

Aplicaciones del modelo lagrangiano de dispersión atmosférica CALPUFF

Anel Hernández-Garcés ^(1*); Ulises Jáuregui-Haza ⁽²⁾; José A. González ⁽³⁾; Juan J. Casares-Long ⁽³⁾; Santiago Saavedra-Vázquez ⁽³⁾; Fernando Guzmán-Martínez ⁽²⁾; Antonio Torres-Valle ⁽²⁾

⁽¹⁾*Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría (ISPJAE), Cuba. anel@quimica.cujae.edu.cu*

⁽²⁾*Instituto Superior de Tecnología y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Cuba.*

⁽³⁾*Universidad de Santiago de Compostela (USC), España.*

Recibido: septiembre 10, 2015	Aceptado: diciembre 30, 2015
-------------------------------	------------------------------

Resumen

En este trabajo se analiza la aplicación del modelo lagrangiano de dispersión atmosférica CALPUFF. Se evalúan los acoplamientos aplicados, el tamaño de la región y su resolución, los periodos de simulación, los niveles en altura, la complejidad del entorno, la versatilidad de las aplicaciones del modelo, así como los distintos tipos de especies y fuentes modeladas.

Palabras clave: Modelo, dispersión atmosférica, CALPUFF

Lagrangian atmospheric dispersion model CALPUFF applications

Abstract

This paper analyzes the application of Lagrangian atmospheric dispersion model CALPUFF. Applied couplings, region size and resolution, simulation periods, height levels, complexity of the environment, versatility of applications and different types of species and sources modeled are evaluated.

Keywords: Model, atmospheric dispersion, CALPUFF

1. Introducción

La modelación de la contaminación atmosférica es actualmente imprescindible para desarrollar diferentes tareas que tienen como objetivo garantizar la buena calidad del aire, y así impedir que alguna alteración pueda dañar a las personas o al medio ambiente (Zannetti, 1990). Aunque, a pesar de su utilidad, los modelos de calidad de aire no son la solución final al problema de la contaminación atmosférica, sí permiten suplir las carencias que tienen las medidas de campo en cuanto a resolución espacial y temporal, puesto que una red permanente de estaciones automáticas, con la resolución espacial que pueden proporcionar algunos modelos, resultaría extremadamente costosa de instalar y mantener de forma permanente en correcto funcionamiento.

El objetivo de los modelos de calidad del aire es encontrar una relación entre las sustancias que son emitidas a la atmósfera, ya sea por causas naturales o antropogénicas, y las concentraciones de estas sustancias, u otras que se originan a partir de ellas en la atmósfera.

Si bien existen modelos basados en experimentos de laboratorio que han permitido identificar algunos mecanismos del transporte de contaminantes atmosféricos, el problema global solo ha sido abordado por los modelos matemáticos, con una mayor o menor dosis de empirismo. Estos están constituidos por un conjunto de ecuaciones algebraicas y/o diferenciales, que describen aspectos físicos y químicos del problema y requieren una calibración específica sobre cada problema considerado (Zannetti, 1990).

Los modelos de difusión atmosférica tratan, de manera aproximada, resolver las ecuaciones de difusión que gobiernan el movimiento de los contaminantes en el flujo turbulento atmosférico. Según el método de solución se subdividen en: modelos de caja, modelos gaussianos y modelos de diferencias finitas que enfocan la solución a la ecuación de difusión atmosférica utilizando diferentes planteamientos físicos: euleriano y lagrangiano. Recientemente Hernández-Garcés y colaboradores (2015a) analizaron la aplicación de los modelos atmosféricos de dispersión disponibles, desde modelos simples a complejos y evaluaron la idoneidad de las diferentes configuraciones dentro de diferentes entornos, en cuanto a la escala, la complejidad del entorno y los parámetros de concentración, tanto para modelos comerciales como no comerciales.

El objetivo del presente trabajo es analizar, a partir de una búsqueda bibliográfica, la aplicación del modelo CALPUFF, como el modelo lagrangiano de dispersión atmosférica más empleado actualmente. Para ello se evalúan los acoplamientos aplicados, el tamaño de la región de estudio y su resolución, los periodos de simulación, los niveles en altura, la complejidad del entorno, la versatilidad de las aplicaciones del modelo y los distintos tipos de especies y fuentes modeladas.

2. Materiales y métodos

2.1. Generalidades de los modelos de dispersión atmosférica

Existe un gran número y variedad de alternativas aplicadas en la representación del flujo de contaminantes en la atmósfera (De Castro, 2001), lo que sugiere que no existe un único problema, sino una combinación de fenómenos, y que la elección de una u otra solución depende fundamentalmente de las escalas de espacio y tiempo exigidas, que condicionan la consideración de estos fenómenos.

Una de las soluciones más extendidas al problema del comportamiento de los contaminantes en la atmósfera son los modelos de dispersión atmosférica. Su planteamiento general sigue el esquema de un modelo de procesos o fenómenos, es decir, consisten en aplicar un modelo matemático a cada fenómeno que experimentan los contaminantes en la atmósfera, y sumar las contribuciones de todos los modelos de proceso en una ecuación de balance o conservación para cada propiedad considerada.

El balance de contaminante en la atmósfera aplicable de forma general es (Seinfeld, 2012):

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j c_i) = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j^2} + R_i(c_1, \dots, c_N, T) + S(\bar{x}, t), \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (\text{Ec } 1)$$

donde el primer término representa la variación de concentración del contaminante i en el tiempo; el segundo, la entrada neta de contaminante asociada al flujo atmosférico (advección y turbulencia); el tercero, la variación de la concentración de contaminante debido a la difusión molecular; el cuarto, la velocidad de remoción del contaminante por reacción química; y el quinto, la aparición de contaminante en el entorno considerado, proveniente de focos emisores en el propio entorno.

Sin embargo, la resolución analítica de estas ecuaciones no es posible, puesto que no se conoce la forma de la función $u_j c_i$ ni de la difusión turbulenta asociada. Además, hay que tener en cuenta que es necesario resolver las N ecuaciones diferenciales simultáneamente, para tener en cuenta la influencia de la concentración de un contaminante c_i en la velocidad de reacción R_i de los otros contaminantes y, por tanto, en su balance. Por ello existen dos aproximaciones generales a la resolución de este problema, las ya mencionadas euleriana y lagrangiana. Las dos soluciones son alternativas válidas al mismo problema y, además, se puede demostrar que aplicando las mismas aproximaciones en las dos vías se obtiene la

misma solución analítica: la ecuación de difusión gaussiana (Seinfeld, 2012). Sin embargo, al margen de estas aproximaciones, sus resultados y sus posibilidades de aplicación son muy diferentes.

Los modelos lagrangianos utilizan dos sistemas de coordenadas para el cálculo del desplazamiento de los contaminantes: uno absoluto, referido a las coordenadas del foco emisor, en el que se calcula la traslación media de los elementos contaminantes considerados; otro relativo, referido a un punto representativo de la traslación media del penacho de contaminantes, para obtener una mejor dispersión debida a la turbulencia.

2.1.1. La solución lagrangiana

En la aproximación lagrangiana (Seinfeld, 2012), el estudio se centra en el comportamiento de partículas o elementos discretos de contaminante representativos de este. Si se considera un elemento de contaminante, sometido a un régimen turbulento en una posición $\vec{x}'$ y en un tiempo t' ; su movimiento vendrá descrito por su trayectoria $\vec{X}(\vec{x}', t', t)$, que está definida por su posición de origen $\vec{x}'$ y su posición final $\vec{X}(\vec{x}', t', t)$ en el instante t .

Como la concentración de las diferentes especies en la atmósfera es una variable aleatoria que no puede ser determinada, por lo que hay que limitarse a tratar de conocer algunas propiedades estadísticas de ella. Se define a $\psi(x_1, x_2, x_3, t) dx_1 dx_2 dx_3 = \psi(\vec{x}, t) d\vec{x}$ como la probabilidad de que un elemento de contaminante se encuentre en un tiempo t dentro de un elemento de volumen $(x_1 \cdots x_1 + dx_1, x_2 \cdots x_2 + dx_2, x_3 \cdots x_3 + dx_3)$. Por lo tanto, $\psi(\vec{x}, t)$ es la función de densidad de probabilidad, que por definición debe verificar (Seinfeld, 2012),

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\vec{x}, t) d\vec{x} = 1 \quad (\text{Ec 2})$$

Por otro lado, la probabilidad de que un elemento de contaminante se encuentre en una posición $\vec{x}$ en un tiempo t puede expresarse como el producto de dos densidades de probabilidad: la densidad de probabilidad de transición de que el elemento de contaminante está en $\vec{x}'$ en un tiempo t' , se desplace hasta $\vec{x}$ en el instante t , expresada como $Q(\vec{x}, t | \vec{x}', t')$. Y la densidad de probabilidad de que un elemento de contaminante se encuentre en $\vec{x}'$ en el instante t , para todas las posiciones

$$\text{iniciales } \vec{x}', \quad \psi(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\vec{x}, t | \vec{x}', t') \psi(\vec{x}', t') d\vec{x}'$$

Considerando un número n de elementos de contaminante, la suma de todas las densidades de probabilidad de todos los elementos de una misma especie representará el número (probable) de elementos encerrados en el volumen considerado, es decir, la concentración media:

$$\langle c(\vec{x}, t) \rangle = \sum_{i=1}^n \psi_i(\vec{x}, t) \quad (\text{Ec 3})$$

Además, habrá que tener en cuenta tanto la distribución inicial de contaminante como el aporte de los focos emisores, $S(\vec{x}, t)$, de modo que la expresión lagrangiana general para la concentración media es,

$$\langle c(\vec{x}, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0) \langle c(\vec{x}_0, t_0) \rangle d\vec{x}_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{t_0}^t Q(\vec{x}, t | \vec{x}', t') S(\vec{x}', t') dt' d\vec{x}' \quad (\text{Ec 4})$$

Según esta expresión, el conocimiento de la forma de la función Q permitiría la determinación de $\langle c(\vec{x}, t) \rangle$; sin embargo, esta función depende de propiedades de la turbulencia que no son conocidas, por lo que de nuevo será preciso asumir algunas aproximaciones para obtener un resultado.

2.2. Modelo CALPUFF

Uno de los modelos lagrangianos más versátiles y más aplicado en años recientes es CALPUFF (Scire et al., 2000a) que es un modelo no estacionario, multicapas y multiespecies, de dispersión de puffs, que puede simular los efectos, temporales y espaciales, de las condiciones meteorológicas en el transporte, la transformación y la deposición de contaminantes en la atmósfera. El modelo CALPUFF puede utilizar los campos meteorológicos generados por el modelo CALMET (Scire et al., 2000b) o, en su defecto, las medidas de estaciones meteorológicas en formatos convencionales.

El modelo CALPUFF contiene algoritmos que consideran diversos fenómenos: efectos en la cercanía de los focos emisores, como el flujo descendente tras obstáculos, la elevación del penacho en la zona de transición meteorológica, la penetración parcial del penacho sobre la capa de mezcla, las interacciones del terreno a escala submall, así como efectos a largo plazo, como la deposición de contaminantes (lavado húmedo y deposición seca), transformación química; también, la cizalladura vertical del viento, las interacciones costeras y las singularidades del transporte sobre masas de agua. CALPUFF

también puede simular variaciones arbitrarias de las emisiones, y contiene diferentes opciones para el tratamiento de los procesos físicos de los contaminantes en la atmósfera, en diferente nivel de detalle en función de la aplicación del modelo y que se amplían a continuación.

2.2.1. Flujo descendente tras obstáculos

La dispersión y el efecto de sobreelevación por densidad de penachos emitidos por chimeneas pequeñas se pueden modificar significativamente por la presencia de edificios u otros obstáculos a la circulación del aire y CALPUFF la calcula por dos vías: el modelo de Huber-Snyder (Huber y Snyder, 1976) que se aplica cuando la altura de la fuente es mayor que la del edificio más la mitad del factor de disminución lineal al cambio inducido por obstáculos a los coeficientes de dispersión, mayor que la altura menor del edificio o mayor que la anchura proyectada; o el modelo de Schulman-Scire (Scire y Schulman, 1980) que aplica un factor de disminución lineal al cambio inducido por obstáculos a los coeficientes de dispersión, tiene en cuenta el efecto del descenso en la elevación del penacho y se utiliza para chimeneas menores que la altura del edificio más la mitad del factor de disminución lineal.

2.2.2. Penetración parcial del penacho sobre la capa de mezcla

Los penachos de chimeneas altas pueden interactuar con frecuencia con la capa de inversión en la parte superior de la capa de mezcla. Una fracción de la masa del penacho puede penetrar en la inversión y, por lo tanto, no estará disponible para su mezcla hacia la superficie. CALPUFF estima esta fracción por el método de Manins (1979).

2.2.3. Interacciones del terreno a escala submalla

El algoritmo de CALPUFF adopta el concepto de división del flujo. Cuando el flujo de aire se aproxima a cualquier elevación del terreno, se divide en dos capas: En la capa superior, el flujo tiene la energía suficiente para transportar un paquete de fluido hacia arriba y sobre la elevación, superando el gradiente de densidades derivado de una condición de estabilidad atmosférica. En la capa inferior, el flujo no supera la elevación y se verá obligado a viajar alrededor de ella.

Deposición húmeda y deposición seca

El módulo de deposición de CALPUFF proporciona dos métodos que reflejan, a diferentes niveles de detalle, el tratamiento de la deposición seca. El primero comprende un tratamiento completo para distintas velocidades de deposición espacial y temporal de gases/partículas predichas por un modelo de deposición basado en resistencias. El segundo, considera variaciones típicas de velocidades de deposición para cada contaminante a lo largo de 24 horas, especificadas por el usuario. Esta opción permite aplicar una dependencia temporal "típica" de deposición a lo largo del día, pero no incluye las dependencias espaciales.

Mientras que para la deposición húmeda utiliza el método de Maul (1980) que estima coeficientes de remoción para las especies solubles.

Transformación química

CALPUFF tiene la posibilidad de modelar reacciones químicas lineales por tres variantes: el esquema del modelo MESOPUFF II (Scire et al., 1984), el de RIVAD/ARM3 (Morris et al., 1988) y a través de constantes cinéticas introducidas por el usuario.

Cizalladura vertical del viento

CALPUFF puede modelizar explícitamente efectos de la cizalla del viento sobre diferentes puffs al permitir que cada uno sea arrastrado de forma independiente por su velocidad local y dirección del viento promedios, y se mezcle verticalmente hasta el suelo. El viento promedio para cada puff se obtiene a partir de perfiles de velocidad y dirección del viento desde la parte superior a la parte inferior del puff. Por ejemplo, emisiones provenientes de dos focos coincidentes en la horizontal, pero con diferentes alturas de liberación serán transportados por CALPUFF en direcciones y velocidades diferentes si los campos de viento indican que existe tal cizalla.

Interacciones costeras y las singularidades del transporte sobre masas de agua

En CALPUFF, el modelo calcula las características de la turbulencia y la dispersión consistentes con las propiedades de los usos de suelo de cada celda de la malla, clasificada como acuática o terrestre de acuerdo con los campos meteorológicos proporcionados por CALMET. La transición de la dispersión marina a la continental se produce en la frontera costera delimitada por los usos de suelo. Una vez que un penacho situado en la capa límite marina entra en la capa de mezcla terrestre, el crecimiento de cada puff cambia adaptándose a las características de cada capa. Posteriormente, se procede con el transporte normal del puff y el cálculo de la inmisión.

2.3. Acoplamiento y configuración del modelo CALPUFF

Existe multitud de posibilidades de acoplamiento y configuración del modelo CALPUFF, lo que ha dado lugar a varias aplicaciones del mismo en el ámbito de la contaminación atmosférica.

En lo que respecta a su aplicación en la modelización de la calidad del aire como parte del sistema CALMET/CALPUFF, pueden encontrarse multitud de ejemplos de su aplicación que usan mediciones meteorológicas como datos de entrada (Villasenor et al., 2003; Protonotariou et al., 2004; Dresser y Huizer, 2011; Fishwick y Scorgie, 2011). Sin embargo, con la mejora de los modelos de pronóstico meteorológico también numerosos autores han aplicado CALPUFF alimentado con dichos modelos: acoplamientos MM5/CALMET/CALPUFF (NDDH, 2003; Lopez et al., 2005; Taseko, 2008; Yim et al., 2010; Cui et al., 2011; Curci et al., 2012; Ghannam y El-Fadel, 2013; Fonseca, 2013) y en trabajos más recientes con WRF/CALMET/CALPUFF (Abdul-Wahab y Sappurd, 2011; Prueksakorn et al., 2014; Mardones y Jiménez, 2015). En algunos se experimentan diferentes variantes de acoplamiento o aplicación, como PSU/NCAR-MM5/FDDA/CALMET/CALPUFF (Song et al., 2008), BOLAM21/CALMET/CALPUFF (Lonati et al., 2010), Eta/CALMET/CALPUFF (Poplawski et al., 2011) y RAMS-CALMET-CALPUFF (Valdenebro et al., 2013).

En particular, el tamaño de la región a estudiar determina el modelo a elegir. CALPUFF ha sido recomendado para estudios locales de corto y medio alcance. Ranzato et al. (2012) eligieron un dominio de 5x5 km², pero otros autores trabajan en dominios de diferente extensión: SENES (2009), 10x10 km²; Cui et al. (2011), 20x20 km²; MacIntosh et al. (2010), 26x26 km²; Abdul-Wahab y Sappurd (2011), 32x32 km²; Dresser y Huizer (2011), 37,8x40 km²; Curci et al. (2012), 40x40 km²; Ghannam y El-Fadel (2013), 50x50 km²; Taseko (2008) y Fonseca (2013), 60x60 km² mientras que, Fishwick y Scorgie (2011) y Rincon de hoyos (2012), 70x70 km².

Sin embargo, otros autores han aplicado el modelo en sus límites espaciales, como: Lopez et al. (2005), 120x120 km²; Villasenor et al. (2003), 140x160 km²; Poplawski et al. (2011), 200x200 km² y NDDH (2003) 640x460 km². Deben considerarse de igual modo las experiencias en estudios regionales de Collazo (2011), 2780x2157 km² y Zhou et al. (2003), 3360x3360 km². Esto demuestra la capacidad de CALPUFF para abordar problemas más allá de la escala espacial para la cual fue diseñado, debido a su configuración flexible.

La resolución espacial de la malla aplicada en el modelo es un aspecto clave en la configuración del mismo, que depende de la resolución de las medidas o del modelo de pronóstico elegido, la topografía, las dimensiones del dominio de simulación y, por supuesto, las capacidades de cálculo disponibles. Existe por tanto una gran variedad de resoluciones aplicadas: en los ensayos de alta resolución de Poplawski et al. (2011), SENES (2009) y Ranzato et al. (2012) se escogieron celdas de 0,1 km; y en los de Dresser y Huizer (2011), Fishwick y Scorgie (2011), MacIntosh et al. (2010) y Cui et al. (2011), 0,2 km; Curci et al. (2012) y Valdenebro et al. (2013), 0,25 km; Ghannam y El-Fadel (2013), 0,5 km y, Song et al. (2008), Abdul-Wahab y Sappurd (2011) y Fonseca (2013), 1 km. Ya de resolución media, Lopez et al. (2005) y Protonotariou et al. (2004), 2 km; NDDH (2003), 3, 5 y 10 km y, Villasenor et al. (2003) y Nuñez (2004), 5 km. Los valores más altos que se han publicado corresponden a Levy et al. (2002), 15 km y Zhou et al. (2003), 28 km.

Los periodos de simulación varían dependiendo del objetivo del estudio y también de la disponibilidad de medidas o pronósticos meteorológicos empleados como datos de entrada. Se distinguen los de corta duración, Song et al. (2008), Fishwick y Scorgie (2011) y Fonseca (2013), 24 h; Villasenor et al. (2003), 48 h; de media duración, Ghannam y El-Fadel (2013), de 7 a 46 d; Zhou et al. (2003) y Valdenebro et al. (2013), 10 d; Abdul-Wahab y Sappurd (2011), 21 d; Protonotariou et al. (2004), 25 d; Levy et al. (2002), 25 d; Poplawski et al. (2011) y Ranzato et al. (2012), 6 meses; Dresser y Huizer (2011), 10 meses; y los de larga duración, que buscan una representatividad anual, como SENES (2009), Fishwick y Scorgie (2011), López et al. (2005) y Curci et al. (2012), 1 año y NDDH (2003), 1 y 4 años.

La mayoría de las experiencias mantienen el número de 10 niveles en altura recomendado, (Zhou et al., 2003; SENES, 2009; Cui et al., 2011; Abdul-Wahab y Sappurd, 2011; Fonseca, 2013). Sin embargo, y dependiendo del objetivo del estudio, algunos lo disminuyen hasta 8 (NDDH, 2003 y Curci et al., 2012) y 9 niveles (Villasenor et al., 2003) al no requerir un elevado detalle en la estructura vertical, lo que permite alargar las simulaciones; otros lo aumentan hasta 12 niveles (NDDH, 2003; Poplawski et al., 2011) con el objetivo de asegurar una mejor descripción de la capa límite, especialmente en lo que afecta a la estabilidad atmosférica.

Debido a que CALPUFF tiene en cuenta los efectos del terreno ha sido ampliamente utilizado en zonas de terreno complejo (Ghannam y El-Fadel, 2013; Dresser y Huizer, 2011; Valdenebro et al., 2013). Otros autores aprovechan la capacidad del modelo para estudiar los flujos atmosféricos en zonas costeras (Ghannam y El-Fadel, 2013). Así, Lonati et al. (2010) emplea CALPUFF para el estudio de la navegación de buques carboneros; mientras que Poplawski et al. (2011) estudia la navegación de cruceros, ambos en zonas portuarias.

Por supuesto, por su gran extensión espacial, los estudios regionales (Zhou et al., 2003; Collazo, 2011) incluyen zonas de terreno complejo, industriales, costeras y urbanas, lo que añade complejidad a la configuración del modelo para alcanzar la mejor representación de la calidad del aire sobre zonas tan diversas.

Aplicaciones del modelo CALPUFF

El modelo de dispersión lagrangiano de puffs, CALPUFF, ha sido recomendado por el Grupo Interinstitucional sobre Modelos de Calidad del Aire (IWAQM) para la caracterización del transporte y dispersión de contaminantes (EPA, 1998). En ese mismo año, un panel de tres revisores concluyó que el sistema de modelación CALMET/CALPUFF es científicamente sólido y representa un importante avance en la modelación regulatoria de la calidad del aire (Allwine et al., 1998).

Diversas son las configuraciones implementadas en CALPUFF en varios estudios, en los cuales se evidencian su versatilidad Fig. 1. Villaseñor et al. (2003) estudiaron la dispersión del polvo procedente de Ciudad México; Cohen et al. (2005), describieron las emisiones provenientes de vehículos automotores en Portland, Oregón; Taseko (2008) lo emplearon en una zona minera en Canadá; Song et al. (2008) evaluaron un complejo industrial que incluye producción química, textil, cuero, alimentos, papel y pulpa; Lonati et al. (2010) analizaron las emisiones de buques en un puerto italiano de la costa del mar Jónico; MacIntosh et al. (2010) lo utilizaron en la industria metalúrgica; Poplawski et al. (2011) investigaron cruceros en West Virginia; Fishwick y Scorgie (2011) caracterizaron una región minera en Queensland; Ranzato et al. (2012) examinaron los olores en los alrededores de una planta de tratamiento mientras que Curci et al. (2012) estimaron las emanaciones de una planta térmica de biomasa, estas dos últimas en Italia.

Posteriormente Tartakovsky et al. (2013) estudiaron canteras y minas a cielo abierto. Mientras que Rood, (2014) validó CALPUFF utilizando para ello un conjunto de datos obtenidos con trazadores en una zona industrial en Denver, Colorado, Estados Unidos. Mayor et al., (2014) estudiaron la dispersión de yoduro de plata emitido por una red de generadores instalada en la región oriental de Cuba para provocar el incremento artificial de lluvia. Sówka et al. (2014) estimaron el impacto del olor de una planta de tratamiento de aguas residuales en Polonia. Pivato et al. (2015) estudiaron aerosoles de pesticidas en viñedos italianos mientras Ogneva-Himmelberger et al. (2015) evaluaron concentraciones de amoníaco en granjas porcinas para evaluar la exposición del público al contaminante.

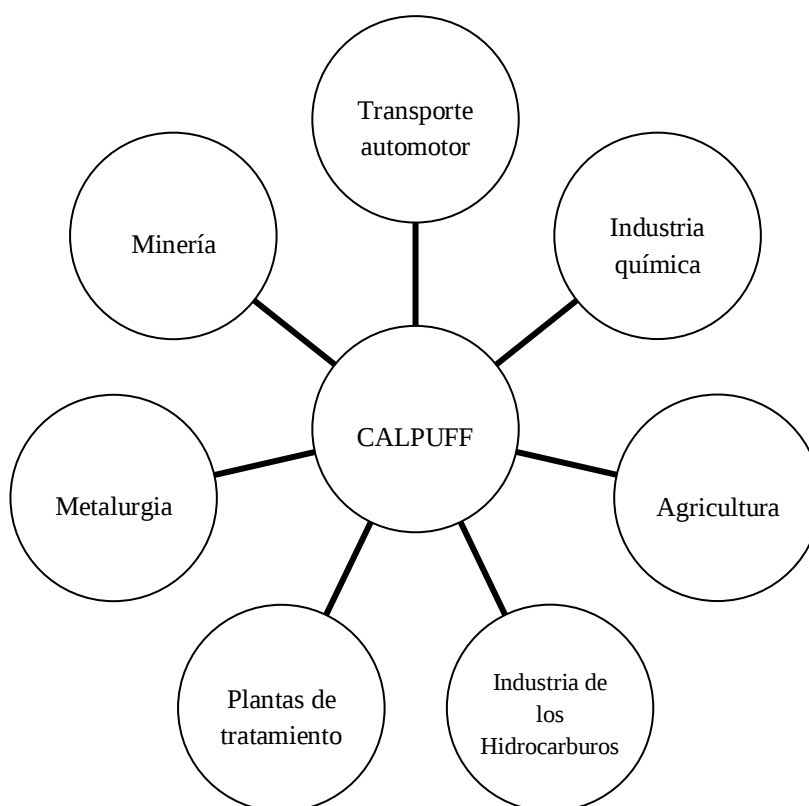


Fig. 1. Aplicaciones del modelo CALPUFF

No obstante, la mayoría de las experiencias van dirigidas a la industria de los hidrocarburos, donde se destacan las plantas térmicas y las refinerías, las cuales han recibido especial atención debido a la existencia en estas de numerosos focos con altos índices de emisión (Ames et al., 2002; Levy et al., 2002; Levy et al., 2003; Zhou et al., 2003; Lopez et al., 2005; Yau et al., 2010; Abdul-Wahab y Sappurd, 2011; Dresser y Huizer, 2011; Valdenebro et al., 2013, Deb et al., 2014; Fenn et al., 2015).

Muchas son las especies posibles a modelar con CALPUFF. La literatura recoge experiencias sobre SO₂ (NDDH, 2003; Yim et al., 2010; Dresser y Huizer, 2011; Abdul-Wahab y Sappurd, 2011; Souto et al., 2014); material particulado (PM), (Villasenor et al., 2003; Lucas, 2010; Fishwick y Scorgie, 2011; Tartakovsky et al., 2013; Rodríguez et al., 2014; Mardones y Jiménez, 2015; Petrov y Lau, 2015); SF₆ como trazador (Chang et al., 2003; Yau et al., 2010; Cui et al., 2011; Dong et al., 2013; Rood, 2014); NO_x (O'Neill et al., 2001; Gulia et al., 2015); ¹³⁷Cs (Skrynyk, 2014); NaI (Mayor et al., 2014); compuestos olorosos (Ranzato et al., 2012; Prueksakorn et al., 2014; Sówka et al., 2014); plomo (Lu et al., 2015) y amoníaco (Ogneva-Himmelberger et al., 2015).

Otros, en dependencia del tipo de foco emisor, estudian diferentes mezclas y combinaciones. Ejemplos son los reportes de SENES (2009), que modela PM, dibenzodioxinas y dibenzofuranos policlorados (PCDD/PCDF), HCN y difenilos policlorados (PCB); Taseko (2008), SO₂, SO₄, NO, NO_x, NO₂, HNO₃, NO₃, CO y compuestos orgánicos volátiles (COV); Fonseca (2013), SO₂, SO₄, NO_x, HNO₃, NO₃, CO, PM₁₀ y PM_{2.5}; Lonati et al. (2010) NO_x, SO_x, PM, CO y COV; Levy et al. (2002), Levy et al. (2003), Protonotariou et al. (2004), Lopez et al. (2005) y Poplawski et al. (2011), SO₂, NO_x y PM; Curci et al. (2012), SO₂, NO_x, PM₁₀, SO₄ y NO₃; Ghannam y El-Fadel (2013), CO, NO_x y PM; Valdenebro et al. (2013), benceno; Cohen et al. (2005), benceno, 1,3-butadieno y PM de diesel; Rincón de Hoyos (2012), CO, NO_x, PM, SO₂ y COV; Collazo (2011), SO₂ y NO_x; Song et al. (2008), compuestos sulfurados (H₂S, sulfuro de dimetilo, CS₂, disulfuro de dimetilo, y CH₃SH) y MacIntosh et al. (2010), cadmio, plomo, y zinc; Anderson (2010), perfluoromonometilciclohexano; Bertari et al. (2012), bioaerosoles tratados como material particulado; Deb et al. (2014), PM₁₀, SO₂ y NO_x; Fenn et al. (2015), NO₃⁻ y SO₄²⁻; Yates et al. (2015), 1,3-dicloropropano y tricloronitrometano mientras que Viana et al. (2015), PM₁₀ y SO₂.

La elección del tipo de fuente depende del objeto de estudio y determina los mecanismos de dispersión. CALPUFF permite combinar, en número y tipo, diversas fuentes. O'Neill et al. (2001), Villasenor et al. (2003), Taseko (2008), Lonati et al. (2010), Bertari et al. (2012), Rincón de Hoyos (2012), Ranzato et al. (2012), Tartakovsky et al. (2013), Fenn et al. (2015), Ogneva-Himmelberger et al. (2015) optaron por fuentes de área. Mientras que otros eligieron fuentes puntuales

(entre paréntesis la altura de la mayor de las fuentes) Mayor et al. (2014), (1,6 m); Rood (2014), (10 m); Petrov y Lau (2015), (20 m); Song et al. (2008), (30 m); Curci et al. (2012), (40 m); Dong et al. (2013), (50 m); Abdul-Wahab y Sappurd (2011), (60 m); Cui et al. (2011), (70 m); Levy et al. (2002), (168 m); Dresser y Huizer (2011), (183 m); Yau et al. (2010), (187 m); NDDH (2003) y Zhou et al. (2003), (210 m); Collazo (2011), (267 m) y Souto et al. (2014), (356,5 m).

Por otra parte, Degrazia et al. 2015 utilizaron una fuente lineal; Chang et al. (2003) mezclaron fuentes lineales y puntuales; Protonotariou et al. (2004), Lucas (2010), Fishwick y Scorgie (2011) y Sówka et al. (2014), puntuales y de área; Cohen et al. (2005), lineales y de área; mientras Ghannam y El-Fadel (2013) y Holnicki y Nahorski (2015), emplearon puntuales, de área y lineales.

En las aplicaciones regionales es obvio que se incluyan áreas urbanas, zonas y parques industriales, con distintos tipos de industrias y diversas fuentes, incluidas las emisiones urbanas; (NDDH, 2003; SENES, 2009; Whitford, 2009; Protonotariou et al., 2004; Yim et al., 2010; Collazo, 2011; Rincón de Hoyos, 2012; Ghannam y El-Fadel, 2013).

Validación del modelo CALPUFF

Se han publicado diversos ensayos de validación del modelo CALPUFF (O'Neill et al, 2001; Levy et al, 2003; Protonotariou et al, 2004; Cohen et al, 2005; Yau et al, 2010; Dresser et al, 2011; Fishwick y Scorgie, 2011; Ghannam y El-Fadel, 2013). La mayoría de ellos se basan en experimentos con trazadores específicos pasivos y una gran cantidad de medidas de superficie y en altura durante los experimentos, con el fin de lograr la mejor evaluación del rendimiento del modelo. Sin embargo, con las fuentes reales y las medidas limitadas, surgen incertidumbres (tanto en mediciones y modelos de resultados) y se espera un desempeño peor de los modelos.

Como una aplicación inversa, Cohen et al. (2005) validan con CALPUFF usando R^2 en un modelo de regresión construido con emisiones estimadas. Por su parte, Dresser et al. (2011) intercomparan CALPUFF y AERMOD y validan sus resultados. Para validar utilizan cuatro métodos: En el primero calculan la relación entre las medidas y los valores propuesto por el modelo. En el segundo calculan la Máxima Inmisión Robusta (RHC, en inglés) y la grafican. El tercer método utiliza los parámetros estadísticos Bias Fraccional (FB) y Medida de Precisión Compuesta (CPM). Para la última etapa utilizan el paquete estadístico de evaluación de modelos, BOOT (Chang y Hanna, 2005).

Fishwick y Scorgie (2011) validan el modelo de dispersión utilizando los estadísticos índice de ajuste (IOA), RHC, la raíz del error cuadrático medio (RMSE) y la relación de la concentración máxima (Max_R). Mientras, Ghannam y El-Fadel (2013) validan los resultados del modelo de dispersión utilizando el FB, el bias de la media geométrica (MG), el error cuadrático medio normalizado (NMSE), la fracción de las predicciones dentro de un factor de 2 respecto de las observaciones (FAC2) y regresión lineal.

En Illinois, Levy et al. (2003) evalúan la sensibilidad para varias configuraciones de un modelo CALPUFF, de 9 plantas térmicas, para evaluar el impacto de material particulado, primario y secundario. Por otro lado, Protonotariou et al. (2004), validan e intercomparan CALPUFF con UAM y REMSAD, en el área metropolitana de Atenas, Grecia. Para ellos comparan los gráficos de inmisión y los valores en las estaciones.

A su vez, Yau et al. (2010) comparan y validan los resultados de AUSTAL2000 y CALPUFF comparando los valores de inmisión predichos con medidas, a través de parámetros estadísticos (NMSE, coeficiente correlación lineal (COR), FAC2, FB y derivación estándar fraccional (FS)) y gráficos de cuartiles y de dispersión. Por su parte, Chang (2003) intercompara CALPUFF y otros dos modelos (HPAC, and VLSTRACK) contrastando los resultados con medidas y empleando los parámetros FB, MG, NMSE, la varianza geométrica (VG) y FAC2.

Recientemente Hernández-Garcés y colaboradores (2015b) validaron la dispersión local de SO_2 de una gran chimenea de una central térmica (con cuatro conductos independientes), considerando dos diferentes configuraciones de chimenea (un solo foco puntual suma de los cuatro conductos vs. un foco puntual por conducto) así como dos resultados distintos del modelo CALMET (usando como datos de entrada: solo los resultados del modelo WRF vs. solo medidas meteorológicas en superficie y en altura) mediante los estadígrafos FB, MG, NMSE, VG, FAC2, el Bias Fraccional por infraestimación (FBFN), el Bias Fraccional por sobreestimación (FBFP), el Error medio absoluto (MAE), el Bias Geométrico por infraestimación (MGFN), el Bias Geométrico por sobreestimación (MGFP), El Grado efectivo de infraestimación (MOEFN) y el efectivo de sobreestimación MOEFP.

Conclusiones

El modelo lagrangiano de dispersión atmosférica CALPUFF es uno de los más utilizados para varias aplicaciones de interés medioambiental. Los estudios demuestran que se emplea acoplado a varios modelos meteorológicos como CALMET, MM5, WRF, entre otros, así como alimentado por mediciones meteorológicas de estaciones.

CALPUFF ha sido empleado en un amplio rango de tamaño de región, desde aplicaciones locales de 5x5 km² hasta regionales de 3360x3360 km². Esto indica que la configuración flexible del modelo le permite abordar problemas más allá de la escala espacial para la cual fue diseñado.

Existe una gran variedad de alternativas para configurar CALPUFF. En cuanto a la resolución se reportan ensayos desde los de alta resolución de 0,1 km hasta alcanzar los 28 km en estudios regionales. En cuanto a los periodos de simulación evaluados, estos varían desde 24 h hasta 4 años. Los niveles en altura por su parte se extienden desde 8 hasta 12 niveles.

Debido a que CALPUFF tiene en cuenta los efectos del terreno y los flujos atmosféricos en zonas costeras, ha sido ampliamente utilizado en dominios de terreno complejo y costeros.

CALPUFF se destaca por su versatilidad. Ha sido empleado para estudiar emisiones provenientes de vehículos automotores y buques, de zonas mineras, de complejos industriales químicos, de la industria metalúrgica, de plantas de tratamiento de aguas residuales, de pesticidas en la agricultura, de amoníaco en granjas agrícolas y en la industria de los hidrocarburos.

Muchas son las especies modeladas con CALPUFF, entre ellas se destacan el SO₂, material particulado, SF₆, NO_x, ¹³⁷Cs, NaI, compuestos olorosos, plomo, y amoníaco. Mientras que respecto al tipo de fuente, las experiencias analizadas reportan el empleo de fuentes puntuales, lineales y de área en las modelaciones.

Referencias bibliográficas

- Abdul-Wahab, S., Sappurd, A., Al-Damkhi, A. 2011. Application of California Puff (CALPUFF) model: a case study for Oman. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 13(1), 177-189.
- Allwine, K. J., Dabberdt, W. F., Simmons, L. L. 1998. *Peer review of the CALMET/CALPUFF modeling system*. Contract, (68-D), 98-092.
- Ames, M.R., Zemba, S.G., Yamartino, R.J., Valberg, P.A., Green, L.C. 2002. Comments on: Using CALPUFF to evaluate the impacts of power plant emissions in Illinois: model sensitivity and implications. *Atmospheric Environment* 36, 2263–2265.
- Anderson, B. A., Brode, R. W., Wong, H. 2010. Evaluation of Four Lagrangian Models Against the Cross-Appalachian and European Tracer Experiments, in Steyn D.G. et al (Eds.), *Air Pollution Modeling and its Application XX*, Springer Science + Business Media B.V., 87-93.
- Bertari, R., Achilli, M., Bedogni, M. 2012. Dispersion of bioaerosols from a wastewater plant: An experimental–modellistic approach. *Air Pollution Modeling and its Application XXI*. Springer Netherlands. 133-136.
- Chang, J. C., Franzese, P., Chayantrakom, K., Hanna, S. R. 2003. Evaluations of CALPUFF, HPAC, and VLSTRACK with two mesoscale field datasets. *Journal of Applied Meteorology*, 42(4), 453-466.
- Cohen, J., Cook, R., Bailey, C. R., Carr, E. 2005. Relationship between motor vehicle emissions of hazardous pollutants, roadway proximity, and ambient concentrations in Portland, Oregon. *Environmental Modelling & Software*, 20(1), 7-12.
- Collazo Aranda, A. E. 2011. Análisis de la contaminación transfronteriza y local de contaminantes gaseosos precursores de la depositación ácida húmeda y formación de ozono en Cuba. *Tesis de Magíster en gestión y planificación ambiental*. Universidad de Chile.
- Cui, H., Yao, R., Xu, X., Xin, C. 2011. A tracer experiment study to evaluate the CALPUFF real time application in a near-field complex terrain setting. *Atmospheric Environment*, 45(39), 7525-7532.
- Curci, G., Cinque, G., Tuccella, P., Visconti, G., Verdecchia, M., Iarlori, M., Rizi, V. 2012. Modelling air quality impact of a biomass energy power plant in a mountain valley in Central Italy. *Atmospheric Environment*, 62, 248-255.
- De Castro, M. 2001. Calibración de modelos de dispersión atmosférica: Aplicación a un modelo de estructuras adaptables. *Tesis doctoral*. Universidad de Santiago de Compostela.
- Deb, K., Doherty, B. A., Kanchan, A., Holland, B., Boger, W., Dai, W., Zhang, K., Yang, X. 2014. Evolution of Air Quality Modelling of Ras Laffan, Qatar Airshed and Way Forward with WRF-CALPUFF Simulation in Near Real-Time. In *SPE Middle East Health, Safety, Environment & Sustainable Development Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers, 1-18.
- Degrazia, F. C., de Vilhena, M. T., Degrazia, G. A., Bodmann, B. 2015. The Influence of Decorrelation Time Scales in the CALPUFF Modeling System under Neutral Conditions. *American Journal of Environmental Engineering*, 5(1A), 125-132.
- Dong, L. X., Zuo, H. C., Dong, W. C. 2013. Validation of CALPUFF applicability within urban area. *Advanced Materials Research*, 726, 1813-1816.

- Dresser, A. L. & Huizer, R. D. 2011. CALPUFF and AERMOD model validation study in the near field: Martins Creek revisited. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 61(6), 647-659.
- EPA, 1998. Interagency Workgroup on Air Quality Modeling (IWAQM) Phase 2 *Summary Report and Recommendations for Modeling Long Range Transport Impacts*.
- Fenn, M. E., Bytnerowicz, A., Schilling, S. L., Ross, C. S. 2015. Atmospheric deposition of nitrogen, sulfur and base cations in jack pine stands in the Athabasca Oil Sands Region, Alberta, Canada. *Environmental Pollution*, 196, 497-510.
- Fishwick, S. & Scorgie, Y. 2011. Performance of CALPUFF in predicting time-resolved particulate matter concentrations from a large scale surface mining operation. *Proceedings of CASANZ Conference*, 1-5.
- Fonseca, M. 2013. Estudio del impacto en la calidad del aire de las fuentes puntuales en la ciudad de Pinar del Río. *Revista Brasileira de Meteorologia*, 28(1), 1-12.
- Ghannam, K. & El-Fadel, M. 2013. Emissions characterization and regulatory compliance at an industrial complex: an integrated MM5/CALPUFF approach. *Atmospheric Environment* 69, 156-169.
- Gulia, S., Kumar, A., Khare, M. 2015. Performance evaluation of CALPUFF and AERMOD dispersion models for air quality assessment of an industrial complex. *Journal of Scientific & Industrial Research*, 74, 302-307.
- Chang, J. C., & Hanna, S. R. 2005. Technical descriptions and user's guide for the BOOT statistical model evaluation software package.
- Hernández-Garcés, A., Jáuregui-Haza, U., Souto-González, J. A., Casares-Long, J. J., Saavedra-Rodríguez, S., Guzmán-Martínez, F., Torres Valle, A. 2015a. Estado actual de los modelos de dispersión atmosférica y sus aplicaciones. *UCE Ciencia. Revista de postgrado*, 3(2), 1-17.
- Hernández-Garcés, A., Souto, J. A., Rodríguez, A., Saavedra, S., Casares, J. J. 2015b. Validación de simulaciones de los modelos CALMET/CALPUFF en el entorno de una gran chimenea de central térmica. *Revista Física de la Tierra*, 27(15), 35-55.
- Holnicki, P., & Nahorski, Z. 2015. Emission data uncertainty in urban air quality modeling—Case Study. *Environmental Modeling & Assessment*, Springer International Publishing, 1-15.
- Huber, A. H., & Snyder, W. H. 1976. Building wake effects on short stack effluents. *Bulletin of the American Meteorological Society* 57(5), 640-640.
- Levy, J. I., Spengler, J. D., Hlinka, D., Sullivan, D., Moon, D. 2002. Using CALPUFF to evaluate the impacts of power plant emissions in Illinois: model sensitivity and implications. *Atmospheric Environment*, 36(6), 1063-1075.
- Levy, J. I., Wilson, A. M., Evans, J. S., Spengler, J. D. 2003. Estimation of primary and secondary particulate matter intake fractions for power plants in Georgia. *Environmental Science & Technology*, 37(24), 5528-5536.
- Lonati, G., Cernuschi, S., Sidi, S. 2010. Air quality impact assessment of at-berth ship emissions: Case-study for the project of a new freight port. *Science of the Total Environment*, 409(1), 192-200.
- Lopez, M. T., Zuk, M., Garibay, V., Tzintzun, G., Iniestra, R., Fernandez, A. 2005. Health impacts from power plant emissions in Mexico. *Atmospheric Environment*, 39(7), 1199-1209.
- Lu L, Cheng H, Liu X, Xie J, Li Q, Zhou T. 2015. Assessment of Regional Human Health Risks from Lead Contamination in Yunnan Province, Southwestern China. *PLoS ONE* 10(4), 1-15.
- Lucas, V. 2010. Assessment of CALPUFF for Modeling Winter-Time PM10 in Christchurch, New Zealand, in Steyn D.G. et al (Eds.), *Air Pollution Modeling and its Application XX*, Springer Science + Business Media B.V., 405-409.
- MacIntosh, D. L., Stewart, J. H., Myatt, T. A., Sabato, J. E., Flowers, G. C., Brown, K. W., Hlinka, D. J., Sullivan, D. A. 2010. Use of CALPUFF for exposure assessment in a near-field, complex terrain setting. *Atmospheric Environment*, 44(2), 262-270.
- Manins, P. C. (1979). Partial penetration of an elevated inversion layer by chimney plumes. *Atmospheric Environment*, 13(5), 733-741.
- Mardones, C., & Jiménez, J. 2015. Alternatives for Reducing Fine Particulate Matter from Industrial Activities in Concepción Metropolitan Area, Chile. *Energy & Environment*, 26(3), 445-456.
- Maul, P. R. Atmospheric transport of sulfur compound pollutants. 1980, *Nottingham, England: Central Electricity Generating Bureau*. Report MID/SSD/80/0026/R.
- Mayor, Y. G., Montejo, I. B., Castro, D. M. 2014. Simulación numérica de la dispersión del yoduro de plata en la región oriental de Cuba. *Revista Cubana de Meteorología*, 20(2), 87-97.
- Morris, R.E., Kessler, R.C. Douglas, S.G. Styles K.R. Moore, G.E. 1988. Rocky mountain acid deposition model assessment: acid rain mountain mesoscale model (ARM3). *U.S. Environmental Protection Agency, Atmospheric Sciences Research Laboratory*, Research Triangle Park, NC.
- North Dakota Department of Health. Division of Air Quality [NDDH], 2003. CALPUFF analysis of current PSD Class I increment consumption in North Dakota and Eastern Montana using actual annual average SO₂ emission rates. *Technical report*. Bismarck, North Dakota 58506.

- Ogneva-Himmelberger, Y., Huang, L., Xin, H. 2015. CALPUFF and CAFOs: Air Pollution Modeling and Environmental Justice Analysis in the North Carolina Hog Industry. *ISPRS International Journal of Geo-Information*, 4(1), 150-171.
- O'Neill, S. M., Lamb, B. K., Chen, J., Napelenok, S., Allwine, E. J., Stock, D., McManus, J. B., Shorter, J. H., Kolb, C. E. 2001. Correlating an upwind source-footprint with urban emissions data using the MM5/MCIP/CALPUFF modeling system. *International Emission Inventory Conference "One Atmosphere, One Inventory, Many Challenges"*, 1-10.
- Petrov, O., & Lau, A. 2015. Impact Assessment of Biomass-based District Heating Systems in Densely Populated Communities. Part I: Dynamic Intake Fraction Methodology. *Atmospheric Environment*, 115, 70–78.
- Pivato, A., Barausse, A., Zecchinato, F., Palmeri, L., Raga, R., Lavagnolo, M. C., Cossu, R. 2015. An integrated model-based approach to the risk assessment of pesticide drift from vineyards. *Atmospheric Environment*, 111, 136-150.
- Poplawski, K., Setton, E., McEwen, B., Hrebenyk, D., Graham, M., Keller, P. 2011. Impact of cruise ship emissions in Victoria, BC, Canada. *Atmospheric Environment*, 45(4), 824-833.
- Protonotariou, A., Bossioli, E., Athanasopoulou, E., Dandou, A., Tombrou, M., Assimakopopoulos, V., Flocas, H. A., Chelmis, C. 2004. Validation and inter-comparison of CALPUFF regulatory model to Eulerian models and measurements. An application over the greater Athens area, Greece. *Proceedings of the 9th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, 131-135.
- Prueksakorn, K., Kim, T. H., Vongmahadlek, C. 2014. Applications of WRF/CALPUFF modeling system and multi-monitoring methods to investigate the effect of seasonal variations on odor dispersion: a case study of Changwon City, South Korea. *Air Quality, Atmosphere & Health*, 7(1), 13-27.
- Ranzato, L., Barausse, A., Mantovani, A., Pittarello, A., Benzo, M., Palmeri, L. 2012. A comparison of methods for the assessment of odor impacts on air quality: Field inspection (VDI 3940) and the air dispersion model CALPUFF. *Atmospheric Environment*, 61, 570-579.
- Rincón de Hoyos, M. E. 2012. Acoplamiento del modelo de mesoescala WRF al modelo de calidad del aire Calpuff. *Tesis de Magister en Meteorología*, Universidad Nacional de Colombia.
- Rodríguez, J. L., Angulo, L. C., Restrepo, G. M., Rojano, R. E. 2014 Evaluation of the models CALMET and CALPUFF in two sites topographically different in the coal minning zone of department of Cesar, Colombia. *Poster in the International Conference on Atmospheric Dust*, Castellanea Marina, Italy.
- Rood, A. S. 2014. Performance evaluation of AERMOD, CALPUFF, and legacy air dispersion models using the winter validation tracer study dataset. *Atmospheric Environment*, 89, 707-720.
- Scire, J. S., & Schulman, L. L. 1980. Modeling plume rise from low-level buoyant line and point sources. *Proceedings Second Point Conference on Applications of Air Pollution Meteorology*, 24-28.
- Scire, J. S. Development of the MESOPUFF II dispersion model. 1984. *Research Triangle Park, NC: US Environmental Protection Agency. Report EPA-600/3-84-057.*
- Scire, J. S., Strimaitis, D. G., Yamartino, R. J. 2000a. *A user's guide for the CALPUFF dispersion model*. Earth Tech, Concord, MA.
- Scire, J.S., Robe, F.R., Fernau, M.E., Yamartino, R.J. 2000b. *A User's Guide for the CALMET Meteorological Model (Version 5)*, Earth Tech, Concord, MA.
- Seinfeld, J. H. & Pandis, S. N. 2012. *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*. John Wiley & Sons.
- SENE Consultants Limited, 2009. *Air Dispersion Modelling for Solid Waste Facilities in the Yukon*.
- Skrynyk, O. 2014. Modelling of ¹³⁷Cs accidental release after Chernobyl over Ukrainian territory by means of CALPUFF. *Proceedings of the 16th International Conference on Harmonization within Atmospheric Dispersion Modeling for Regulatory Purposes*, Varna, Bulgaria, 682.
- Song, S. K., Shon, Z. H., Kim, K. H., Kim, Y. K., Pal, R. 2008. Dispersion and photochemical oxidation of reduced sulfur compounds in and around a large industrial complex in Korea. *Atmospheric environment*, 42(18), 4269-4279.
- Souto, J. A., Moral, C., Rodríguez, A., Saavedra, S., Casares, J. J., & Hernández-Garcés, A. 2014. Simulation of plume dispersion using different stack configurations and meteorological inputs. *International Journal of Environment and Pollution*, 55(1), 139-147.
- Sówka, I., Skrętowicz, M., Sobczyński, P., Zwoździak, J. 2014. Estimating odour impact range of a selected wastewater treatment plant for winter and summer seasons in Polish conditions using CALPUFF model. *International Journal of Environment and Pollution*, 54(2), 242-250.
- Taseko Mines Limited. 2008. Taseko Prosperity Gold-Copper Project. *Appendix 4-2-D: CALPUFF and CALMET Methods and Assumptions*.
- Tartakovsky, D., Broday, D. M., Stern, E. 2013. Evaluation of AERMOD and CALPUFF for predicting ambient concentrations of total suspended particulate matter (TSP) emissions from a quarry in complex terrain. *Environmental Pollution*, 179, 138-145.

- Valdenebro, V., Sáez de Cámara, E., Gangoiti, G., Alonso, L., García, J. A., Ildia, J. L., González, N. 2013. Estimating hourly benzene concentrations in a highly-complex topographical environment in northern Spain using RAMS and the CALPUFF modeling system. *EGU General Assembly Conference Abstracts*, 15, 12318.
- Viana, M., Fann, N., Tobías, A., Querol, X., Rojas-Rueda, D., Plaza, A., Aynos, G., Conde, J. A., Fernández, L., Fernández, C. 2015. Environmental and Health Benefits from Designating the Marmara Sea and the Turkish Straits as an Emission Control Area (ECA). *Environmental science & technology*, 49(6), 3304-3313.
- Villasenor, R., Lopez-Villegas, M. T., Eidels-Dubovoi, S., Quintanar, A., Gallardo, J. C. 2003. A mesoscale modeling study of wind blown dust on the Mexico City Basin. *Atmospheric Environment*, 37(18), 2451-2462.
- Whitford, J. 2009. Durham–York air quality assessment. Appendix D. CALPUFF methodology. *Technical Study Report*, Project No. 1009497.
- Yates, S. R., Ashworth, D. J., Zheng, W., Zhang, Q., Knuteson, J., Van Wesenbeeck, I. 2015. Emissions of 1, 3-dichloropropene and chloropicrin after soil fumigation under field conditions. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 63(22), 5354–5363.
- Yau, K. H., Macdonald, R. W., The, J. L. 2010. Inter-comparison of the AUSTAL2000 and CALPUFF dispersion models against the Kincaid data set. *International Journal of Environment and Pollution*, 40(1), 267-279.
- Yim, S. H., Fung, J. C., Lau, A. K. 2010. Use of high-resolution MM5/CALMET/CALPUFF system: SO₂ apportionment to air quality in Hong Kong. *Atmospheric Environment*, 44(38), 4850-4858.
- Zannetti, P. 1990. *Air pollution modeling: theories, computational methods, and available software*. Southampton: Computational Mechanics.
- Zhou, Y., Levy, J. I., Hammitt, J. K., Evans, J. S. 2003. Estimating population exposure to power plant emissions using CALPUFF: a case study in Beijing, China. *Atmospheric Environment*, 37(6), 815-826.

Acerca de los autores:

Anel Hernández-Garces. Máster en Radioquímica y Profesor del ISPJAE. Trabaja en el grupo de contaminación atmosférica del Centro de Ingeniería de Procesos de la Facultad de Ingeniería Química.

Ulises Jáuregui-Haza. Profesor del InSTEC. Se especializa en ingeniería ambiental y modelación de procesos. Es autor de más de 100 artículos publicados en revistas internacionales.

José A. González. Profesor de la USC. Se especializa en modelación atmosférica, contaminación atmosférica, radiación solar y energía sostenible. Es autor de más de 70 artículos publicados en revistas internacionales.

Juan J. Casares-Long. Profesor de la USC y líder del grupo de modelación ambiental del Departamento de Ingeniería Química. Se especializa en desarrollo sostenible y supercomputación. Es autor de más de 100 artículos publicados en revistas internacionales.

Santiago Saavedra-Vázquez. Miembro del grupo de modelación ambiental del Departamento de Ingeniería Química de la USC. Se especializa en evaluación de la calidad del aire y meteorología.

Fernando Guzmán-Martínez. Investigador del CEAC y Profesor del InSTEC, Departamento de Física Nuclear. Se especializa en física nuclear teórica grupo del cual es uno de los líderes científicos. Ha publicado más de 100 artículos y es coautor de un libro de divulgación científica.

Antonio Torres-Valle. DrC Técnicas y Profesor del InSTEC. Se especializa en análisis de confiabilidad y riesgo. Es autor de varios códigos de computación y de más de 50 artículos y presentaciones en eventos relacionados con la temática.