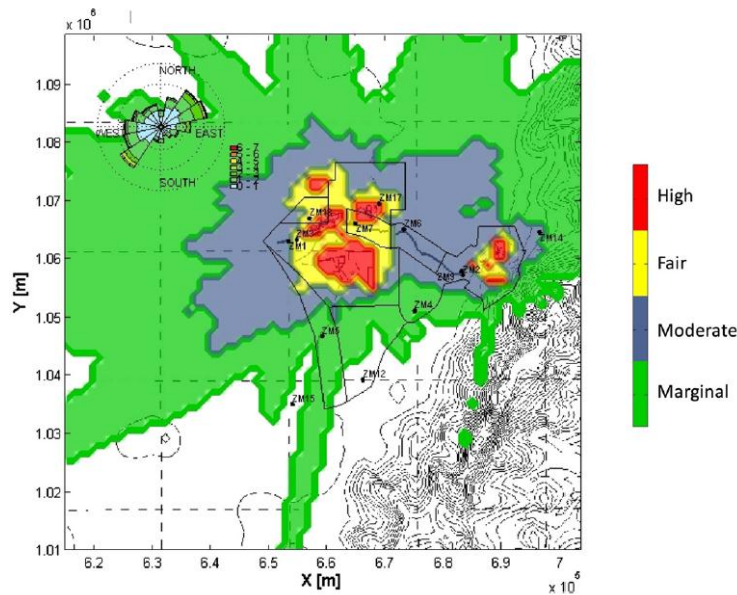


Fuente: José I. Huertas, 2011. *Air quality impact assessment of multiple open pit coal mines in northern Colombia* pg. 8 Fig. 6

Posteriormente identificaron las áreas contaminadas de acuerdo a los niveles de concentración y con base a este análisis (Figura 3) el Ministerio de Ambiente empezó a implementar nuevas medidas de descontaminación en áreas clasificadas como altamente contaminadas, bastante contaminadas, moderadamente contaminadas y ligeramente contaminadas.

Una vez identificadas las áreas críticas con base a los niveles de concentración, el Ministerio de Ambiente decidió establecer nuevas medidas de descontaminación, una de ellas fue la reubicación de tres de las poblaciones más contaminadas. El costo de esta reubicación tuvo que ser asumido por las compañías mineras que operan en la región de acuerdo a los niveles de concentración emitidos que arrojó el modelo utilizado con AERMOD.

Figura 3 Identificación de áreas contaminadas de acuerdo a sus niveles de concentración usando AERMOD.



Fuente: José I. Huertas, 2011. *Air quality impact assessment of multiple open pit coal mines in northern Colombia* pg. 9 Fig. 7

Terminado este trabajo, surgió el interés por definir una metodología para cuantificar la cantidad de material particulado emitida a la atmósfera por actividades directamente relacionadas con la minería a cielo abierto; en ese sentido, el Dr. Huertas llevó a cabo un trabajo titulado “Standardized emissions inventory methodology for open-pitminingáreas”.

Los inventarios de emisiones son hechos basados en factores de emisión; para este caso se utilizaron los recomendados por la USEPA [19], pero el gran conflicto es que no hay una claridad en cuanto al uso de factores de emisión que se deben usar para cada actividad específica y para la aplicación de dichos factores a los diferentes casos en que estos fueron obtenidos.

Para abordar estas necesidades, se inició un trabajo que buscaba establecer una metodología estandarizada de inventarios de emisiones de TSP y PM₁₀ para zonas mineras a cielo abierto; esta metodología fue aplicada a siete de ocho compañías mineras que operan en la zona minera del Cesar, Colombia (Una de ellas adoptó su propia metodología).

Como se mencionó anteriormente, cada una de las actividades involucradas en las operaciones mineras tiene un factor de emisión específico f por kilogramo de la intensidad de la actividad i ($E_{f,i}$) y este se calcula bajo las recomendaciones de la (USEPA 2006a) de la siguiente manera:

$$E_{f,i} = \alpha S_a^\beta M_p^\gamma M_c^\zeta \quad (1)$$

Donde S_a , M_p y M_c son variables que caracterizan la actividad del emisor, propiedades de materiales y condiciones meteorológicas respectivamente. α , β , γ y ζ son constantes experimentales que dependen de cada actividad específica.

La masa de material particulado emitido durante la actividad es estimado según la USEPA 2009 como:

$$E_i = A_i E_{f,i} \Pi (1 - \eta_j) \quad (2)$$

Donde A_i es la intensidad de la actividad específica y η_j es la eficiencia de la medida de control de emisión implementada para una actividad específica.

Factores de emisión para carga y descarga de materiales:

Para el caso de carga y descarga de tierra, material geológico útil y sobrecarga, usaron factores de emisión reportados por (USEPA 2006b) para manejo y almacenamiento en pilas de material granulado.

$$E_{f,l} = \alpha \frac{(U/2.2)^{1.3}}{(M/2.0)^{1.4}} \quad (3)$$

Donde: $E_{f,l}$ es el factor de emisión para el manejo y almacenamiento en pilas de material granulado en kilogramos de PST por tonelada; U es la velocidad media del viento, M es el contenido de humedad del material, y α es una constante equivalente a 0,0012 para TSP y 0,00056 para PM_{10} . Esta ecuación es válida para materiales con un porcentaje de sedimentación entre 0,44% y 19%, con contenido de humedad entre el 0,25% y 4,8%, a condiciones de velocidad de viento entre 0,6

y 6,7 m/s. sin embargo, la mayoría de las actividades realizadas en minas a cielo abierto están fuera de estos rangos.

Debido a la dificultad para obtener estos factores de emisiones para rangos por fuera de los especificados anteriormente, utilizaron factores de emisión bajo las condiciones que representan el peor escenario.

Medidas de control de emisiones:

Se han desarrollado técnicas de control para el transporte de carga en carreteras destapadas. Todas ellas se basan en riego de agua en carreteras (Cowherd 1988). La eficiencia de esta técnica de control de emisiones se puede calcular mediante la siguiente ecuación:

$$\eta_r = 1 - \left(\frac{0.8prt}{k} \right) \quad (4)$$

Donde p es la tasa promedio de evaporación durante el día, r es el tráfico promedio por día, k es la intensidad de las aplicaciones en litros por metro cuadrado y t es el tiempo promedio entre las aplicaciones de rociado.

Adicionalmente, USEPA (2006a) estima la eficiencia de control de emisiones de material particulado mediante rociado natural (lluvia) mediante la siguiente ecuación:

$$\eta_r = 1 - \left(\frac{m-n}{km} \right) \quad (5)$$

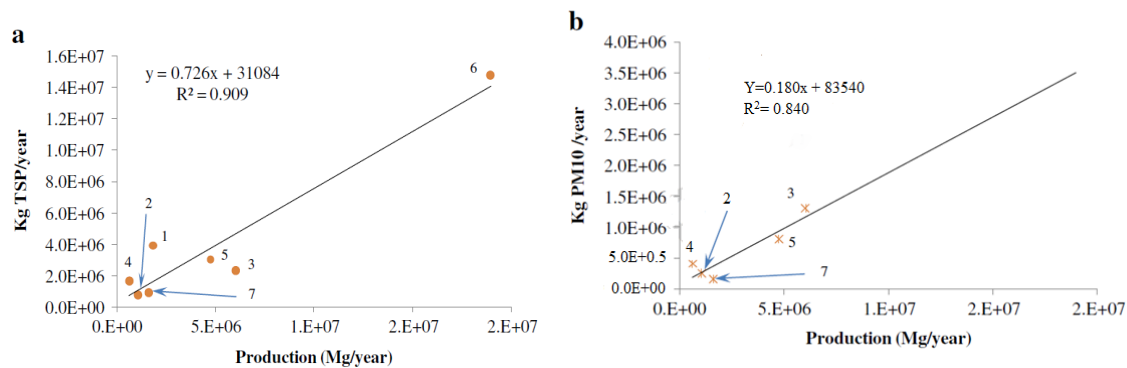
Donde m es el número de días en periodo de lluvia, n es el número de días lluviosos con niveles de precipitación que exceden los 0,254 mm.

Para evaluar el desempeño de los programas de control de emisiones implementado en las siete compañías mineras, se evaluaron los resultados obtenidos mediante una simulación usando ISC y AERMOD (modelos de calidad del aire) para determinar el impacto ambiental de la actividad minera en la región,

midiendo concentración de material particulado y revisando el proceso de sedimentación según los resultados arrojados por los modelos de calidad del aire.

La Figura 4a, b muestra los kilogramos de TSP y PM₁₀ emitidos por miligramo de producción anual de carbón, donde obtuvieron una alta confiabilidad para el coeficiente de determinación ($R^2=0.909$ para TSP y $R^2=0.849$ para PM₁₀) en el análisis de correlación lineal entre emisiones de material particulado y producción minera.

Figura 4 a. kilogramo de TSP emitido por miligramo de carbón producido por 7 compañías mineras en Colombia durante el 2009 en función de su producción anual. **b.** kilogramo de PM₁₀ emitido por miligramo de carbón producido por 7 compañías mineras en Colombia durante el 2009 en función de su producción anual

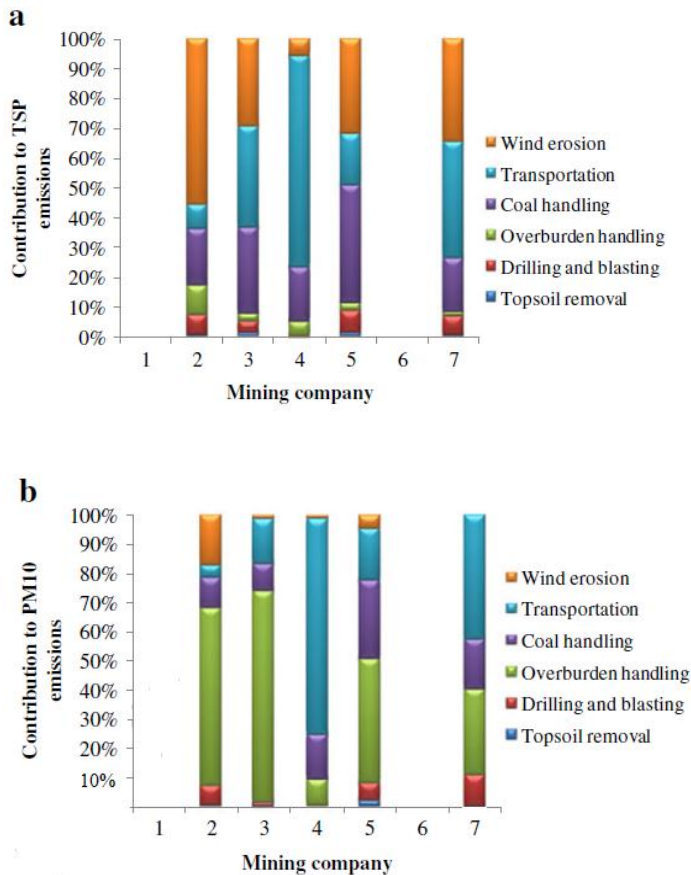


Fuente: José I. Huertas, 2011. *Standardized emissions inventory methodology for open-pit mining areas*, pg. 8, Fig 2.

La Figura 5a, b muestra la contribución de cada actividad a las emisiones de TSP y PM₁₀ respectivamente. Allí encontraron que rociando agua sobre las carreteras destapadas, las compañías podrían reducir las emisiones de TSP en un 72%. Las compañías reportaron que al rociar agua entre 1 y 2 l/m², de 2 a 4 veces por día, se obtenían eficiencias en cuanto a control de emisiones por material particulado de 99%.

Figura 5 a. contribución de emisiones de TSP de las actividades relacionadas con la minería a cielo abierto para el caso de producción de carbón in Colombia durante el 2009. **b.** contribución de emisiones de PM₁₀ de las actividades

relacionadas con la minería a cielo abierto para el caso de producción de carbón in Colombia durante el 2009.



Fuente: José I. Huertas, 2011. *Standardized emissions inventory methodology for open-pit mining areas*, pg. 9, Fig. 4.

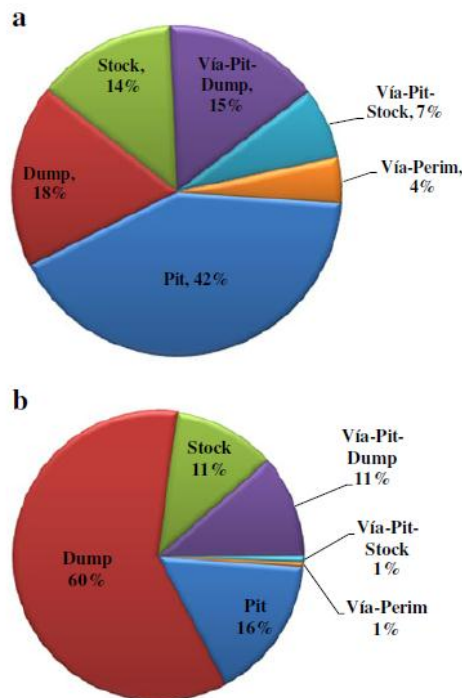
La figura anterior muestra que en promedio, el transporte sobre carreteras destapadas representa la fuente de emisión más grande, con un 34% de contribución a las emisiones totales de TSP. Seguido a este, le siguen la manipulación de carbón y erosión del viento con una contribución del 29 y 28% respectivamente.

Para el caso de PM₁₀, los resultados cambiaron un poco, pues en promedio, el 52% de las emisiones se debe al manejo de escombros, el 25% al transporte y el 16% a la manipulación de carbón.

La Figura 6 muestra la contribución de cada área considerada como fuente de emisión (mina, botadero, área de almacenamiento, carretera del botadero, carretera del área de almacenamiento y la vía principal donde se hacen

actividades relacionadas con perforación, explosiones controladas, carga y descarga de escombros, carga y descarga del carbón), a las emisiones totales de TSP y PM₁₀ respectivamente. Allí se puede observar que la mina y el botadero son las áreas que más contribuyen a la generación de emisiones.

Figura 6 a. Contribución promedio de emisiones de TSP para cada área considerada como fuente de emisión. **b.** Contribución promedio de emisiones de PM₁₀ para cada área considerada como fuente de emisión.



Fuente: José I. Huertas, 2011. *Standardized emissions inventory methodology for open-pit mining areas*, pg. 10, Fig. 5.

Finalmente, los resultados mostraron que el transporte en carreteras destapadas es la principal fuente de emisiones y que el total de emisiones puede ser reducido en un 72% si se rocía agua en dichas carreteras. También encontraron que las minas de carbón emiten 0.726 y 0.180 kg de TSP y PM₁₀ respectivamente por miligramo de carbón producido y se usan en promedio 1.148 m² de tierra por miligramo de carbón producido al año.

Eloy Vilchis Contreras (2010), en su trabajo de tesis de Maestría “Estudio exploratorio del uso de CFD Para modelar la dispersión y deposición de material particulado en zonas mineras a cielo abierto” habla de la pertinencia del uso de modelos de simulación numérica afirmando que “La herramienta de simulación

numérica, mejor conocida como CFD, describe el movimiento de un fluido de varias especies sobre una geometría irregular con transferencia de energía y de masa, resolviendo numéricamente las ecuaciones que describen cada uno de estos fenómenos. Por tanto, constituye la alternativa que provee resultados más exactos. Tiene el potencial de incorporar reacciones químicas y el efecto de las variables climatológicas. Sin embargo las aplicaciones típicas de esta herramienta no incluyen estas 2 últimas opciones. Requiere gran capacidad de cómputo y de personal especializado. Es apropiada para problemas de tamaño físico reducidos; aunque es posible aumentar el tamaño del área de trabajo, usando técnicas como análisis dimensional, modelos a escala que permiten cambiar los parámetros iniciales de entrada dimensionales de un problema físico, por otro conjunto de parámetros de entrada adimensionales más reducido.”

Lowndes (I.S Lowndes, 2008), en su artículo “The application of an improved multi-scale computational modelling techniques to predict fugitive dust dispersion and deposition within and from surface mining operations” menciona que el desarrollo de modelos de simulación como CFD predice de manera más exacta y precisa la dispersión de los contaminantes generados en las zonas de explotación de canteras.

Susana Torno Lougedo (2008), en su tesis doctoral “Emisiones de material particulado en almacenamiento de minerales a la interperie” resalta las bondades de las aplicaciones de CFD para procesos industriales, investigaciones sobre los efectos del fuego y del humo, modelos de combustión, dispersión de agentes contaminantes en el aire o agua, optimización de procesos de combustión, entre otros.

Silvester (S.A. Silvester, 2009), de la Universidad de Nottingham, en su paper “A computational study of particulate emissions from an open pit quarry under neutral atmospheric conditions”, presentó el desarrollo de un modelo CFD para simular el patrón de flujo interno que puede existir en una superficie de excavación de cantera debido al paso de viento a lo largo de la superficie bajo condiciones neutras. Luego de ello, modeló la dispersión y deposición de material particulado generado durante la explotación de piedra.

Silvester (S.A. Silvester, 2009) a manera de conclusión menciona que excavación de cantera, debido a la dirección de los vientos, bajo condiciones neutras retiene un porcentaje entre el 30 y el 60% de las partículas emitidas y que para tener resultados más precisos requiere de mayor información en los datos de entrada al modelo y presupuesto para desarrollarlo.

6. METODOLOGÍAS PARA LA MODELACIÓN DE CALIDAD DEL AIRE

Los modelos de calidad del aire usan técnicas matemáticas y numéricas para simular los procesos físicos y químicos que afectan a los contaminantes en su dispersión y transformación en la atmósfera. Para describir la dispersión de contaminantes atmosféricos alrededor de una fuente de emisión es necesario involucrar en la modelación los siguientes fenómenos físicos que ocurren en forma simultánea:

- ✓ El movimiento de fluidos gaseosos de varias especies y de partículas suspendidas, de densidad variable y en régimen turbulento.
- ✓ La transferencia de calor que ocurre al interior del fluido.
- ✓ La transferencia de masa que ocurre a la salida de la fuente, en la atmósfera y en los receptores.
- ✓ Los procesos de formación y destrucción de especies que ocurren al interior del fluido.
- ✓ Las reacciones químicas que ocurren al interior del fluido bajo la presencia de factores externos como radiación solar y humedad.
- ✓ Se debe incluir como parámetros de entrada las siguientes condiciones:
- ✓ Meteorología del lugar.
- ✓ La emisión másica de cada especie.
- ✓ La geografía del lugar y el uso del suelo.

Las ecuaciones que describen estos fenómenos son bien conocidas y se mencionan en la Tabla 2. Allí se muestra que éstas son ecuaciones integro-diferenciales no lineales que se deben resolver en forma simultánea para cada aplicación específica.

Dada la complejidad de estas ecuaciones, aún no se conocen soluciones analíticas para el caso de dispersión de contaminantes. Como alternativa se ha optado por acudir a soluciones heurísticas y/o simplificadas como las sintetizadas en la Tabla 3. Estas soluciones proveen información referente a un aspecto específico del fenómeno de dispersión de contaminantes alrededor de la fuente de emisión. Sin embargo, todas ellas son aproximaciones con supuestos algunas veces poco aceptables.

Tabla 2 Ecuaciones que describen los fenómenos físicos que ocurren en la dispersión de contaminantes atmosféricos

Aspecto que modela	Ecuación
Conservación de masa y de especies	$\frac{\partial Y_i \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho Y_i (v + V_i) = \omega_i$
Conservación de momentum	$\frac{d}{dt}(mV)_{\text{sys}} = \sum F = \frac{d}{dt} \left(\int_{CV} V \rho dV \right) + \int_{CS} V \rho (V_r \cdot n) dA$
Primera ley de la termodinámica	$\rho \frac{Dh_s}{Dt} - \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial (u_j \tau_{ji})}{\partial x_j} + \dot{Q} - \nabla \cdot q + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_k \cdot (u + V_k)$
Reacciones químicas	$\omega_i = W_i \sum_{k=1}^M (v''_{i,k} - v'_{i,k}) B_k T^{\alpha_k} \exp - \frac{E_{ak}}{R_U T} \prod_{j=1}^N \left(\frac{X_j P}{R_U T} \right)^{v'_{j,k}}$

Tabla 3 Alternativas de modelación de la calidad del aire

Modelo	Descripción	Ventajas	Desventajas
Modelos Fotoquímicos	Para cada celda de simulación asume que la emisión se difunde uniformemente en el espacio disponible y ocurren las reacciones químicas pertinentes	Apropiado para gran número de fuentes como complejos industriales y ciudades	Requieren de gran capacidad de computo
Estadísticos	Redes neuronales: Asocian el efecto de las condiciones meteorológicas y emisión de contaminantes a la concentración de contaminantes en puntos alejados de la fuente de emisión	Sintetizan datos históricos	Necesita que existan patrones de comportamiento

	Modelos de Monte Carlo: Modelan nucleación, coalescencia, coagulación y condensación de partículas	Han sido validados experimentalmente	Poco conocidos
	Modelo de receptores: Asocian la concentración y composición de la contaminación de un receptor con una fuente	Proveen evidencia sobre el impacto de una fuente sobre los receptores	Son cualitativos. Aplican cuando cada una de las fuentes emite sustancias con características diferentes
Físicos o experimentales	Modelos a escala en túnel de viento	Se ajustan a la realidad	Costosos
Simulación numérica	<i>Computational fluid dynamics</i> –CFD: Resuelve numéricamente las ecuaciones que describen el movimiento de los fluidos	Son los más exactos.	Requieren de gran capacidad de computo No apropiados para modelar a distancias mayores de 1 Km
Modelos gaussianos	Estado estable	Han tenido amplia aceptación por su simplicidad.	Poco exactos. Problemas con condiciones de viento menores a 1 m/s.
	Avanzados	Incluyen en forma dinámica las características climatológicas y geográficas	Requieren gran cantidad de información de entrada

6.1 MODELOS FOTOQUÍMICOS

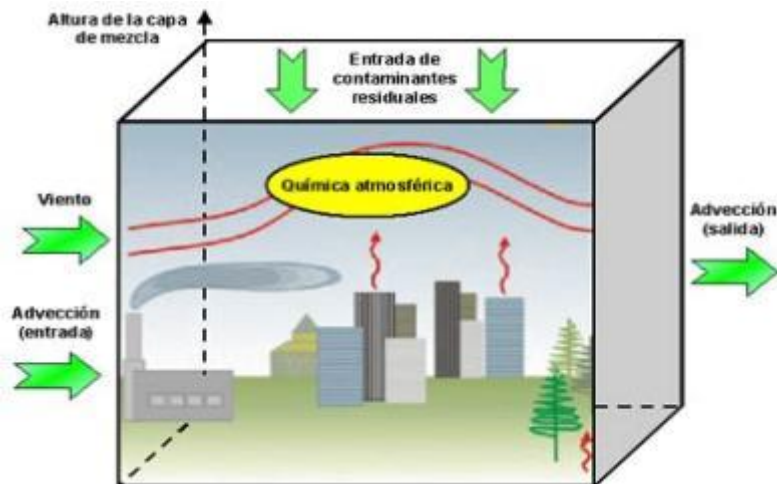
Esta aplicación se refiere a la modelación de calidad del aire en regiones con múltiples fuentes de emisión (>100) tales como zonas industriales y grandes centros urbanos. Se caracteriza por combinar fuentes de emisión provenientes de fuentes móviles y de fuentes fijas de diferente naturaleza. Bajo esta circunstancia, se genera una atmósfera propicia para la formación de contaminantes secundarios tales como partículas inorgánicas y ozono (O₃), los cuales son formados como producto de las interacciones físico químicas entre los diferentes contaminantes primarios.

En estos casos se usan modelos fotoquímicos que incluyan mecanismos de formación y destrucción de contaminantes tales como deposición seca y húmeda de partículas, formación de partículas inorgánicas secundarias, reacciones foto-oxidantes y escenarios químicos especializados.

Los modelos fotoquímicos de calidad del aire se han vuelto ampliamente conocidos y regularmente utilizados para analizar y demostrar la efectividad de las estrategias de control de la contaminación. Los modelos fotoquímicos son modelos de calidad del aire de gran escala, que simulan los cambios en la concentración en la atmósfera de contaminantes usando el conjunto de ecuaciones matemáticas que caracterizan los procesos físicos y químicos que ocurren en la atmósfera descritos en la Tabla 2. Estos modelos pueden ser aplicados a escala local, regional, y nacional.

Hay dos tipos de modelos foto químicos comúnmente usados: *modelos de trayectoria lagrangianos* que emplean un sistema de referencia en movimiento y *modelos eulerianos de celdas (grid models)* que usan un sistema de coordenadas fijo a la tierra, como se ilustra en la Figura 7. Anteriormente se adoptaba una aproximación lagrangiana para simular la formación de contaminantes atmosféricos en consideración a su simplicidad computacional. Sin embargo, la desventaja de esta aproximación es que los procesos físicos que se pueden describir son incompletos. Actualmente, la mayoría de los modelos foto químicos han adoptado el modelo euleriano de grilla principalmente por su habilidad de caracterizar los procesos físicos que ocurren en la atmósfera y de predecir correctamente las concentraciones de contaminantes a través de todo el dominio del modelo.

Figura 7 Ilustración de la operación del modelo fotoquímico tipo euleriano.



Fuente: Pérez Palma Adolfo, 2007. Modelación matemática de la calidad del aire en la zona metropolitana de Puebla.

<http://www.revistaequim.com/numeros/19/modelacion.htm>

6.2 MODELOS ESTADÍSTICOS

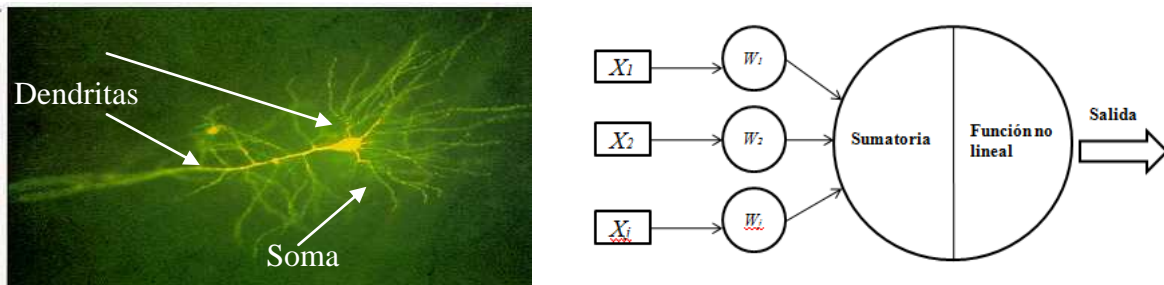
Corresponden a modelos que buscan predecir la concentración de contaminantes atmosféricos a nivel superficie con base en el análisis estadístico de datos experimentales recolectados en el pasado. Buscan establecer correlaciones entre las variables independientes (meteorología y emisiones) con las variables dependientes (concentración de contaminantes en un lugar específico).

6.2.1 Redes neuronales

Las redes neuronales son modelos matemáticos que buscan reproducir el comportamiento biológico cerebral como se ilustra en la Figura 8. Cada neurona del sistema se caracteriza por tener entradas de activación x_j , las cuales son modificadas por un conjunto de conexiones denominadas pesos W_j . La neurona cuenta con un sumador que se encarga de sumar las entradas multiplicadas por su peso respectivo. Finalmente las señales resultantes entran a una función de activación no lineal que determina las salidas.

El concepto de redes neuronales ha sido implementado para predecir las concentraciones de contaminantes atmosféricos alrededor de fuentes de emisión como una función de las variables meteorológicas y del nivel de emisiones. Sin embargo estos modelos no han sido aceptados para propósitos regulatorios.

Figura 8 Ilustración del funcionamiento de una red neuronal



Fuente: Funcionamiento de una red neuronal.

<http://www.ucm.es/BUCM/cee/doc/9902/9902.htm>

6.2.2 Modelos de Monte Carlo

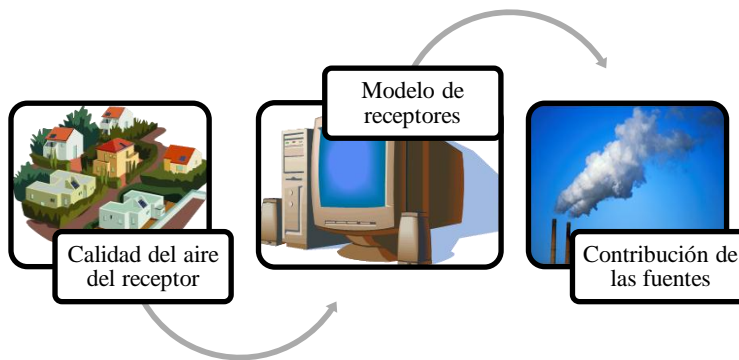
Los modelos de Monte Carlo reproducen la física de la formación de partículas y el transporte de las mismas mediante el uso de métodos probabilísticos con los cuales se determinan la velocidad de difusión y transporte de las partículas, mediante la manipulación de números aleatorios generados por un computador. Han sido implementados para predecir la evolución de aerosoles y su transporte a grandes distancias. Hasta la fecha estos modelos no han sido reconocidos como modelos preferidos para la modelación de la calidad del aire con propósitos regulatorios.

6.2.3 Modelos de receptores

Los modelos de receptores son procedimientos matemáticos o estadísticos para identificar y cuantificar la fuente de procedencia de contaminantes atmosféricos en la ubicación de un receptor dado, como se ilustra en la Figura 9. A diferencia de los modelos fotoquímicos, los modelos de receptores no usan emisiones de contaminantes, datos meteorológicos ni transformaciones químicas para estimar las contribuciones de las diferentes fuentes en la concentración de contaminantes en un receptor dado. En cambio, los modelos de receptores usan las características físicas y químicas de los gases y partículas medidas en las

distintas fuentes y en el receptor, para cuantificar la contribución de cada fuente a la concentración de contaminantes en el receptor. Estos modelos son por tanto un complemento natural a otros modelos de calidad del aire. Han sido usados con propósitos regulatorio. Normalmente son utilizados cuando se tiene información precaria de las condiciones meteorológicas o de las tasas de emisión de las fuentes. En este tipo de modelos solo es posible simular material particulado o gases formados directamente desde la fuente, es decir, que no hayan sufrido transformación química durante la trayectoria fuente-receptor.

Figura 9 Ilustración del funcionamiento de los modelos de receptores

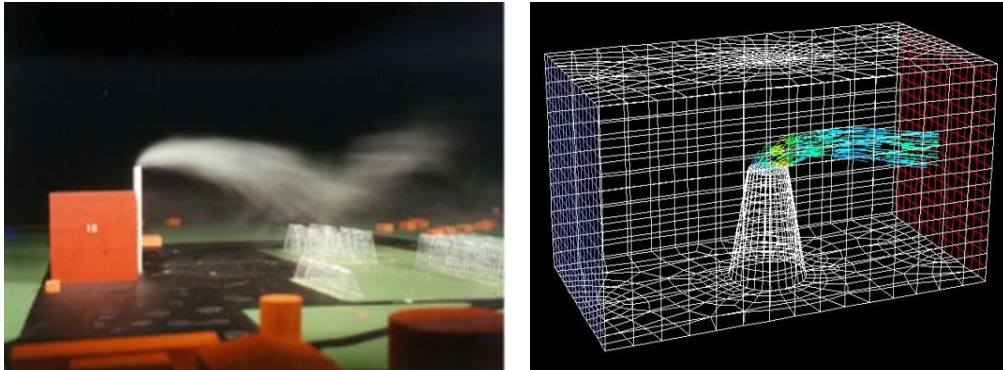


Fuente: José I. Huertas, et al, 2008. *Guía Nacional de Modelación de Calidad del Aire.*

6.3 MODELOS FÍSICOS Y EXPERIMENTALES

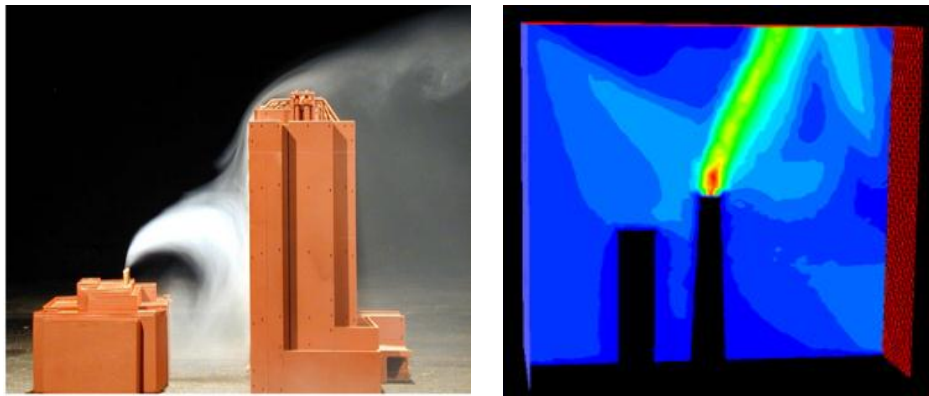
Corresponde a modelos a escala montados en túnel de viento donde se reproducen físicamente las condiciones topográficas y meteorológicas presentes en la zona de monitoreo. El túnel de viento es una instalación experimental que permite controlar las diferentes variables presentes en la dispersión de contaminantes asociadas con las emisiones, meteorología y geográfica del área de estudio. Las Figuras 10 y 11 ilustran sobre el uso de los modelos físicos o experimentales.

Figura 10 Modelos físicos hechos a escala (Izquierda), modelos de simulación numérica (Derecha)



Fuente: Colombia. Ministerio de Ambiente Vivienda y Desarrollo Territorial (MAVDT) Bogotá D.C.: El Ministerio, 2008.

Figura 11 Modelo experimental en ciudades (Izquierda), simulación numérica (Derecha)

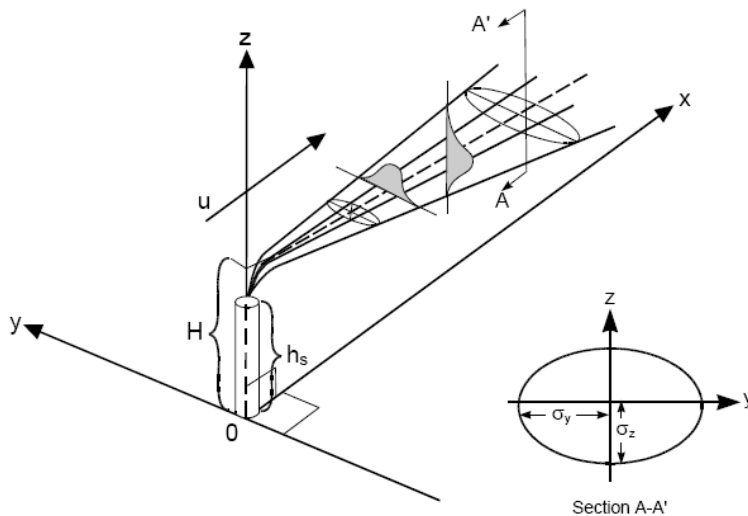


Fuente: Colombia. Ministerio de Ambiente Vivienda y Desarrollo Territorial (MAVDT) Bogotá D.C.: El Ministerio, 2008.

6.4 MODELOS GAUSSIANOS

Los modelos gaussianos asumen que la concentración de contaminantes se distribuye normalmente en la dirección vertical y transversal de acuerdo la ecuación 1 y como se ilustra en la Figura 12.

Figura 12 Ilustración del principio fundamental sobre el cual operan los modelos de calidad del aire tipo Gaussiano



Fuente: Turner 1970.

$$C = \frac{Q}{2\pi * \sigma_y * \sigma_z * u} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2} \left\{ e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\sigma_y}\right)^2} + e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\sigma_z}\right)^2} \right\} \quad (6)$$

Dónde:

C : Concentración de cualquier contaminante en el punto x, y, z

u : Velocidad del viento

Q : Flujo másico de contaminante

H : Altura efectiva de chimenea

Z: Altura de los receptores

σ_y, σ_z : Coeficiente de dispersión en las direcciones y y z respectivamente

Este modelo asume que:

- ✓ El transporte de masa por difusión es despreciable comparado con el transporte de masa mecánico generado por acción del viento.
- ✓ Existen condiciones de estado estable en la emisión de contaminantes y en las condiciones meteorológicas.
- ✓ No hay barreras físicas para la dispersión de contaminantes vientos abajo
- ✓ σ_y, σ_z son constantes en el tiempo pero son función de la distancia.
- ✓ No hay reacciones químicas.
- ✓ No hay mecanismos de deposición o desaparición de contaminantes.
- ✓ Los contaminantes se reflejan del piso. Esto se modela como una fuente espejo por debajo del piso.

Por su simplicidad, históricamente los modelos gaussianos han sido los preferidos para realizar proceso de modelación de calidad del aire. Con el tiempo estos modelos han venido incorporando algoritmos que permiten tener en cuenta la complejidad del terreno, la variabilidad de la meteorología y las reacciones químicas que ocurren en la atmósfera. Como resultado, actualmente se cuentan con modelos gaussianos más refinados que aunque son más exactos, son complejos de implementar y requieren de una gran cantidad de información como datos de entrada.

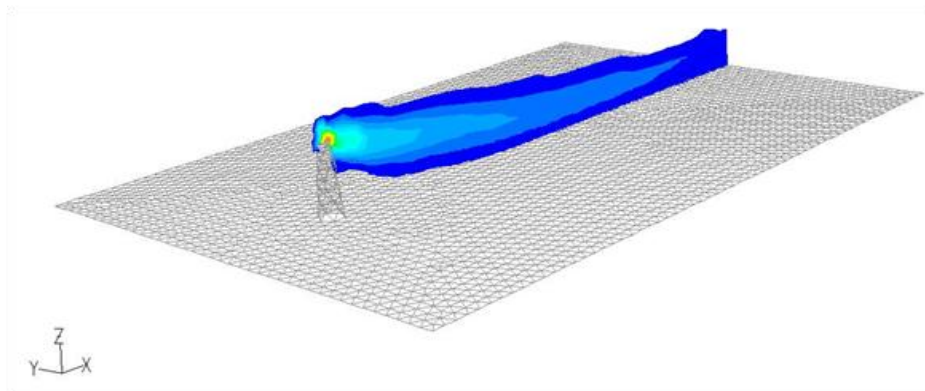
6.5 SIMULACIÓN NUMÉRICA

La dinámica de fluidos computacional (CFD), por sus siglas en inglés, es la ciencia que predice el flujo de fluidos, transferencia de masa y calor, reacciones químicas, mediante una solución numérica de las ecuaciones que gobiernan el fenómeno físico y químico, resolviendo las ecuaciones fundamentales de:

- ✓ Conservación de masa
- ✓ Conservación de momento
- ✓ Conservación de energía

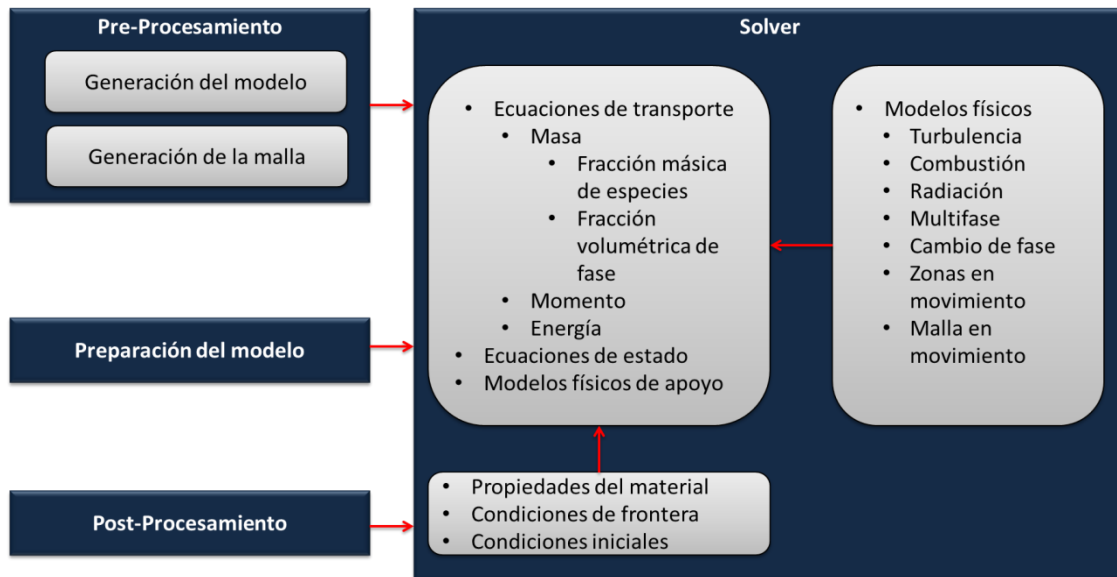
Por tanto, constituye la alternativa que provee resultados más exactos. Tiene el potencial de incorporar reacciones químicas y el efecto de las variables climatológicas. Sin embargo las aplicaciones típicas de esta herramienta no incluyen estas dos últimas opciones. Requiere gran capacidad de cómputo y de personal especializado. Es apropiada para problemas de tamaño físico reducidos, aunque es posible aumentar el tamaño del área de trabajo, usando técnicas como análisis dimensional, modelos a escala. La Figura 13 ilustra el tipo de resultados que se pueden obtener con esta herramienta.

Figura 13 Resultados de simular numéricamente la dispersión de CO₂ alrededor de una chimenea usando ANSYS. Se muestra la concentración de CO₂ obtenida para un plano vertical que pasa por el centro de la chimenea y está alineado con la dirección del viento



A continuación se ilustra una de las metodologías más usadas, para la solución de problemas que involucran CFD.

Figura 14 Descripción general de una metodología CFD

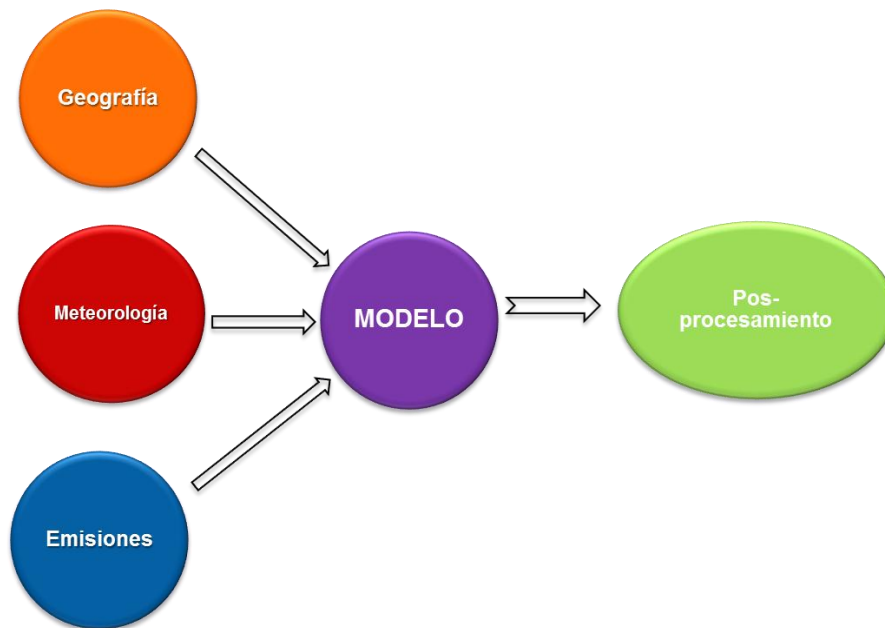


Para obtener resultados confiables con el modelo, el análisis CFD está definido por una serie de pasos que permitirán el uso adecuado de la herramienta y por consiguiente, la consecución de buenos resultados; dichos pasos están organizados de la siguiente manera:

- ✓ Identificación del problema y Pre-procesamiento
 - Definición de los objetivos del modelado
 - Identificar el volumen a estudiar
 - Diseñar y crear la malla
- ✓ Ejecución del solver
 - Definir el modelo numérico
 - Solucionar y monitorear la solución
- ✓ Post-procesamiento
 - Examinar los resultados
 - Poner a consideración revisiones del modelo

Para la ejecución de este proyecto se utilizó la metodología mostrada en la Figura 15, que recibe como entradas tres grandes grupos: geografía, meteorología y emisiones.

Figura 15 Metodología CFD para la solución del modelo de la calidad del aire



7. MODELACIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE EN ZONA MINERA DEL CESAR USANDO FLUENT (CFD).

En este capítulo se muestra la aplicación del modelo de dispersión de material particulado en la zona minera del Cesar, Colombia. Es importante resaltar que este tipo de modelos aún no son muy usados para modelar la calidad del aire y por consiguiente, el aporte en materia de contribución de conocimiento es una de las razones principales por las cuales se lleva a cabo el proyecto.

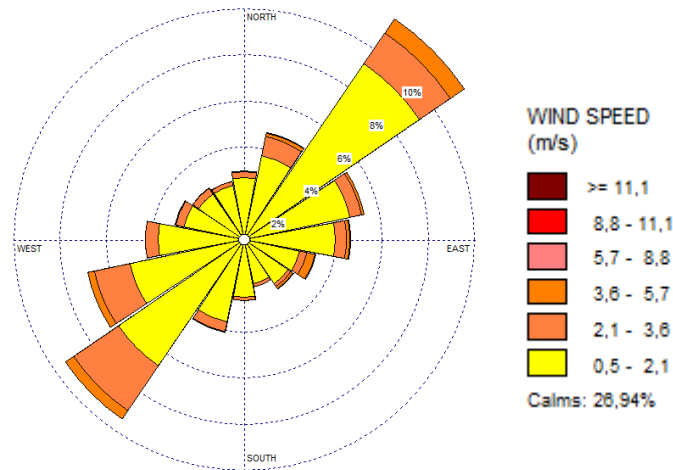
Para correr el modelo fue necesario tener en cuenta las siguientes consideraciones:

- ✓ La simulación del fenómeno real tiene las siguientes implicaciones:
 - En un proceso transitorio con duración de un año
 - Computacionalmente es demasiado costoso
 - La incertidumbre de los datos de entrada no lo justifican:
 - Datos meteorológicos hora a hora
 - Datos de emisiones son anuales y estimados

Por lo anterior, se decide hacer una propuesta bajo las siguientes condiciones:

- ✓ Simulación de estado estable (sin memoria de atmósfera contaminada)
- ✓ Las corridas no se harán hora a hora, se tendrá en cuenta:
 - La distribución expresada en rosa de vientos (para cada dirección y fracción de velocidades, se usaron parámetros meteorológicos primarios y secundarios promedio, como se muestra en la Figura 16)
 - Alternativamente: clúster de condiciones climáticas tipo
- ✓ El volumen de control fue definido de acuerdo a los siguientes parámetros:
 - La altura límite es igual a la altura promedio de capa de mezcla
 - Las caras están orientadas según la dirección del viento

Figura 16 Distribución de la rosa de los vientos por velocidad y dirección de viento



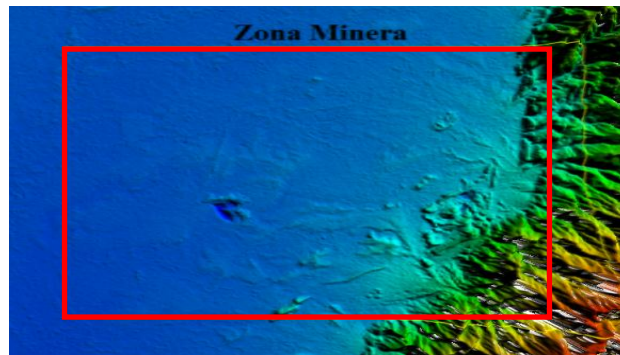
Teniendo en cuenta la metodología mostrada en la Figura 15, se procede con el desarrollo de la simulación numérica, donde se definen los parámetros para geografía, meteorología y emisiones de la siguiente manera:

7.1 GEOGRAFÍA

La geografía del modelo se obtuvo a través de Webgis (<http://www.webgis.com>); este es un portal donde se encuentra información relacionada con sistemas de información geográfica y que con ayuda de las coordenadas se pueden obtener los planos de la región en forma digital con una resolución de ~90 m, 3 arc-sec.

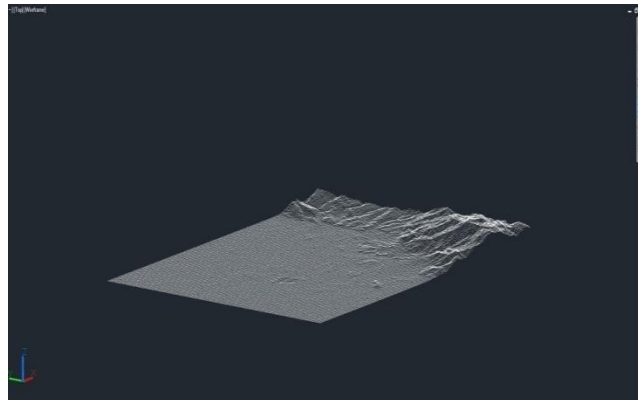
Posteriormente con ayuda de Global Mapper se leyó la información arrojada por Webgis, donde se identificó la ubicación específica de la zona minera. Como se muestra en la Figura 17 cuenta con un área de con un área de $50 \times 25 \text{ km}^2$ y una de las características de esta región es que gran parte de su extensión es plana y al costado derecho está rodeada por grandes montañas.

Figura 17 Visualización de la zona minera usando Global Mapper 13



Utilizando AutoCAD se encontró que la geografía estaba en una nube de puntos y lo que se hizo fue exportar el archivo como “.DXF ” para iniciar con la construcción del mallado de la geometría. En la Figura 18 se observa la nube de puntos en AutoCAD.

Figura 18 Visualización de la zona minera en AutoCAD



7.1.1 Mallado

Allí es donde el dominio del problema debe discretizarse por un conjunto de puntos, líneas y celdas que engloban todo el modelo con el fin de estudiarlo de una manera más fácil, a esto se le conoce como mallado. Para este caso, debido

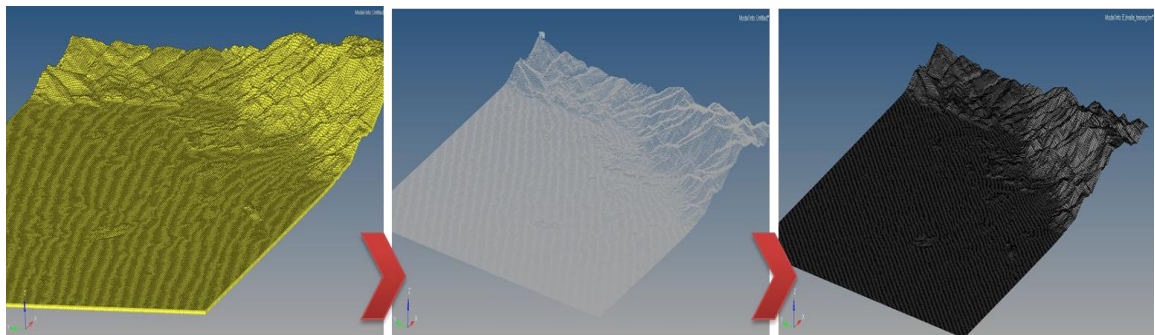
a que los datos se obtuvieron en una nube de puntos, se hizo una macro para crear a partir de esos puntos, elementos en 2D para poder hacer el mallado, en las Figuras 19 y 20 se muestra la macro utilizada para unir los puntos y la secuencia para crear la malla en 2D.

Figura 19 Macro utilizada para crear elementos 2D

```
for {set j 0} {$j < 235170} {incr j 585} {  
for {set i 0} {$i < 584} {incr i 1} {  
*createlist nodes 1 [expr $i+$j+1] [expr $i+$j+2] [expr $i+$j+586] [expr $i+$j+587]  
*createelement 104 1 1 1  
*clearlist nodes 1  
}  
}
```

Este mallado puede ser generado en el mismo programa en donde se creó la geometría o ser exportado a otros programas especializados en este tema. Algunos de estos programas son: Catia, SolidWorks, Gambit, IcemCFD, Ansa, HyperMesh, entre otros; en este caso, dada la complejidad de la geometría, todo el proceso de mallado fue hecho en HyperMesh.

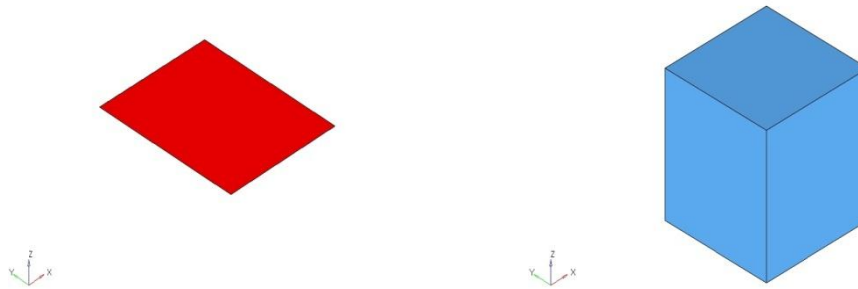
Figura 20 Proceso de mallado en HyperMesh a partir de una macro para crear elementos 2D.



Existen varios tipos de mallas y se clasifican así:

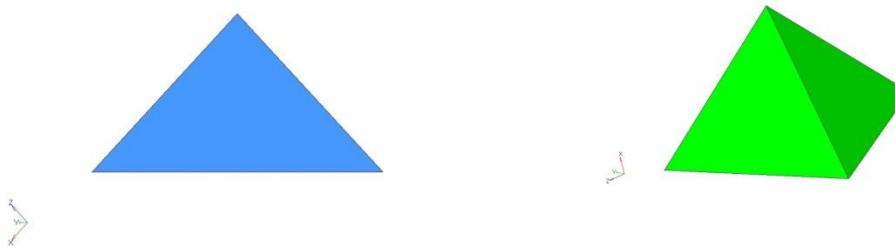
Estructuradas: Están formadas por líneas que forman un sistema de coordenadas curvilíneas, por lo que las celdas son rectangulares en 2D y hexaédricas en 3D.

Figura 21 Celdas 2D y 3D en una malla estructurada



No estructurada: Se componen de líneas que no forman un sistema de coordenadas curvilíneas, por lo que sus celdas son triangulares (2D), tetraédricas (3D) o piramidales.

Figura 22 Celdas 2D y 3D en una malla no estructurada



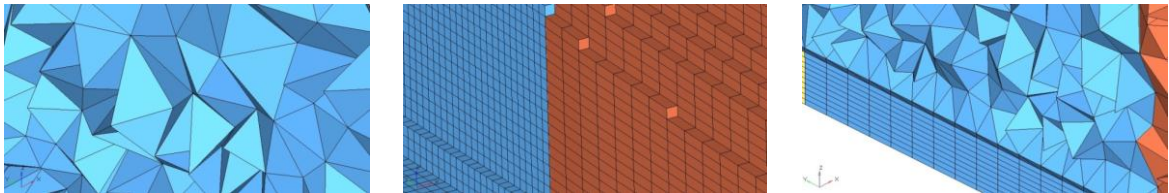
Híbridas: combinación de mallas estructuradas y no estructuradas.

Ya sea que se utilicen mallas estructuradas, no estructuradas o híbridas, el sistema ideal es el que permite resolver toda la física pertinente en el flujo, minimizando los errores que la malla produzca y que utiliza el menor número de nodos o celdas para un cálculo eficiente. *Desafortunadamente, un sistema ideal o no tan ideal puede ser difícil de generar en flujos y sólidos con geometrías complicadas, especialmente para problemas en tres dimensiones.*

La generación de la malla es la parte más tediosa y larga de un análisis CFD, además requiere conocimientos, no solo en la dinámica de fluidos y en la

generación de la malla, sino también un profundo conocimiento de la física del problema que se está estudiando

Figura 23 Tipos de malla 3D: izquierda no estructurada, medio estructurada y derecha híbrida



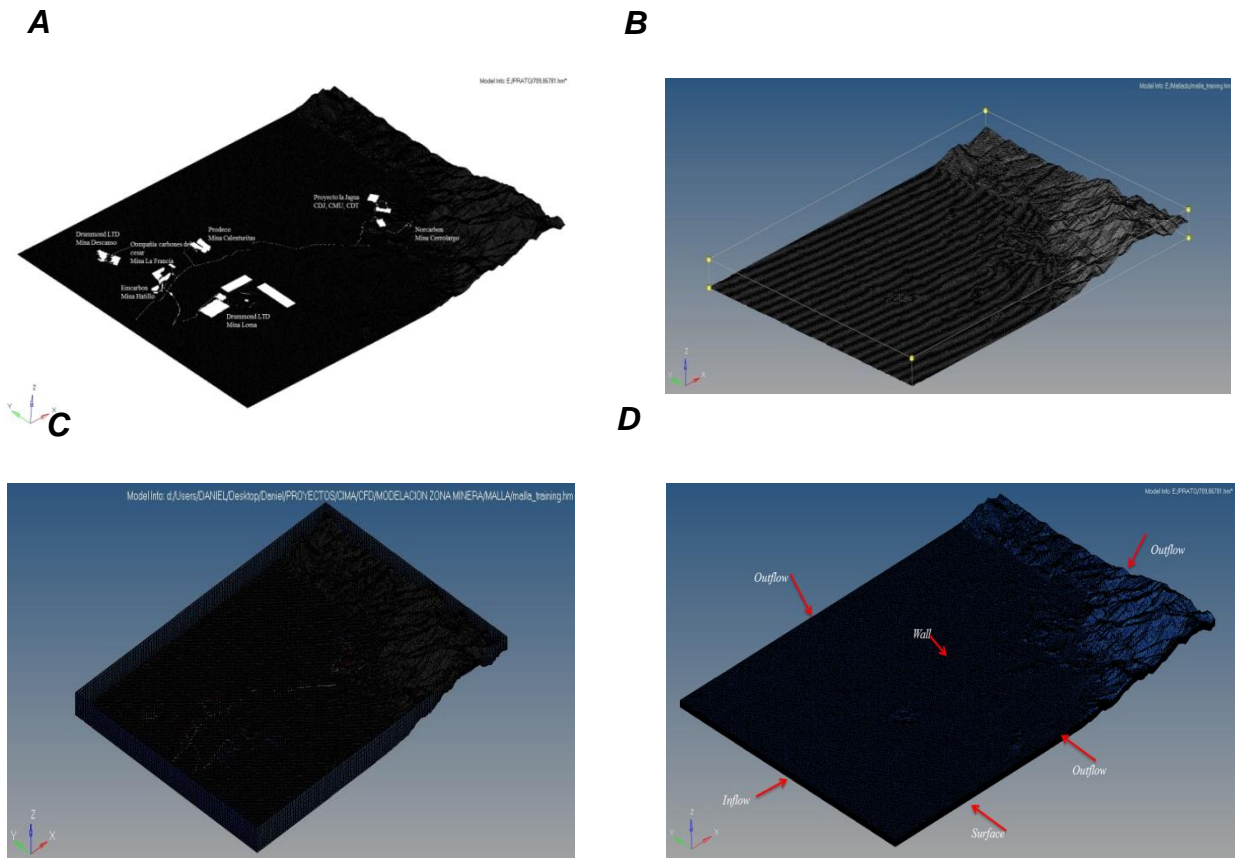
Como se mencionó anteriormente, para el mallado de la geometría se hace uso del paquete computacional HyperMesh. Este consta de un conjunto de herramientas que permiten generar un mallado óptimo para cada geometría. Existen varios módulos de mallado, siendo el tetraedro, hexaedro y prismas los principales.

Esta herramienta modela geometrías complejas como la de este caso y las divide en elementos simples a la hora de hacer el mallado, de esta forma, cuando se haga la fase de procesamiento, la geometría facilite el desarrollo óptimo de la simulación para predecir adecuadamente el comportamiento de los elementos y su interacción con el entorno de acuerdo a las condiciones que se le pongan al modelo.

En total, se hicieron 36 mallas con diferentes alturas de capa de mezcla y con una orientación de entrada de acuerdo a la dirección del viento, cada una de ellas tiene un número diferente de elementos y nodos, adicionalmente se utilizó un tipo de malla estructurada con cuadrados y hexaedros, ya que estos se ajustan más a la geometría de la malla; la malla está creada de forma tal que sea más precisa cerca de la superficie, por esta razón el tamaño de los elementos aumenta con la altura; en la sección de meteorología se explicará de forma más detallada la elección de la altura de capa de mezcla y las razones que se tuvieron en cuenta para realizar el número de mallas que se hicieron.

En la Figura 24 se muestra la malla en su versión final, con cada una de las minas, el volumen de control y la altura de capa de mezcla, que varía según las condiciones meteorológicas.

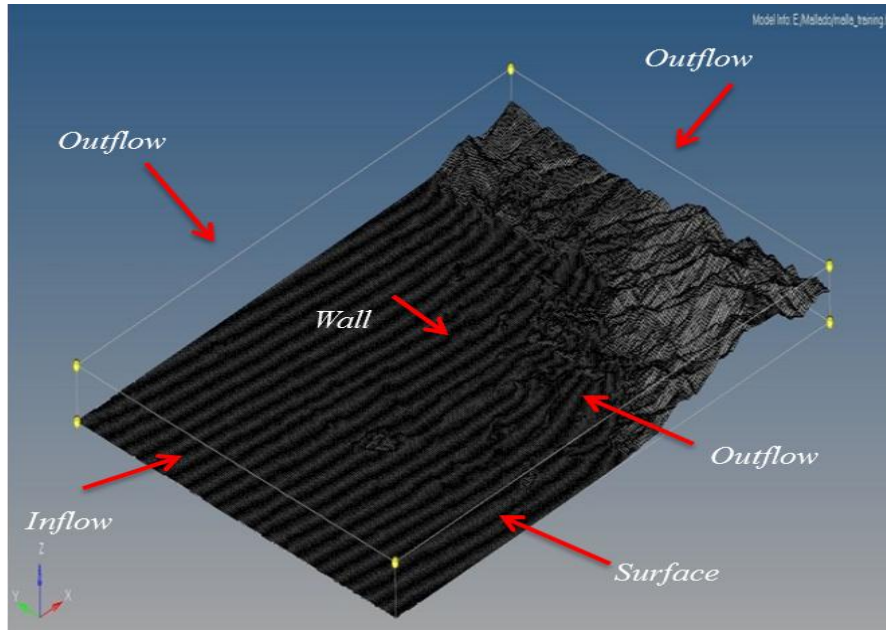
Figura 24 A. Localización de las fuentes de emisión; B. Construcción de elementos 3D; C-D. Definición de las condiciones de frontera



7.2 METEOROLOGÍA

La cantidad de datos meteorológicos que requiere un modelo CFD se simplifican considerablemente con respecto a los modelos Gaussianos ya que solo requieren datos de entrada en las condiciones de frontera. Para la solución numérica los cálculos de las propiedades en el fluido serán determinados por el mismo modelo, sin necesidad de alimentar al programa con valores meteorológicos en cada punto de la malla (es decir valores internos en el volumen de control). Es necesario identificar los tipos de frontera que corresponden a cada una de las caras en el problema a resolver. De esta manera se identifican las fronteras tal y como se muestra en la Figura 25.

Figura 25 Identificación de las condiciones de frontera



Para cada frontera, se necesita definir el tipo al cual pertenece, e introducir los parámetros que limitan el problema, a continuación se muestra la Tabla 4 con los valores correspondientes a cada región.

Tabla 4 Valores para las condiciones de frontera

Zona	Parámetro	Magnitud	Unidades
Condiciones de operación			
	Presión	100000	Pa
	Gravedad	-9.81	m/s ²
Condiciones de frontera			
Entrada	Velocidad de entrada	Perfil	m/s
	Temperatura	Perfil	°C/m
Salida	presión de salida	0	Pa

Como se puede observar solo es necesario fijar valores en las fronteras ya que el programa calcula los valores internos del volumen de control sin necesidad de utilizar datos meteorológicos a diferencia de los modelos Gaussianos.

Una vez se haya cargado la geometría en Fluent, se procede a meter información de entrada al modelo, específicamente en cuanto a información meteorológica se refiere. Para ello se tuvieron en cuenta parámetros primarios y secundarios de meteorología que son explicados a continuación:

7.2.1 Parámetros primarios

Generalmente las estaciones meteorológicas registran valores cada 1, 5, 10, 30 y 60 minutos. En caso de que no se tenga un valor horario para cada parámetro, se debe obtener el promedio de los parámetros previamente mencionados. Para los parámetros temperatura y velocidad del viento simplemente se calcula el promedio aritmético de los datos disponibles para cada hora.

- *Dirección del viento*

La dirección de viento se tomó de la información arrojada por la estación calenturitas desde el año 2009, que reporta la frecuencia y velocidades del viento en sus diferentes direcciones como se muestra en las Figuras 26-27.

Figura 26 Frecuencia de distribución de las velocidades de viento

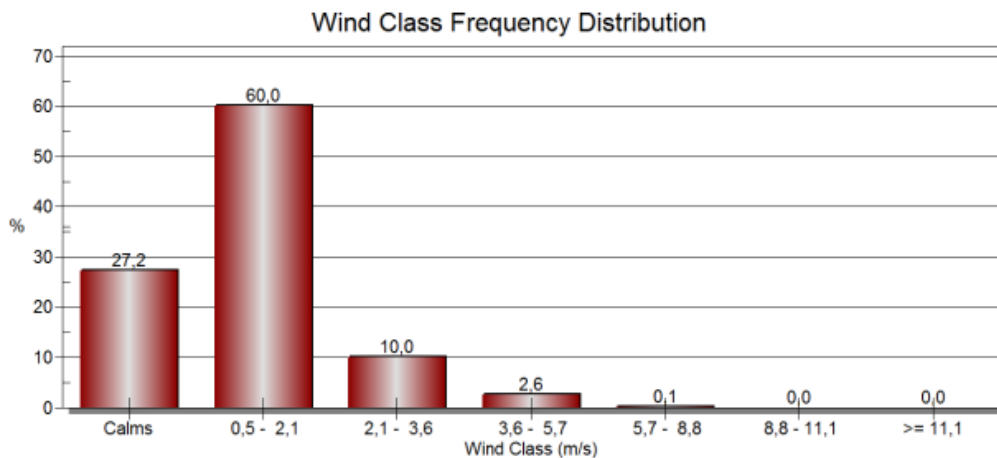
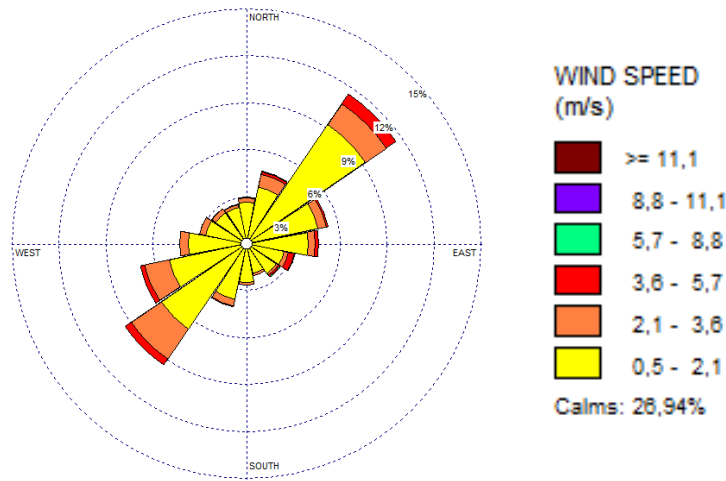


Figura 27 Rosa de vientos estación meteorológica Calenturitas



- **Perfil de velocidad**

El perfil de velocidad para cada una de las geometrías a modelar se obtiene mediante la siguiente ecuación:

$$V = \left(\frac{u^*}{k}\right) * \ln\left(\frac{h}{z_0}\right) \quad (7)$$

Donde:

u*: Velocidad de fricción

k (**Constante Von Kármán**): 0.4

h: Altura

Zo (**rugosidad**): 0.3

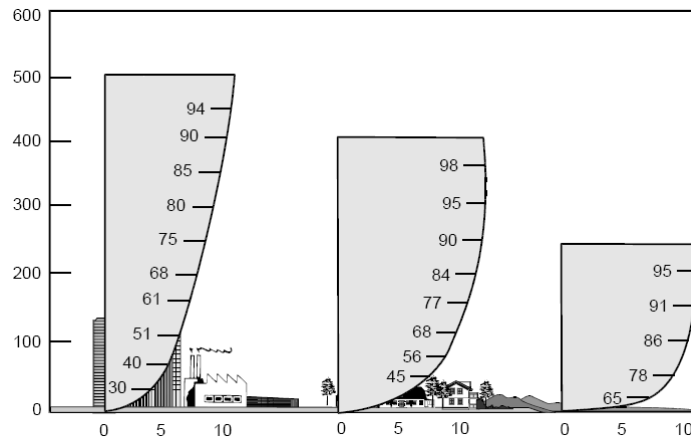
V: Velocidad del viento

La rugosidad para esta ecuación se definió en 0.3 debido a que este valor es el que corresponde específicamente suelos desérticos como el que se tiene en la región modelada.

La velocidad del viento que debe ser ingresada en un modelo gaussiano corresponde a la que prevalece a la altura media de la pluma. Esta altura cambia con la distancia. La velocidad del viento por su parte presenta un perfil que varía

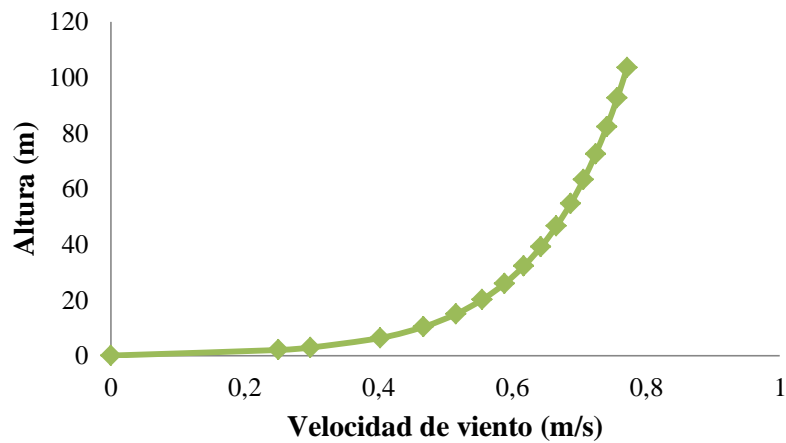
con la altura y con la rugosidad del área de estudio, como se presenta en la Figura 28. Por lo anterior, la velocidad que debe ser ingresada al modelo corresponde a la altura media efectiva de la fuente de emisión.

Figura 28 Ilustración del perfil de velocidad del viento sobre diferentes tipos de superficies



De la solución de esta ecuación para cada una de las direcciones y velocidades de viento definidas, se obtiene un perfil de velocidad como el que se muestra en la Figura 29.

Figura 29 Perfil de velocidad para uno de los casos que se modelaron



- **Perfil de temperatura**

El perfil de temperatura se definió mediante la siguiente ecuación, y sus datos fueron obtenidos del promedio de los datos arrojados por la estación meteorológica.

$$T = (\beta_m * h) + °C \quad (8)$$

Donde:

β_m : Gradiente de temperatura= -0.005 °C/m

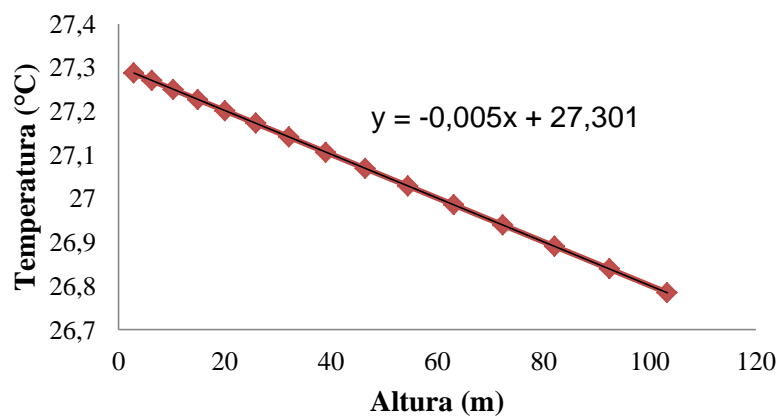
h: Altura (m)

°C: Temperatura

T: Perfil de temperatura

De la solución de esta ecuación para cada una de las direcciones y velocidades de viento definidas, se obtiene un perfil de temperatura como el que se muestra en la Figura 30.

Figura 30 Perfil de temperatura para uno de los casos que se modelaron



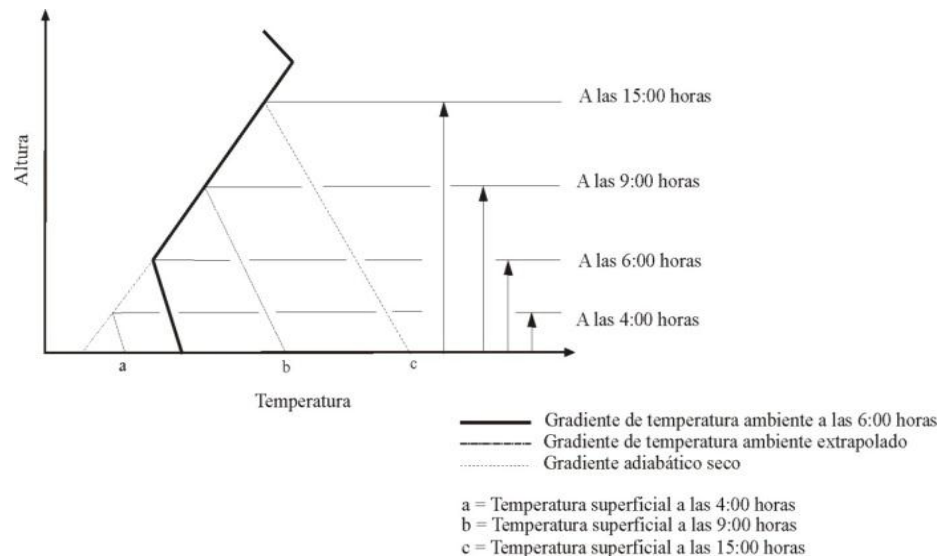
7.2.2 Parámetros secundarios

- Altura de la capa de mezcla

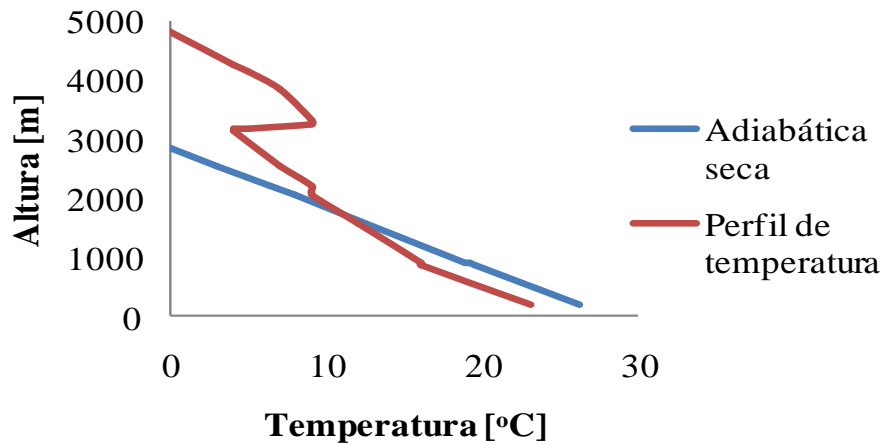
Esta se define como la capa de la atmósfera en la cual se desarrolla el proceso de dispersión y mezcla de los contaminantes debido a fenómenos turbulentos asociados a desequilibrios térmicos y/o mecánicos. La altura de capa de mezcla es definida por la altura a la cual la pendiente del gradiente adiabático es dibujada desde la temperatura estimada en la superficie de la tierra interceptando la línea del gradiente de temperatura, como se presenta en las Figuras 31 a-b. Lo anterior asumiendo que el cambio en el gradiente de temperatura ambiente es causado solo por el calentamiento de la superficie de la tierra y que la capa atmosférica que se encuentra debajo de la inversión tiene un gradiente de temperatura cercano al gradiente adiabático.

Figura 31 a. Variación de la altura de capa de mezcla durante el día. b. Variación de la temperatura con respecto a la altitud

a.



b.



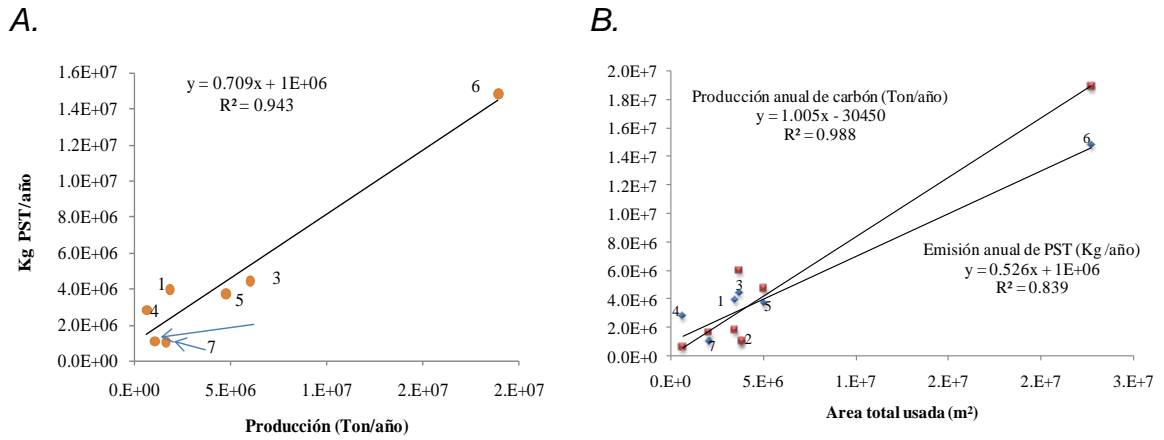
7.3 EMISIONES

El Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible y las empresas mineras brindaron la información necesaria para generar un inventario de emisiones que sirvió de base para asignar a cada fuente, un valor de emisión específico.

Es importante resaltar que en los inventarios de emisiones constituyen la mayor incertidumbre en el modelo; no obstante, se obtienen los factores de emisión de acuerdo a lo recomendado por la USEPA y a estos se les hace su respectivo ajuste dependiendo de la disponibilidad de la información. Posteriormente, se aplica mediante una hoja de cálculo la implementación del inventario de emisiones a 5 de las 7 minas que operan la región; otra de las empresas reportó datos propios que luego fueron comparados.

Una vez implementado el inventario, lo que se hace es comparar los parámetros de operación, donde se evalúan las métricas de control de emisiones al interior de la mina, la información obtenida se muestra en la Figura 32.

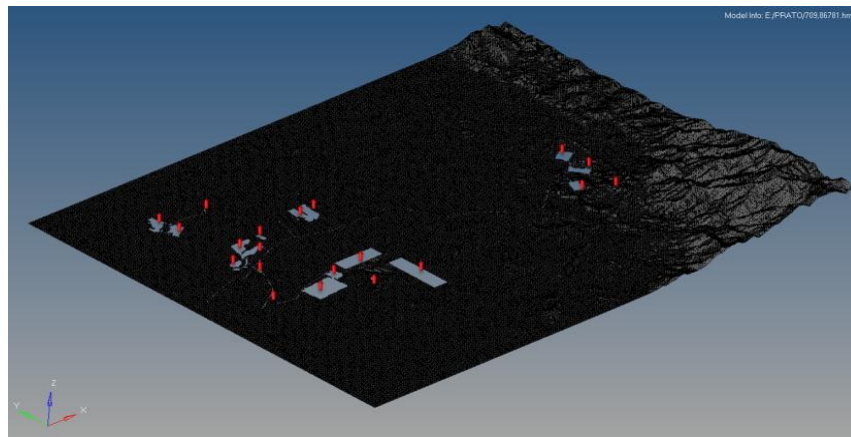
Figura 32 A. producción de carbón vs Kg de PST emitidos por año. B. Área cubierta vs kg de PST emitidas por año.



El índice de emisión para esta actividad establece una generación de 0.7Kg PST/Ton de carbón y de 0.5 kg PM₁₀/Ton carbón, al igual que un uso de áreas descubiertas de m² /Ton Carbón al año.

De acuerdo a la información disponible en el inventario de emisiones, se definen las fuentes de emisión tal y como se muestra en la Figura 33.

Figura 33 Fuentes de emisión en la zona minera.



Posteriormente, a cada uno de los puntos definidos como fuente de emisión, se le asignan unos valores dependiendo del tipo de fuente, de su ubicación y del tipo de contaminante, tal y como se puede observar en las Tablas 5 y 6 (Huertas, J.I. Huertas, M.E., Diaz, J. (2012). *Assessing precision and accuracy of atmospheric emission inventories*).

Tabla 5 Inventario de emisiones de PST

Table 2

Open pit coal mine TSP emissions for 2009. Pit, dump, stock and pit-dump via, pit-stock via and beltway are the area sources considered within mine (M's).

Sources	TSP emission intensities g/(m ² -s)						
	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7
Pit	5.0681E-05	3.4910E-06	1.1912E-05	9.1367E-04	9.8477E-06	2.6908E-05	1.2887E-05
Dump	8.6049E-06	5.4693E-06	5.8058E-06	4.3629E-04	1.0434E-05	6.6505E-06	7.0641E-06
Stock	3.5024E-05	2.0435E-04	1.3037E-03	2.0729E-03	2.9833E-03	1.4394E-04	5.3191E-05
Pit-Dump via	2.1887E-04	5.5485E-06	1.4318E-04	2.1503E-04	3.5172E-05	7.2359E-05	2.6565E-05
Pit-Stock via	4.3951E-05	1.0493E-07	1.4638E-05	2.3989E-07	1.1574E-06	8.8889E-04	9.9652E-06
Beltway	5.4694E-05	1.4430E-07	0.0000E+00	9.3328E-07	3.1034E-06	4.3277E-05	3.8399E-06
Total TSP emissions g/(m ² -s)	3.5713E-04	2.1911E-04	1.4792E-03	3.6390E-03	3.0430E-03	1.1820E-03	1.1351E-04
Total TSP emissions kg/year	3.9276E+06	7.4812E+05	2.3139E+06	1.6727E+06	3.0230E+06	1.4819E+07	9.0708E+05
Total coal production ton/year	1.8148E+06	1.038E+06	5.984E+06	6.000E+05	4.730E+06	1.840E+07	1.600E+06

Tabla 6 Inventario de emisiones para PM₁₀

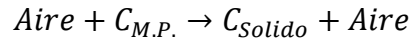
Table 3

Open pit coal mine PM₁₀ emissions for 2009. Pit, dump, stock and pit-dump via, pit-stock via and beltway are the area sources considered within mine (M's).

Sources	PM ₁₀ emission intensities g/(m ² -s)						
	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7
Pit	N/A	9.1190E-07	3.6886E-06	2.1817E-04	2.2692E-06	N/A	2.7715E-06
Dump	N/A	3.3140E-06	3.5163E-05	1.2939E-04	7.4352E-06	N/A	2.0763E-06
Stock	N/A	1.3114E-05	1.1823E-04	3.7075E-04	3.1944E-04	N/A	3.3714E-06
Pit-Dump via	N/A	1.0347E-06	7.6142E-05	5.5325E-05	9.6155E-06	N/A	4.9538E-06
Pit-Stock via	N/A	1.9638E-08	3.0505E-06	6.1307E-08	3.2104E-07	N/A	1.8583E-06
Beltway	N/A	2.6908E-08	0.0000E+00	2.4012E-07	8.4787E-07	N/A	7.1606E-07
Total PM ₁₀ emissions g/(m ² -s)	N/A	1.8421E-05	2.3627E-04	7.7394E-04	3.3993E-04	N/A	1.5748E-05
Total PM ₁₀ emissions kg/year	N/A	2.5762E+05	2.5519E+06	4.1201E+05	8.0099E+05	N/A	1.5690E+05
Total coal production ton/year	1.8148E+06	1.0438E+06	5.9984E+06	6.0000E+05	4.7230E+06	1.8940E+07	1.6000E+06

N/A: Not available.

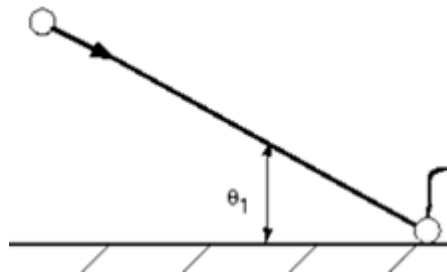
Cuando el material particulado llega al suelo se deposita en forma sólida. La siguiente ecuación define la reacción que se presentará cuando el contaminante entre en contacto con la superficie del suelo.



La ecuación anterior muestra el comportamiento del material particulado cuando se transfiere hacia la superficie por acción del aire, dejando como resultado material sedimentado en forma de cuerpos sólidos de diferente diámetro.

Fluent tiene una herramienta que se puede utilizar como mecanismo de deposición de partículas y lo que hace es terminar los cálculos de trayectoria de la partícula y registrarla como “atrapada”, la Figura 34 muestra como atrapa la partícula una vez toca la superficie.

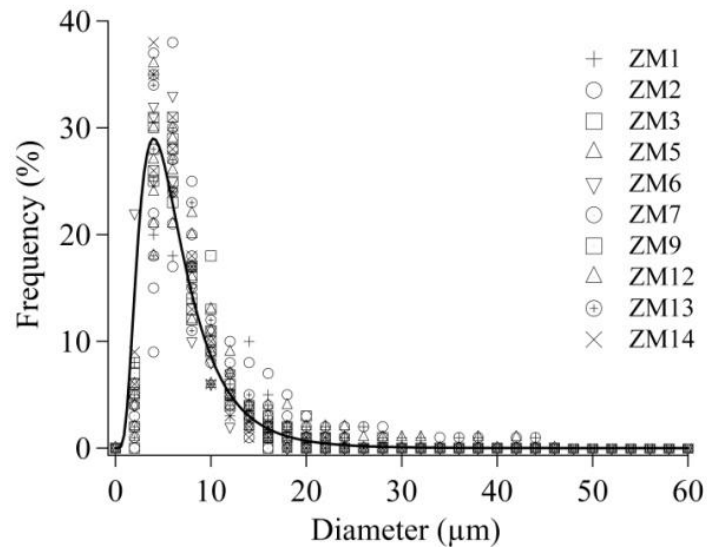
Figura 34 Mecanismo de deposición de partículas en Fluent



7.3.1 Distribución de tamaño de partícula

El trabajo titulado “*Characterization of airborne particles in an open pit mining región (Huertas, J.I., Huertas, M.E. and Solís, C. (2012))*”, se encuentra que el material particulado tiene una distribución lognormal (Figura 35) con una media de $5.46 \pm 0.32 \mu\text{m}$ y $3.6 \pm 0.38 \mu\text{m}$ para PST y PM_{10} respectivamente.

Figura 35 Distribución lognormal de material particulado



Fuente: José I. Huertas, María E. Huertas, Dora A. Solís. *Characterization of airborne particles in an open pit mining region*. Tecnológico de Monterrey, Toluca, 2011.

Debido a que el diámetro del material particulado cambia de acuerdo a la actividad que la genera, los modelos numéricos han empleado distribuciones de tamaño de partícula para caracterizar el diámetro medio de una muestra. A continuación se muestran algunas de estas distribuciones.

✓ Distribución Normal

$$N(d_p) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left[\frac{(d_p - \bar{d}_p)^2}{\sigma^2}\right]}$$

Donde

\bar{d}_p = Media aritmética del diámetro

σ^2 = Varianza del diámetro

σ = Desviación estándar

Esta distribución es empleada en la tecnología de aerosoles para caracterizar partículas que están monodispersas tal como las esferas de látex usadas en los laboratorios y en instrumentos de calibración.

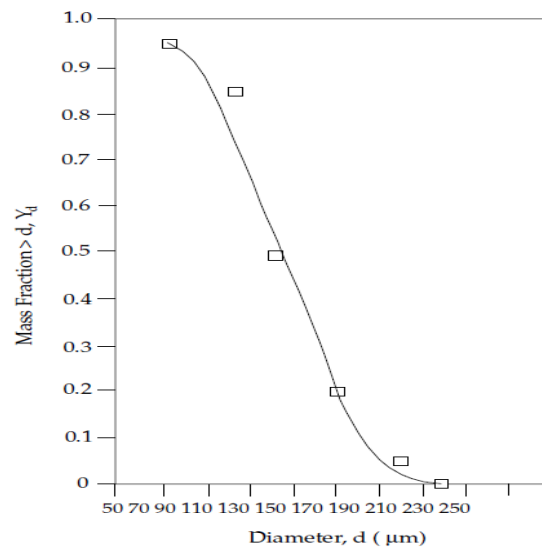
✓ Distribución Lognormal

$$N(d_p) = \frac{1}{d_p \sqrt{2\pi \ln \sigma}} e^{-\frac{1}{2} \left[\frac{(\ln d_p - \ln \bar{d}_p)^2}{\ln^2 \sigma} \right]}$$

Debido a que las partículas de aerosoles, partículas acuáticas y de material pulverizado contienen una larga desviación estándar, causando un alargado número de residuos que repercute en una larga cola para las partículas más grandes que la media, para tales caso se recomienda usar la distribución Lognormal.

✓ Distribución Weibull o Rosin-Rammler

Figura 36 Distribución Rosin-Rammler



Ecuación:

$$Y_d = e^{-\left[\frac{d}{\bar{d}}\right]^n} \quad (9)$$

Donde:

\bar{d} = Diámetro medio

n = Parámetro de esparcimiento

Esta distribución es útil para representar los tamaños de partículas generados por acciones de molienda, trituración entre otros.

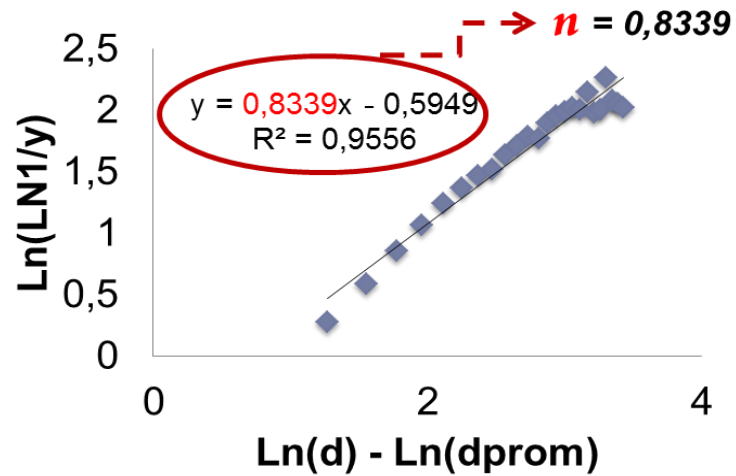
Fluent permite obtener el diámetro medio de la partícula a través de esta distribución, pero para validar los datos es necesario hacer una linealización de la ecuación para adaptar los valores de la distribución lognormal a la distribución Rosin-Rammler.

Para ello, se puede obtener el valor de n mediante la siguiente expresión:

$$n = \frac{\ln(\ln(Y_d))}{\ln\left(\frac{d}{\bar{d}}\right)}$$

Con los datos que hay se hace una gráfica de Ln(d)-Ln(dprom) vs Ln (Ln(1/y)) y con la ecuación se deduce el valor de n de la siguiente manera:

Figura 37 Valor de n para la linealización de la distribución de partículas en Fluent



Finalizado geometría, meteorología y emisiones se procede a preparar el modelo CFD para iniciar las simulaciones.

7.4 MODELO FLUENT (CFD).

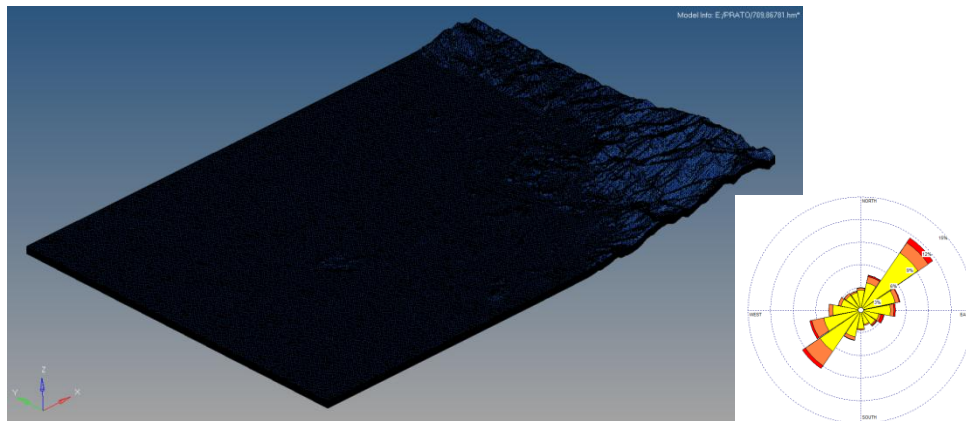
Los parámetros que se utilizaron para la simulación se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 7: Parámetros de entrada para el modelo CFD

Parámetro	Magnitud	Unidades
Estado	Estable	
Gravedad	-9.8	m/s^2
Turbulencia	K-épsilon	
Energía	Activada	
Distribución	Rosin-Rammler	
Deposición	Trap	
# Iteraciones	2000	

Se realizan simulaciones en 16 de las 32 direcciones que corresponden a los puntos cardinales mostrados en la rosa de los vientos y en diferentes velocidades de viento como se ve en la Figura 38 y Tabla 4-5.

Figura 38 Simulación en las 16 direcciones



En total fueron 36 simulaciones de acuerdo a las direcciones y velocidades de viento que se muestran en la Tabla 8.

Tabla 8 Dirección, velocidad y altura usada para cada una de las simulaciones

Dirección	Velocidad (m/s)	Altura (m)
Norte	0,5-2,1	103,3
	2,1-3,6	395,2
11,25-33,75	0,5-2,1	101,3
	2,1-3,6	413,2
	3,6-5,7	709,8
33,75-56,25	0-0,5	130,0
	0,5-2,1	286,7
	2,1-3,6	588,1
	3,6-5,7	826,6
56,25-78,75	0,5-2,1	82,9
	2,1-3,6	418,8
	3,6-5,7	862,8
Oriente	0,5-2,1	91,5
	2,1-3,6	383,8
	3,6-5,7	757,1
101,25-123,75	0,5-2,1	113,7
	2,1-3,6	423,8
	3,6-5,7	815,4
123,75-146,25	0,5-2,1	107,7
	2,1-3,6	295,9
146,25-168,75	0,5-2,1	91,3
	2,1-3,6	361,1
Sur	0,5-2,1	87,7
	2,1-3,6	370,3
191,25-213,75	0,5-2,1	93,7
	2,1-3,6	371,2
213,75-236,25	0,5-2,1	105,7
	2,1-3,6	352,0
236,25-258,75	0,5-2,1	107,6
	2,1-3,6	365,6
Occidente	0,5-2,1	86,04
	0,5-2,1	98,7
281,25-303,75	2,1-3,6	411,6
	0,5-2,1	96,7
303,75-326,25	2,1-3,6	397,2
	0,5-2,1	80,1
326,25-348,75	0,5-2,1	80,1

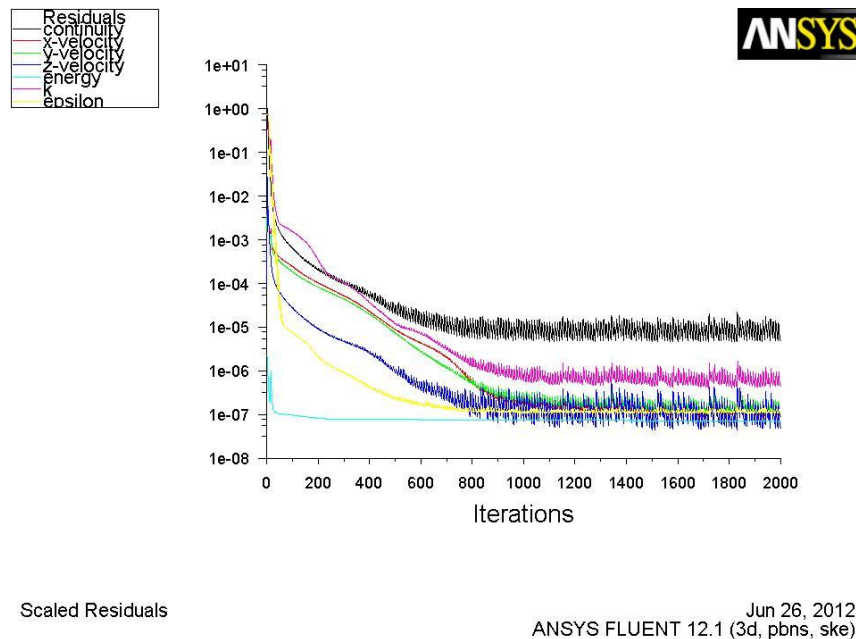
7.4.1 Análisis de convergencia

La modelación de calidad del aire usando CFD es un modelo no lineal y para solucionarlo utiliza un proceso iterativo para mejorar la solución hasta que llega a un punto de convergencia. La convergencia es un indicador para determinar si el modelo ha logrado estabilizarse; en términos generales, convergencia está asociada a la precisión y exactitud con la que el problema se resolvió.

Como se puede observar en la Figura 39, los residuales bajaron entre 5 y 6 órdenes de magnitud; lo ideal durante el proceso es que los residuales bajen entre 3 y 6 órdenes de magnitud, lo que quiere decir que la simulación se ha estabilizado a lo largo de las iteraciones realizadas y que aparentemente se tienen resultados confiables. Para este caso el modelo converge después de 150 – 200 iteraciones, pero se deja hasta 2000 para asegurar que los residuales se estabilicen.

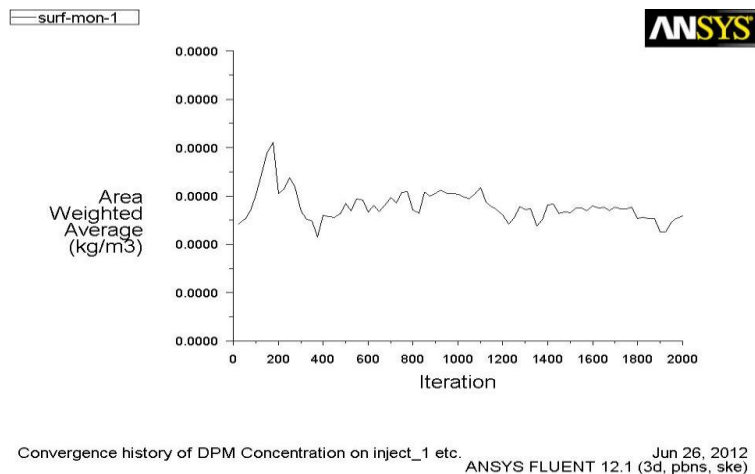
De la siguiente Figura se puede decir que en términos del comportamiento de los valores residuales durante las simulaciones, se obtuvieron resultados adecuados, garantizando la estabilidad del modelo en 2000 iteraciones.

Figura 39 Gráfica de Residuales durante la convergencia



Adicionalmente se definió un monitor para reportar la concentración en la superficie desde el inicio hasta el final de la simulación, tal como se muestra en la Figura 40.

Figura 40 Monitor de concentración en la superficie durante la simulación



La razón de poner un monitor durante la simulación es que esto permite asegurarse de que el valor de la concentración para este caso, no cambia al final y así asegurar la confiabilidad de los resultados que arrojen las corridas.

Finalmente, se deduce que efectivamente hay coherencia entre la convergencia y estabilidad del modelo con los reportes que arroja la simulación, lo que permite tener más confiabilidad en el modelo y en los resultados obtenidos.

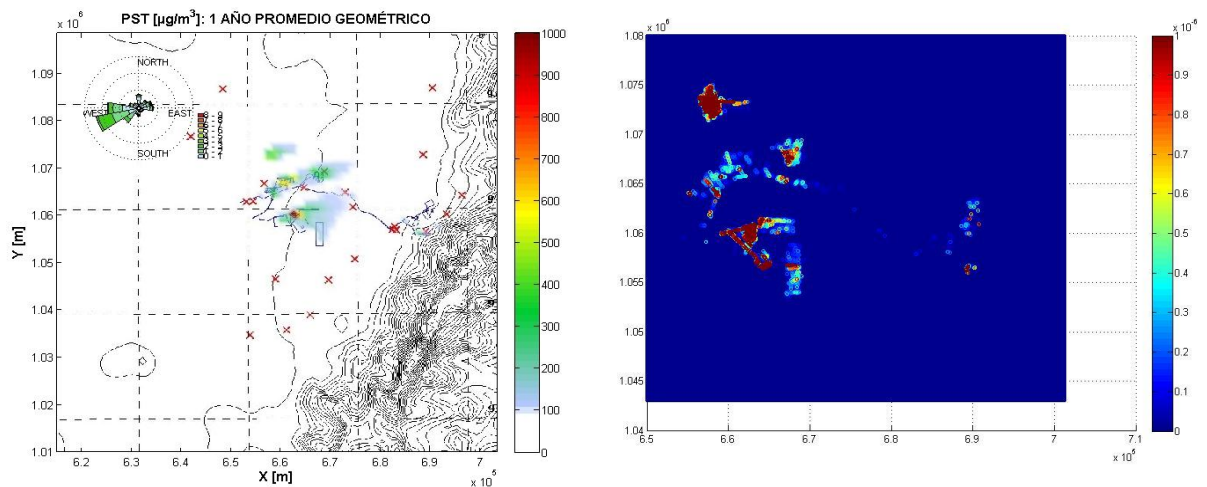
7.4.2 Costo computacional

Para las simulaciones se utilizó un servidor de 16 procesadores, con 24 GB de memoria RAM y 125 GB de memoria en disco; el paquete de CFD utilizado fue ANSYS Fluent 14.1; las corridas se hicieron en paralelo utilizando 8 procesadores por cada simulación. El tiempo por cada simulación oscila entre las 4 y las 24 horas, dependiendo del tamaño de la malla; el número total de corridas fueron 36.

7.5 RESULTADOS

En la siguiente tabla se comparan las 16 direcciones en cuanto a concentración promedio geométrica anual de material particulado en el suelo.

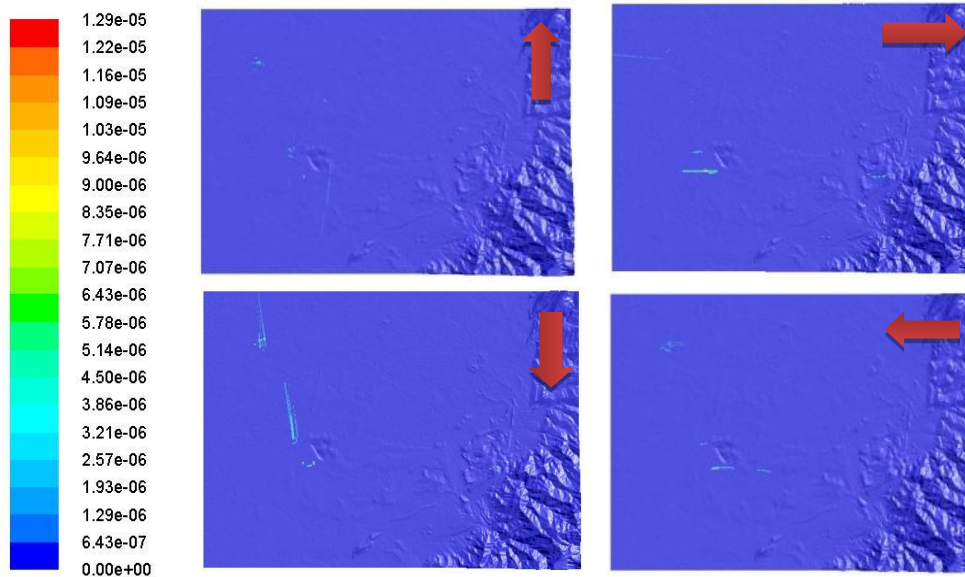
Figura 41 Comparación de la concentración promedio geométrica anual obtenida con AERMOD (Derecha) Vs la obtenida con Fluent (Izquierda).



La figura mostrada anteriormente es un resultado preliminar y no definitivo del trabajo realizado debido a la complejidad del modelo para el análisis pos procesamiento básicamente porque la capacidad de cómputo se convierte en una limitante en este punto, sin embargo se puede apreciar que empieza a haber una similitud en los resultados obtenidos con Fluent.

A continuación se muestran las gráficas de concentración en las direcciones Norte, Sur, Oriente y Occidente, de las alturas de capa de mezcla más altas por cada dirección:

Figura 422 Concentración en dirección Norte (superior izquierda), Sur (inferior izquierda), Oriente (Superior derecha), Occidente (inferior derecha).



Como se puede observar en la Figura 42, los mayores índices de concentración se encuentran en zonas muy cercanas a las minas; además, según los resultados obtenidos, se deduce que la concentración de material particulado disminuye conforme aumenta la altura de capa de mezcla.

Lo anterior se debe a que en la capa de la atmósfera en la cual se desarrolla el proceso de dispersión y mezcla de los contaminantes, se presentan fenómenos turbulentos asociados a desequilibrios térmicos y/o mecánicos.

8. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Este trabajo es un primer paso para validar la aplicación de un modelo CFD en la modelación de calidad del aire; aún queda mucho trabajo por hacer en este campo, pues el desarrollo de este tipo de modelos dependen en gran parte de una buena capacidad de cómputo y de la información que se utiliza para los datos de entrada de la simulación.

El desarrollo de este proyecto permitió avanzar en la definición de una metodología para el uso de CFD en modelación de calidad del aire.

9. TRABAJO FUTURO

Actualmente se sigue trabajando estudiando la concentración a 2 metros del suelo y obteniendo la concentración punto a punto a nivel del suelo, además de la deposición para así poder validar la información contra los resultados arrojados por AERMOD. De esta forma se tendrá certeza de que la modelación de calidad del aire usando CFD brinda resultados cercanos a la realidad.

Adicionalmente, se está aplicando la metodología usada para una sola mina (Drummond) y validar los resultados de concentraciones con los ya hechos previamente con AERMOD.

Queda un último esfuerzo por validar la información obtenida y compararla contra los resultados que reporta la red de monitoreo de calidad del aire de la región y con los resultados arrojados por AERMOD para demostrar que la modelación de calidad del aire usando CFD es una herramienta que brinda resultados cercanos a la realidad y que puede convertirse en uno de los modelos más usados para estudiar el comportamiento de las partículas.

BIBLIOGRAFÍA

1. **Sinha, S., Banerjee, S.P.**, 1997. *Characterization of haul road in Indian open cast iron ore mine. Atmospheric Environment* 31, 2809e2814.
2. **Chakraborty, M.K., et al.**, 2002. *Determination of the emission rate from various opencast mining operations. Environmental Modeling & Software* 17, 467e480
3. **Dr. John F. Wendt, 2009.** *Computational fluid dynamics an introduction.* Von Karnan Institute.)
4. **Rafael Ballesteros Tajadura, et al.**, *Técnicas numéricas en mecánica de fluidos.* Universidad de Oviedo, 2003.
5. **Wheeler, A.J., Williams, I., Beaumont, R.A., Manilton, R.S.**, 2000. *Characterization of particulate matter Sampled during a study of Children's Personal exposure to airborne particulate matter in a UK urban Environment. Environmental Monitoring and Assessment* 65, 69e77.
6. **José I. Huertas, María E. Huertas, Sebastián Izquierdo, Enrique D. González.** *Air quality impact assessment of multiple open pit coal mines in northern Colombia.* Tecnológico de Monterrey, Toluca: ELSEVIER, 2011.
7. **José I. Huertas, María E. Huertas, Dora A. Solís.** *Characterization of airborne particles in an open pit mining region.* Tecnológico de Monterrey, Toluca, 2011.
8. **José I. Huertas, María E. Huertas, Jenny Díaz.** *Assessing the precision and accuracy of atmospheric emission inventories,* University of Bourogne, France, 2011.
9. **José I. Huertas, Dumar A. Camacho, Maria E. Huertas.** *Standardized emissions inventory methodology for open pit mining areas.* Tecnológico de Monterrey, Toluca, 2011.
10. **Eloy Vilchis, 2010.** *Estudio exploratorio del uso de CFD para modelar la dispersión y deposición de material particulado en zonas mineras a cielo abierto.* Centro de Investigación en Mecatrónica Automotriz. Tecnológico de

Monterrey. Eduardo Monroy Cárdenas No. 2000. Código Postal 50110. Toluca. México.

11. **S.A Silvester, I.S. Lowndes, S.W Kingman and D.M. Hargraves.** *The application of an improved multi-scale computational modeling techniques to predict fugitive dust dispersion and deposition within and from surface mining operation.* 12th U.S/North American Mine Ventilation Symposium, Wallace, 2008.
12. **S.A Silvester, I.S. Lowndes, D.M. Hargraves.** *A computational study of particulate emissions from open pit quarry under neutral atmospheric conditions.* Sheffield, UK : ELSEVIER, 2009.
13. **Turner, D.B., 1970.** *Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates.* U.S. Environmental Protection Agency (Office of Air Programs).
14. **Mkhosi, Margaret Msongi.** *Computational fluid dynamics analysis of aerosol deposition in pebble beds.* Ohio : ProQuest, 2007
15. **José I. Huertas, et al, 2008.** *Guía Nacional de Modelación de Calidad del Aire.* Centro de Investigación en Mecatrónica Automotriz. Tecnológico de Monterrey.
16. **Susana Torno Lougedo et al, 2008.** *Emisiones de material particulado en almacenamiento de minerales a la interperie.* Universidad de Oviedo. Departamento de explotación y prospección de minas.
17. **Cowherd CE (1988)** *Control of open fugitive dust sources,* EPA-450/3- 88-008. USEPA
18. **USEPA (2004)** *AERMOD: Description of model formulation.* U.S. Environmental Protection Agency.
19. **USEPA (2006a)** *Revision of emission factors for AP-42. Chapter 13: miscellaneous source. Section 13.2.2: Unpaved Roads (Fugitive Dust Sources)* U.S. Environmental Protection Agency. [.http://www.epa.gov/ttn/chief/ap42/index.html](http://www.epa.gov/ttn/chief/ap42/index.html). Accessed 16 May 2009.
20. **USEPA (2006b)** *Revision of emission factors for AP-42. Chapter 13: Miscellaneous Source. Section 13.2.4: Aggregate Handling and Storage Piles*

(Fugitive Dust Sources) U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/ttn/chief/ap42/index.html>. Accessed 2 June 2009

21. **Webgis [online]**. Waterloo, Ontario. Lakes environmental software, 2000.
Disponible en internet: <<http://www.webgis.com>>.

LICENCIA DE USO – AUTORIZACIÓN DE LOS AUTORES

Actuando en nombre propio identificado (s) de la siguiente forma:

Nombre Completo Daniel Fernando Prato Sánchez

Tipo de documento de identidad: C.C. T.I. C.E. Número: 1.136.881.738

El (Los) suscrito(s) en calidad de autor (es) del trabajo de tesis, monografía o trabajo de grado, documento de investigación, denominado:

MODELACION DE LA DISPERSION DE TSP Y PM10 EN ZONA MINERA DEL CESAR, COLOMBIA POR MEDIO DE CFD

Dejo (dejamos) constancia que la obra contiene información confidencial, secreta o similar: SI NO
(Si marqué (marcamos) SI, en un documento adjunto explicaremos tal condición, para que la Universidad EAN mantenga restricción de acceso sobre la obra).

Por medio del presente escrito autorizo (autorizamos) a la Universidad EAN, a los usuarios de la Biblioteca de la Universidad EAN y a los usuarios de bases de datos y sitios webs con los cuales la Institución tenga convenio, a ejercer las siguientes atribuciones sobre la obra anteriormente mencionada:

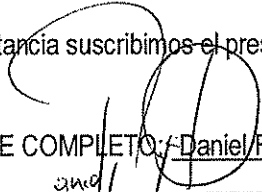
- A. Conservación de los ejemplares en la Biblioteca de la Universidad EAN.
- B. Comunicación pública de la obra por cualquier medio, incluyendo Internet
- C. Reproducción bajo cualquier formato que se conozca actualmente o que se conozca en el futuro
- D. Que los ejemplares sean consultados en medio electrónico
- E. Inclusión en bases de datos o redes o sitios web con los cuales la Universidad EAN tenga convenio con las mismas facultades y limitaciones que se expresan en este documento
- F. Distribución y consulta de la obra a las entidades con las cuales la Universidad EAN tenga convenio

	CORRESPONDENCIA
	RECIBIDA
	FACULTAD DE INGENIERÍA
	26 JUN 2013
	6:17
Hora:	
Número Radicación:	
Recibido por:	<u>Ka fernan</u>
LA RECEPCIÓN DE ESTE DOCUMENTO NO IMPLICA LA ACEPTACIÓN DE SU CONTENIDO	

Con el debido respeto de los derechos patrimoniales y morales de la obra, la presente licencia se otorga a título gratuito, de conformidad con la normatividad vigente en la materia y teniendo en cuenta que la Universidad EAN busca difundir y promover la formación académica, la enseñanza y el espíritu investigativo y emprendedor.

Manifiesto (manifestamos) que la obra objeto de la presente autorización es original, el (los) suscritos es (son) el (los) autor (es) exclusivo (s), fue producto de mi (nuestro) ingenio y esfuerzo personal y la realizó (zamos) sin violar o usurpar derechos de autor de terceros, por lo tanto la obra es de exclusiva autoría y tengo (tenemos) la titularidad sobre la misma. En vista de lo expuesto, asumo (asumimos) la total responsabilidad sobre la elaboración, presentación y contenidos de la obra, eximiendo de cualquier responsabilidad a la Universidad EAN por estos aspectos.

En constancia suscribimos el presente documento en la ciudad de Bogotá D.C.,

NOMBRE COMPLETO: <u>Daniel Fernando Prato Sánchez</u>	NOMBRE COMPLETO: _____
FIRMA: <u></u>	FIRMA: _____
DOCUMENTO DE IDENTIDAD: <u>1.136.881.738</u>	DOCUMENTO DE IDENTIDAD: _____
FACULTAD: <u>Ingeniería</u>	FACULTAD: _____
PROGRAMA ACADÉMICO: <u>Ingeniería Ambiental</u>	PROGRAMA ACADÉMICO: _____

Fecha de firma: 26/06/2013