

Estado actual de los modelos de dispersión atmosférica y sus aplicaciones

Anel Hernández Garces¹; Ulises Jauregui Haza²; José A. Souto González³; Juan J. Casares Long⁴; Santiago Saavedra Rodríguez⁵; Fernando Guzmán Martínez⁶ y Antonio Torres Valle⁷

¹Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría (ISPJAE), Cuba.

¹anel@quimica.cujae.edu.cu

^{2,7}Instituto Superior de Tecnología y Ciencias Aplicadas (INSTEC), Cuba.

²ulises@instec.cu; ⁷atorres@instec.cu

^{3,4,5}Universidad de Santiago de Compostela (USC), España.

³ja.souto@usc.es; ⁴juanjose.casares@usc.es; ⁵santiago.saavedra.vazquez@gmail.com

⁶Centro de Estudios Avanzados de Cuba (CEAC), Cuba.

⁶fernando.gm@cea.cu

Recibido: 29 abr.2015

Aceptado: 20 mayo.2015

RESUMEN

Este trabajo analiza la aplicación de los modelos atmosféricos de dispersión. Se describen diferentes tipos de modelos de dispersión disponibles, desde modelos simples a complejos y se evalúa la idoneidad de las diferentes configuraciones dentro de diferentes entornos, en cuanto a la escala, la complejidad del entorno y los parámetros de concentración. Por último, se revisan varios modelos importantes, comerciales como no comerciales.

PALABRAS CLAVE: Modelo; Dispersión; Atmósfera

ABSTRACT

Current status of atmospheric dispersion models and their applications. This paper analyzes the application of atmospheric dispersion models. Different types of dispersion models available are described, from simple to complex ones and the adequacy of different configurations in different environments, as the scale, the complexity of the environment and concentration parameters are evaluated. Finally, several important models are reviewed, commercial and non-commercial.

KEYWORDS: Model; Dispersion; Atmosphere

INTRODUCCIÓN

En los últimos 100 años ha crecido la preocupación por el cuidado medioambiental; y dentro de sus múltiples tópicos se destaca el de la calidad del aire. Para esta última, la modelación del comportamiento de la contaminación atmosférica constituye una de las herramientas más importantes para analizar y prevenir su deterioro.

En la actualidad, la modelación de la contaminación atmosférica es 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).

La modelación de la calidad del aire juega un papel importante en el establecimiento de legislaciones para el control de las emisiones de contaminantes atmosféricos, determinando los valores máximos permitidos para los caudales y concentraciones de emisión; así como en la evaluación de estrategias de control de emisiones; en la selección de localizaciones de futuros focos emisores, con el fin de minimizar el impacto sobre el entorno; en el establecimiento de planes de intervención inmediata en el control de episodios de elevada contaminación en determinadas regiones: sistemas de alerta y reducción de emisiones en tiempo real; la identificación de responsabilidades en los niveles de contaminación existentes en cada momento, mediante la evaluación de la interrelación directa entre el emisor y el receptor, entre otros.

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 sensores automáticos, con la resolución espacial que pueden proporcionar algunos modelos, resultaría extremadamente costosa de instalar y mantener de forma permanente en correcto funcionamiento. Igualmente viabilizan la identificación de errores en la medición de la contaminación, ya sea por fallos en el sistema de medida o por una localización incorrecta del instrumento; esto último implica que los modelos de calidad del aire son una herramienta muy útil en la definición de redes óptimas de seguimiento de la contaminación atmosférica.

En el caso de focos de emisión industriales, los modelos de calidad de aire posibilitan la definición de la altura de emisión necesaria para garantizar que sus emisiones no afecten a la región circundante.

Estos modelos también brindan capacidad de predicción del comportamiento de contaminantes atmosféricos, para la prevención de alarmas de contaminación, dado que un modelo bien calibrado y suficientemente validado puede representar adecuadamente la realidad, su dinámica y sus respuestas a diferentes perturbaciones en el futuro. En definitiva, una parte importante del estudio de la contaminación atmosférica requiere el desarrollo y aplicación de modelos capaces de describir y predecir el comportamiento de los contaminantes atmosféricos.

Teniendo en cuenta la importancia expresada de los modelos de dispersión atmosférica, el presente trabajo tiene como objetivo, a partir de una búsqueda bibliográfica, realizar un análisis de los modelos de dispersión y sus aplicaciones.

Los modelos de dispersión

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. 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 debidas a la actividad humana, y las concentraciones de estas sustancias, u otras que se originan a partir de ellas, en la atmósfera.

Esta relación, aclara Zannetti (1990), se ha tratado de determinar por dos vías:

- Modelos físicos, son aquellos que a partir de experimentos de laboratorio a pequeña escala, tratan de obtener representaciones globales o parciales del fenómeno. Como ejemplo podemos indicar los trabajos en túneles de viento (White y Kavanagh, 1991) o en tanques de agua (Bara y otros, 1992). Su principal aporte práctica se ha limitado, por el momento, a la obtención de una mejor comprensión de algunos fenómenos que caracterizan el flujo de un penacho en la atmósfera, como son la sobreelevación inicial o la difusión interna; de hecho, sus resultados se aplican a menudo en los modelos matemáticos.
- Modelos matemáticos, están constituidos por un conjunto de ecuaciones algebraicas y/o diferenciales, que describen los aspectos físicos y químicos del problema. En este campo ya se han obtenido un gran número de modelos aplicables a experimentos reales, aunque con limitaciones en sus resultados, que con frecuencia requieren una calibración específica sobre cada problema considerado.

Modelos matemáticos de calidad de aire.

Los modelos matemáticos Zannetti (1990) los clasifica, dependiendo de la naturaleza de su planteamiento básico, en:

- Determinísticos, estos tratan de establecer alguna formulación matemática que describa la influencia de los procesos atmosféricos en el transporte de contaminantes; por ejemplo, una relación entre la causa (emisiones) y su consecuencia directa (niveles de concentración de contaminantes en la atmósfera y en el suelo).
- Estadísticos, son los basados en las relaciones estadísticas entre los datos de emisión, meteorología y concentración de contaminantes medida en diferentes localizaciones del entorno considerado.

Hay otras clasificaciones que tienen en cuenta otros criterios; y es posible que un mismo modelo pueda estar incluido en varias de las categorías.

Si se considera el modo de enfocar el problema:

- Orientados al receptor, son los que tratan de reconstruir la contribución de cada foco emisor a cada foco receptor considerado, generalmente sin tener en cuenta los patrones de dispersión que siguen los contaminantes.

- Orientados al foco emisor, o modelos de difusión atmosférica, estos tratan de definir la distribución de una sustancia extraña que se emite a la atmósfera basándose en la representación matemática de los diferentes fenómenos de transporte y transformación que puede experimentar dicha sustancia.

Teniendo en cuenta el alcance espacial, se pueden clasificar los modelos en:

- Regionales o nacionales, son utilizados para el estudio de transporte y difusión de contaminantes a grandes distancias (de 100 a 1500 km). Habitualmente, utilizan datos meteorológicos históricos.
- Locales, evalúan la convección y difusión de los contaminantes emitidos en distancias relativamente pequeñas (de 1 a 100 km). Por su alcance, estos fenómenos se circunscriben casi exclusivamente a la capa límite atmosférica. Dentro de estos se distinguen:
 - De corto alcance, de 1 a 15 km, suelen resultar más sencillos puesto que permiten un tratamiento cuasi-mecanicista del problema. La difusión no es muy marcada, fundamentalmente porque para que exista inmisión apreciable el foco emisor ha de estar situado casi a nivel del suelo.
 - De medio alcance, tratan de realizar una estimación de la inmisión a distancias entre 15 y 100 km del foco emisor. Por su alcance medio requieren una descripción meteorológica lo más aproximada posible de la zona de aplicación e incluso, para una respuesta con la suficiente anticipación, una predicción meteorológica local a corto plazo.

Según la resolución temporal; es decir, el ámbito temporal de aplicación:

- Climatológicos, utilizan patrones meteorológicos históricos para obtener medias de inmisión estacionales o anuales.
- A mediano plazo, se establecen para períodos de tiempo de unos días a unas semanas. Pueden combinar datos históricos con predicciones meteorológicas con el fin de obtener una descripción aproximada de la atmósfera en ese período. Se obtienen medias diarias.
- Episódicos, se utilizan para el estudio de la dispersión en condiciones anómalas de unas horas a unos días. Requieren una descripción exhaustiva del episodio meteorológico para obtener valores de inmisión, generalmente horarios.
- Simulación en tiempo real, intenta aplicar un modelo de tipo episódico alimentado con predicciones meteorológicas a corto plazo, o con medidas recibidas en tiempo real. Requiere un compromiso entre la complejidad del modelo y su tiempo de respuesta, por lo que su descripción es ligeramente diferente de los anteriores. Generalmente, son modelos locales.

Según el método de simulación:

- Modelos probabilísticos, de correlación o estadísticos, se basan en la utilización de datos históricos de meteorología, emisión e inmisión para establecer, mediante técnicas estadísticas diversas, la inmisión probablemente alcanzable con unas condiciones meteorológicas y de emisión. Solo sus aplicaciones como modelos de largo alcance o como modelos climatológicos están extendidas, porque para alcanzar resultados válidos requieren un tiempo de cálculo prohibitivo para predicciones a corto plazo. Además, se requieren habitualmente grandes ordenadores dedicados a esta tarea.
- Modelos de difusión atmosférica, propiamente dichos, se trata, de una manera aproximada, de resolver las ecuaciones de difusión que gobiernan el movimiento de los contaminantes en el flujo turbulento atmosférico. Y según el método de solución se subdividen en:
 - Modelos de caja, son los más sencillos, tratan la zona en estudio como un sistema cerrado en el que se mueven los contaminantes por impulso del viento medio. Son modelos puramente mecánicos, que suelen incorporar un módulo químico para simular la transformación de los contaminantes.
 - Modelos gaussianos, son los más utilizados. Consideran que el penacho emitido sigue una distribución gaussiana perpendicular al movimiento convectivo principal. De este modo se pretende simular la difusión de contaminantes en la dirección no dominante. Sin embargo, no han conseguido una descripción real del fenómeno de difusión, aunque permiten obtener resultados aproximados muy rápidamente.
 - Modelos de diferencias finitas, tratan de resolver la ecuación de difusión atmosférica utilizando diferentes planteamientos físicos:

- Eulerianos, utilizan un sistema de referencia absoluto y tratan de calcular la difusión referida a este sistema mediante distintas soluciones de integración numérica.
- Lagrangianos, distinguen 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 de contaminante considerados; otro relativo, referido a un punto representativo de la traslación media del penacho, para obtener una mejor dispersión del penacho debida a la turbulencia.

De Castro (2001) destaca que existe un gran número y variedad de alternativas aplicadas en la representación del flujo de contaminantes en la atmósfera, lo que nos lleva a pensar que no nos encontramos ante un único problema, sino ante 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. Por ejemplo, las aproximaciones habitualmente consideradas para el tratamiento de la turbulencia implican distintos grados de isotropía del medio. Estas aproximaciones no representan exactamente el comportamiento de la atmósfera real, y su desviación depende de las condiciones meteorológicas (estabilidad atmosférica), del tamaño de la región considerada y de la escala de tiempo de predicción y de resolución temporal exigidas.

Modelos de dispersión atmosférica. Planteamiento general.

Los modelos de dispersión atmosférica son una de las soluciones más extendidas al problema del comportamiento de los contaminantes en la atmósfera. 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):

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

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 desaparición 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, la vía euleriana y la vía lagrangiana; y muchas soluciones particulares, especialmente para la vía lagrangiana.

Soluciones euleriana y lagrangiana; la aproximación gaussiana.

Para poder resolver cualquier problema de transporte de contaminantes en la atmósfera se deben establecer las ecuaciones de balance de materia correspondientes. La forma en que esta resolución se lleve a cabo puede ser bastante diferente; y así, clásicamente, se han planteado dos soluciones genéricas al problema.

Una de ellas es la solución euleriana, según la cual se establece un sistema de referencia fijo (habitualmente, centrado en el foco emisor), y se tratan de resolver las ecuaciones de balance de materia, para cada contaminante, con diferentes grados de aproximación. La otra es la solución lagrangiana, que utiliza dos sistemas de coordenadas, uno fijo (el foco emisor) para el movimiento general de los contaminantes (advección) y otro móvil, que se desplaza con el penacho, para la descripción de la difusión turbulenta en el seno del penacho (Seinfeld, 2012). En ambas soluciones, se asume el conocimiento de las variables que definen el flujo atmosférico y condicionan la dispersión de los contaminantes.

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.

La solución euleriana.

Si tenemos N componentes inertes de un fluido, la concentración de cada uno de ellos, que debe verificar el balance de materia sobre un elemento de volumen, se expresa según la ecuación de difusión atmosférica:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_j \frac{\partial c}{\partial x_j} = v_c \frac{\partial^2 c}{\partial x_j^2} + S_c \tag{Ec 2}$$

donde v_c es la difusividad molecular del componente en el aire, S_c es el término de la entrada del contaminante desde los focos emisores, c es la concentración de contaminante en el instante t y la posición x_j ; cuya dispersión está afectada por el flujo u_j .

Para la solución completa del problema, en el medio atmosférico, además han de verificarse las ecuaciones de Navier-Stokes, de conservación de la energía, la ecuación de continuidad (balance de materia global) y la ecuación de estado de los gases ideales (Seinfeld, 2012). Esto supone que, para resolver el problema sería preciso que se cumplieran simultáneamente los balances de materia, energía y cantidad de movimiento. Sin embargo, dado que las especies contaminantes siempre se encuentran en la atmósfera en concentraciones muy pequeñas (del orden de ppm), se asume que su presencia no afecta al flujo atmosférico ni a los balances de materia global o de energía. De acuerdo con esto, la velocidad y la temperatura del aire se consideran independientes de las concentraciones de las diferentes especies, y la ecuación de difusión atmosférica puede resolverse independientemente.

La resolución de esta ecuación para cada contaminante, sobre un sistema de referencia fijo, es la base de los modelos eulerianos. Los modelos lagrangianos consideran un sistema de referencia móvil y obtienen soluciones propias bajo esa premisa.

De la aplicación de un balance de componente a cada especie contaminante, en un volumen infinitesimal, se desarrolla la ecuación de difusión atmosférica (Ec 1).

En régimen turbulento, las velocidades son funciones aleatorias del espacio y el tiempo; habitualmente, esto se expresa desglosando cada variable en una componente media u_j y su fluctuación u'_j ; la ecuación que define la distribución de cada contaminante será, por tanto,

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\bar{u}_j + u'_j)c_i] = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j \partial x_j} + R_i(c_1, \dots, c_N) + S_i(\bar{x}, t) \tag{Ec 3}$$

Esta expresión proviene de la aplicación de la teoría de la perturbación turbulenta, según la cual $\bar{u}'_j = 0$ (Seinfeld, 2012).

Dado que u'_j son variables aleatorias, c_i también será una variable aleatoria y, por tanto, no es posible la determinación biunívoca de c_i en función del espacio y el tiempo. El planteamiento del problema cambia radicalmente, puesto que se debe definir un nuevo objetivo: la probabilidad de que la concentración de una especie i se encuentre dentro de un intervalo, para un lugar y un momento determinados; pero esta función de densidad de probabilidad no puede ser definida fácilmente para un proceso de alto grado de aleatoriedad como es la difusión atmosférica, por lo que se limita a estimar algunas propiedades estadísticas de c_i . Se define así la media $\langle c_i \rangle$ como el promedio de las concentraciones resultantes de infinitos experimentos realizados en las mismas condiciones medias. Si se expresa $c_i = \langle c_i \rangle + c'_i$, con la condición de que $\langle c'_i \rangle = 0$, la ecuación resultante que engloba el conjunto infinito de experimentos será:

$$\frac{\partial \langle c_i \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} (\bar{u}_j \langle c_i \rangle) + \frac{\partial}{\partial t} (u'_j c'_i) = D_i \frac{\partial^2 \langle c_i \rangle}{\partial x_j \partial x_j} + \langle R_i(\langle c_1 \rangle + c'_1, \dots, \langle c_N \rangle + c'_N) \rangle + S_i(\bar{x}, t) \tag{Ec 4}$$

dado que $\bar{u}'_j = 0$ y $\langle c'_i \rangle = 0$.

Si los contaminantes son inertes ($R_i=0$) se tienen cuatro variables independientes para cada especie, $\langle c_i \rangle$, $\langle u'_j c'_i \rangle$, $j=1, 2, 3$, y solo tres ecuaciones ($j=1, 2, 3$): no es posible entonces resolver el sistema. Para resolverlo, será necesario plantear

hipótesis adicionales que permitan el establecimiento de alguna nueva relación entre las variables independientes, antes indicadas: un modelo de difusión turbulenta.

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 hemos visto previamente en la definición de la solución euleriana, 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 así $\psi(x_1, x_2, x_3, t) dx_1 dx_2 dx_3 = \psi(\vec{x}, t) d\vec{x}$ 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 tanto, $\psi(\vec{x}, t)$ es la función de densidad de probabilidad, que por definición debe verificar (Seinfeld, 2012),

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\vec{x}, t) d\vec{x} = 1 \tag{Ec 5}$$

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 que, si el elemento de contaminante está en \vec{x}' en un tiempo t' , se desplace hasta \vec{x} en el instante t : es la densidad de probabilidad de transición, y se expresa como $Q(\vec{x}, t | \vec{x}', t')$.
- La densidad de probabilidad de que un elemento de contaminante se encuentre en \vec{x}' en el instante t , para todas las posiciones iniciales \vec{x}' ,

$$\psi(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\vec{x}, t | \vec{x}', t') \psi(\vec{x}', t') d\vec{x}' \tag{Ec 6}$$

Para 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:

$$\langle c(\vec{x}, t) \rangle = \sum_{i=1}^n \psi_i(\vec{x}, t) \tag{Ec 7}$$

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,

$$\langle c(\vec{x}, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0) \langle c(\vec{x}_0, t_0) \rangle d\vec{x}_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\vec{x}, t | \vec{x}', t') S(\vec{x}', t') dt' d\vec{x}' \tag{Ec 8}$$

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.

La aproximación gaussiana.

Como se ha mostrado previamente, ni la solución euleriana ni la lagrangiana aportan un resultado aplicable al problema de la distribución de contaminantes en la atmósfera, debido al problema de cierre o resolución conjunta de las ecuaciones que se derivan de ellas. Por lo que habitualmente es preciso asumir algunas aproximaciones para obtener una solución aplicable, bien sea una solución analítica o una solución numérica abordable por los medios computacionales de que se disponga. La solución analítica más ampliamente utilizada, y que ha tenido mayor difusión, es la ecuación gaussiana, y ha

sido también el origen de diversas formulaciones numéricas. Esta ecuación se obtiene a partir de la solución euleriana o de la solución lagrangiana, asumiendo las mismas aproximaciones.

En primer lugar, se considera que las especies contaminantes son inertes ($R_i = 0$). Por tanto, a partir de la solución euleriana el problema se reduce a definir una expresión para $\langle u'_j c' \rangle$, es decir, un modelo de turbulencia. El habitualmente utilizado para determinar una expresión es el de "Longitud de Mezcla" (extensión de la ley de Fick para la difusión molecular) según el cual (Seinfeld, 2012),

$$\langle u'_j c' \rangle = - \sum_{j=1}^3 K_{jk} \frac{d\langle c \rangle}{dx_k}, \quad k=1, 2, 3 \quad (\text{Ec 9})$$

donde K_{jk} es la difusividad turbulenta o de remolino para la dirección j provocada, según la hipótesis del modelo, por un gradiente de concentración en la dirección k . Podrían plantearse así nueve expresiones, tres para cada dirección de transporte; pero, considerando que los gradientes de concentración en otras direcciones distintas a la del transporte no afectan a este, el problema se reduce a tres expresiones, con tres incógnitas K_{jj} :

$$\langle u'_j c' \rangle = -K_{jj} \frac{d\langle c \rangle}{dx_j}, \quad j=1, 2, 3 \quad (\text{Ec 10})$$

La segunda hipótesis, de aplicación prácticamente general en la atmósfera, estima que la difusión molecular es mucho menor que la difusión turbulenta en la misma dirección, de modo que resulta despreciable,

$$D_i \frac{d^2\langle c \rangle}{dx_j dx_j} \ll \frac{d\langle u'_j c' \rangle}{dx_j} \quad (\text{Ec 11})$$

Por otra parte, la hipótesis de atmósfera incompresible conlleva que la ecuación de continuidad se reduce a la condición de un campo de vientos con divergencia nula, debido a que la densidad del aire se considera prácticamente constante; como consecuencia,

$$\frac{d\bar{u}_j}{dx_j} = 0 \quad (\text{Ec 12})$$

Esta condición es de especial importancia en la aplicación de los modelos de difusión atmosférica. De la aplicación de estas hipótesis a la ecuación de difusión atmosférica, Ec 4, se obtiene:

$$\frac{d\langle c \rangle}{dt} + \bar{u}_j \frac{d\langle c \rangle}{dx_j} = \frac{d}{dx_j} \left(K_{jj} \frac{dc}{dx_j} \right) + S(\bar{x}, t) \quad (\text{Ec 13})$$

Si se considera que las difusividades turbulentas K_{jj} son constantes en cada dirección, esta ecuación se transforma en:

$$\frac{dc}{dt} + \bar{u} \frac{d\langle c \rangle}{dx} = K_{xx} \frac{d^2\langle c \rangle}{dx^2} + K_{yy} \frac{d^2\langle c \rangle}{dy^2} + K_{zz} \frac{d^2\langle c \rangle}{dz^2} \quad (\text{Ec 14})$$

para las condiciones iniciales y de contorno:

$$\begin{aligned} \langle c(x, y, z, 0) \rangle &= S \delta(x) \delta(y) \delta(z) \\ \langle c(x, y, z, t) \rangle &= 0 \text{ cuando } x, y, z \rightarrow \pm\infty \end{aligned} \quad (\text{Ec 15})$$

La solución analítica a esta ecuación diferencial, o solución gaussiana, es:

$$\langle c(x, y, z, t) \rangle = \frac{S}{8\sqrt{(\pi)^3} \sqrt{K_{xx} K_{yy} K_{zz}}} e^{-\frac{(x-\bar{u}t)^2}{4K_{xx}t} - \frac{y^2}{4K_{yy}t} - \frac{z^2}{4K_{zz}t}} \quad (\text{Ec 16})$$

Como se puede observar, el nombre de la solución (gaussiana) se debe a la forma de la función resultante de la integración (Figura 1).

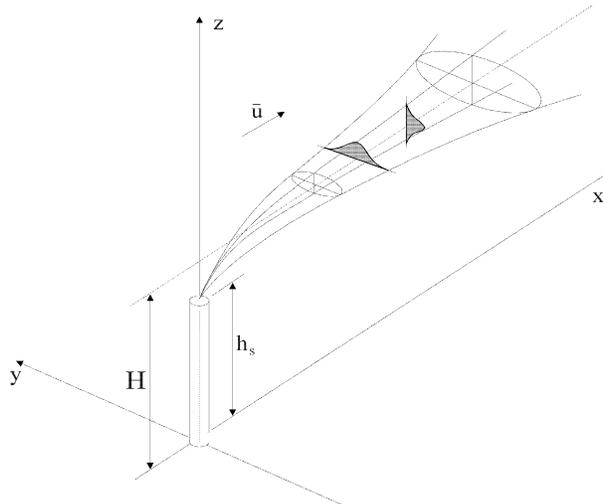


Figura 1. Esquema de un penacho gaussiano. H , altura media de transporte del penacho; h_s , altura de emisión y \vec{u} , velocidad del viento (Zannetti, 1990).

Llevadas a la realidad, las aproximaciones que se han considerado suponen que esta ecuación solo será válida cuando,

- Las reacciones químicas son lentas comparadas con el transporte turbulento.
- Las escalas de longitud y tiempo características de los cambios de concentración son grandes comparadas con las correspondientes escalas de transporte turbulento.

Estas condiciones no se cumplen para focos muy localizados en zonas muy próximas a ellos. El modelo solo es válido, por tanto, en situaciones con reacciones químicas relativamente lentas (contaminantes inertes) y focos dispersos (zonas urbanas). Sin embargo, esta solución ha sido ampliamente utilizada para la estimación de la influencia que un futuro foco emisor puede tener sobre una zona determinada, mediante la utilización de datos meteorológicos históricos medios sobre largos períodos de tiempo: mensuales, estacionales y anuales. La consideración de estos largos períodos elimina la influencia de las distintas escalas de turbulencia sobre la variabilidad del fenómeno, en tanto que la transformación de los contaminantes se considera, por simplicidad, mediante un factor de decaimiento que asume una cinética de pseudoprimer orden aplicable al resultado final de la ecuación gaussiana.

La solución lagrangiana permite obtener la misma expresión de distribución gaussiana que la solución euleriana, bajo las hipótesis en que dicha distribución es aplicable. Adicionalmente, los modelos lagrangianos tienen una mayor flexibilidad en la utilización de esta aproximación gaussiana, puesto que pueden limitar la aplicación de dicha solución al sistema de coordenadas móvil que sigue el penacho. De este modo, puede dividirse el entorno de simulación en regiones móviles cuasiestacionarias mucho más pequeñas que sí pueden cumplir las hipótesis para las que se obtiene condiciones de la ecuación gaussiana. Esta es una de las razones por las que la solución gaussiana se emplea actualmente en la modelación y simulación no estacionaria del flujo y dispersión de contaminantes en la atmósfera, mediante los modelos lagrangianos basados en distribuciones gaussianas.

Aplicaciones de modelos de dispersión atmosférica

Existen muchas alternativas para clasificar los modelos de dispersión atmosférica y es posible que un mismo modelo pueda estar incluido en varias de ellas. El presente trabajo analiza los modelos disponibles según la solución dada a la ecuación de balance de materia. La Tabla 1 relaciona una larga lista de los modelos revisados en este trabajo.

Algunos modelos combinan ambas variantes de solución como los que describe Holmes (2006) que además comenta algunas de sus aplicaciones: GRAL, TAPM y ARIA Regional. Para el modelo GRAL (euleriano-lagrangiano), que está diseñado para modelar la dispersión de compuestos inertes dentro de campos de viento no homogéneos, aclara que está limitado

por no poder tener en cuenta toda la formación química de las partículas. Sin embargo, se reporta buena precisión para GRAL al simular las concentraciones de SF₆ durante diferentes estudios en terrenos, tanto llanos como complejos.

Euleriano-lagrangiano		
GRAL TAPM ARIA Regional		
Eulerianos		Lagrangianos
BOLCHEM	MATCH	APM2
CAC	METEX	ATSTEP
CAMx	MOCAGE	CALPUFF
CHIMERE	MUSCAT	DIPCOT
CMAQ	REMOTE	FLEXPART
EMEP	SILAM	HYSPLIT
EURAD	STEM-II	JRODOS
EUROS	STEM-III	LPM
FALL3D	TM5	MLDPO
FEOM	UAMV	NAME
GAMES	WRF/Chem	RIMPUFF
MAQSIP		STILT

Tabla 1. Modelos de dispersión atmosférica revisados

Por otro lado, TAPM, modelo regional de dispersión euleriano que incluye un módulo lagrangiano para partículas en las cercanías de los focos emisores, mostró buena concordancia en la comparación de la concentración de las partículas con medidas, en un estudio en Melbourne. TAPM se evaluó, igualmente, frente a dos de los estudios de validación de Indianápolis y Kincaid, que simulan las concentraciones urbanas y rurales típicas en terreno plano. En este estudio se comparó con CALPUFF y AERMOD, y TAPM mostró buenos resultados. Los autores concluyeron que esto demostraba que TAPM proporciona una predicción precisa de la meteorología local.

El modelo ARIA Regional se desarrolló con el fin de analizar la dispersión de gases y partículas, procedentes de focos emisores industriales, de transporte, en dominios de hasta 1000 km, con una resolución entre el 1 km y 10 km. Este, utiliza dos enfoques teóricos diferentes que permiten al usuario elegir el modelo de dispersión más adecuado: el Modelo FARM, que se basa en la aproximación de Euler y el SPRAY basado en el enfoque de Lagrange.

Este último, el modelo SPRAY ha sido utilizado para estudiar la dispersión de contaminantes pasivos en terreno complejo (Gariazzo y otros, 2004) mostrando que a pesar de calcular con precisión la velocidad del viento, se observaron algunas discrepancias en la velocidad de fricción; el ajuste en general, fue muy bueno.

Aplicaciones de modelos eulerianos

Varias son las experiencias de aplicaciones de modelos eulerianos (Huijnen y otros, 2010; Langmann y otros, 2012).

En una de ellas, Méndez y otros (2003) aplicaron el modelo STEM-II para entender la influencia de la reducción de las emisiones de SO₂ de un foco emisor en la deposición en sus cercanías. Analizaron, además, los principales procesos que intervienen en la deposición de contaminantes patrones.

En otro estudio, Folch y otros (2012) utilizan el modelo de dispersión de cenizas FALL3D y validan, comparando los resultados con medidas terrestres y obtenidas desde aeroplanos, durante las emisiones del volcán Eyjafjallajökull en el 2010.

Por su parte, Pan y otros (2010) obtuvieron simulaciones anuales de mercurio atmosférico en Asia oriental mediante STEM-Hg (módulo de mercurio de STEM-III) para estudiar la acumulación de mercurio en la región.

Otro, es el trabajo de Pisoni y otros (2010) quienes analizaron la sensibilidad a la resolución espacial de un modelo de calidad del aire, considerando un enfoque multi-objetivo. El dominio seleccionado fue el norte de Italia, un área a menudo

afectada por la alta exposición a las PM_{10} y utilizando el sistema GAMES, que contiene tres módulos principales: el modelo fotoquímico TCAM, el preprocesador meteorológico PROMETEO y el procesador de emisiones POEMPM.

Por otro lado, Sofiev y otros (2010) desarrollaron un esquema no iterativo para diagnosticar las características de la capa superficial de viento, los perfiles de temperatura y humedad, como parte de una interfaz general para el acoplamiento HIRLAM/SILAM. La verificación del esquema incluyó la comparación a largo plazo con medidas de estaciones meteorológicas en los Países Bajos, y Finlandia.

Mientras que, Renner y otros (2010) realizaron simulaciones regionales de aerosoles de sulfato, nitrato y amonio con el modelo COSMO-MUSCAT.

El modelo WRF/Chem fue utilizado por Misenis y otros (2010) para examinar la sensibilidad de las predicciones de calidad del aire para dos esquemas de capa límite planetaria y tres modelos de la superficie terrestre.

Por otro lado, Zeng y otros (2010) desarrollaron el sistema METEX para el cálculo de trayectorias que se destaca por su flexibilidad y facilidad de uso.

Mientras que van Velzen y Segers (2010) emplearon el modelo LOTOS-EUROS para predecir el smog y la dispersión de los aerosoles en los Países Bajos.

Por su parte Gómez y otros (2010) aplicaron el modelo FEOM a la solución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que describe los mecanismos de las reacciones químicas en un modelo ideal de transporte de contaminantes.

Otro es el estudio de Monteiro y otros (2012) quienes aplicaron un análisis estadístico y modelizaron un episodio de invasión de ozono producido en una zona montañosa en el norte de Portugal, con el objetivo de identificar su origen y formación. Con este fin utilizaron un acoplamiento MM5/EURAD -IM.

Cohan y otros (2010) aplicaron una técnica de análisis de sensibilidad de orden superior para cuantificar el grado en que la incertidumbre de la velocidad de reacción influye en las estimaciones de las concentraciones de ozono y su sensibilidad a las emisiones de precursores, durante un episodio de contaminación del aire en Houston, Texas, utilizando el modelo CAMx. Otro reporte de este modelo fue el de Song y otros (2010) quienes investigaron la sensibilidad de la producción de ozono a las emisiones de precursores en cinco condiciones meteorológicas diferentes en la Zona Metropolitana del Valle de México utilizando un acoplamiento con WRF. Mientras que Borrego y otros (2010) evaluaron la contaminación fotoquímica en el Área Metropolitana de Porto Alegre, Brasil, durante un período de verano, acoplándolo con MM5 y comparándolo con un acoplamiento de MM5 y CALGRID. Por su parte, Astitha y otros (2010) exploraron el origen y destino de los aerosoles continentales, en el océano Atlántico central, en términos de composición química, número y distribución de tamaño, utilizando la combinación de las últimas versiones del modelo de polvos SKIRON y CAMx, datos satelitales y medidas. Ferreira y otros (2012) aplicaron el acoplamiento MM5/CAMx en Norteamérica para todo un año, en el marco de la Iniciativa Internacional de Evaluación de Modelos de Calidad del Aire. El trabajo se centró en ozono, dióxido de nitrógeno, dióxido de azufre y monóxido de carbono, que son los contaminantes regulados para la protección de la salud humana, e incluyeron análisis cualitativos y cuantitativos de la distribución temporal y espacial de las concentraciones modeladas. Posteriormente, Zyrichidou y otros (2015) aplicaron la técnica de modelación inversa para obtener, a escala regional, estimaciones de emisiones. Dolwick y otros (2015) compararon dos metodologías independientes para la estimación de los niveles de fondo de ozono en el occidente de los Estados Unidos; una con CAMx y la otra con CMAQ. Pirovano y otros (2015) analizaron los resultados de distribución de las fuentes de $PM_{2.5}$ producidas por receptores en el norte de Italia. Mientras que Koo y otros (2015) aplicaron la aproximación bayesiana inversa con el fin de minimizar las discrepancias entre las medidas y las predicciones del modelo, y así optimizar emisiones de PM_{10} , en el Este de Asia.

Uno de los modelos eulerianos más usados es CMAQ. Kim y otros (2010) llevaron a cabo una serie de análisis de sensibilidad con cinco esquemas de capa límites diferentes, asociados con tres modelos diferentes de superficie terrestre, para examinar el impacto de las variables meteorológicas en las concentraciones de ozono predichas usando CMAQ con perspectiva local. Por su parte, Chemel y otros (2010) llevaron a cabo una evaluación integral del modelo CMAQ, como parte de la estimación de la contaminación en el Reino Unido. El rendimiento del modelo fue evaluado para los valores límites normativos de los contaminantes y de las especies que contribuyen a la deposición ácida y nitrogenada con medidas de las redes nacionales de vigilancia. Mientras que Borge y otros (2010) investigaron la influencia de las condiciones químicas de contorno sobre la respuesta del modelo CMAQ sobre la Península Ibérica.

Por un lado, Im y otros (2010) investigaron los altos niveles invernales de PM_{10} , sulfato, y nitrato de amonio en Estambul, utilizando un acoplamiento de alta resolución WRF/CMAQ. Mientras que Mao y otros (2010) llevaron a cabo varias simulaciones regionales de calidad del aire, enfocada en el transporte del este de los EE.UU., y las sometieron a una evaluación exhaustiva utilizando medidas en superficie y en altura. Al mismo tiempo, Lim y otros (2010) estudiaron las salidas de CMAQ en dos resoluciones, para evaluar la discrepancia debido a la discretización del espacio, variando el tamaño de la celda. Y posteriormente, San José y otros (2013) estimaron las concentraciones de benzo(a) pireno en la atmósfera, mediante el uso de CMAQ, con la inclusión de los procesos de transporte, barrido y deposición. Kwok y otros (2015) utilizaron distribución de fuentes para realizar un seguimiento de los impactos de fuentes específicas y de grupos de fuentes en áreas geográficas específicas, y en la entrada de ozono en la capa límite. Foley y otros (2015) evaluaron la capacidad del modelo para predecir los cambios en los niveles de ozono entre 2002 y 2005, luego de implementado un plan para la reducción de las emisiones de fuentes móviles, en el este de los Estados Unidos. Wang y otros (2015) emplearon un acoplamiento WRF/CMAQ para entender un evento de inmisión de ozono, en Hong Kong. Mientras que Han y otros (2015) compararon el modelo con medidas sobre Asia Oriental, para evaluar los inventarios de flujos de emisión de NO_x .

Un reporte novedoso fue el de Djalalova y otros (2010) quienes crearon un conjunto multimodelo de predicción de la calidad del aire, a partir de siete modelos (dos de ellos eulerianos MAQSIP-RT y CMAQ), ejecutados en tiempo real durante el experimento TEXAQS-II. La evaluación de ozono superficial y material particulado se realizó con medidas.

Los resultados de los modelos de varias instituciones que siguieron la erupción del volcán Eyjafjallajökull fueron compilados por Langmann y otros (2012). Ellos indicaron que el responsable de Toulouse de la vigilancia sobre los volcanes empleó MOCAGE. Simultáneamente, se aplicaron otros modelos de dispersión durante la erupción para contribuir al pronóstico del transporte de las cenizas volcánicas en la atmósfera, o para reconstruir su distribución y estimar sus concentraciones. Entre ellas se encuentran los modelos EURAD, FALL3D, REMOTE y CMAQ.

El modelo CHIMERE ha sido utilizado por varios grupos de investigación para estimar las concentraciones de contaminantes en el aire en diferentes países europeos. Vivanco y otros (2009) realizaron una evaluación del rendimiento del modelo, en los períodos de primavera y verano en España, ingestado con emisiones EMEP. En otra aplicación de CHIMERE, Valari y otros (2010) propusieron una metodología general, aplicable a cualquier otro modelo de calidad del aire, que combina la información, a escala submalla, de emisión y uso del suelo, con el fin de desagregar el flujo de emisión promedio de la malla en un conjunto de focos emisores específicos. Mientras que Szopa y otros (2009) acoplaron CHIMERE con el módulo LMDz-INCA (Hauglustaine y otros 2004), e investigaron el beneficio para la simulación Europea de ozono, de utilizar variaciones diarias de las condiciones de contorno químicas, producidas por una plataforma global de pronóstico del tiempo y químico; en lugar de las medidas mensuales en las fronteras de un modelo regional. En otra aplicación, Borrego y otros (2012) investigaron el origen de altas concentraciones de ozono aplicando un acoplamiento WRF/CHIMERE en el noroeste de la Península Ibérica. La configuración se aplicó con alta resolución con el fin de estudiar tanto la contribución de los focos emisores locales así como la influencia de la contaminación transfronteriza. Recientemente, Terrenoire y otros (2015) realizaron una simulación de alta resolución para reproducir la variabilidad de NO_2 , O_3 , PM_{10} , $PM_{2.5}$ sobre Europa durante el año 2009. Menut y otros (2015) estudiaron la variabilidad de las concentraciones de ozono y aerosoles sobre el área mediterránea durante los meses de junio y julio de 2013. Boichu y otros (2015) utilizaron el modelo para describir la dispersión de SO_2 producto de emisiones volcánicas. Mientras que Péré y otros (2015) evalúan el impacto de los aerosoles en la extinción de solar en Europa oriental durante episodios de incendios forestales en el 2010.

Kukkonen y otros (2009) recopilaron información sobre varios modelos regionales de calidad del aire (BOLCHEM, CAC, CHIMERE, EMEP, EURAD, MATCH, MOCAGE, UAMV y SILAM). Intercompararon además, y evaluaron su estructura física y química, en el marco del programa COST ES0602.

Una extensa comparación de NO_2 troposférico, sobre Europa, fue presentada por Huijnen y otros (2010) a partir de medidas con la mediana de un conjunto de ocho modelos eulerianos regionales de calidad del aire (BOLCHEM, CAC, CAMx, CHIMERE, EMEP, EURAD-IM, MATCH y SILAM); y una intercomparación de estos con dos modelos globales, uno de ellos euleriano: TM5.

Aplicaciones de modelos lagrangianos

Se han reportado buenos resultados para los modelos lagrangianos, tanto para llanuras con condiciones homogéneas y estacionarias (Tsuang, 2003) como para condiciones no homogéneas e inestables en terreno complejo (Jung y otros, 2003).

En una experiencia reciente, Kovalets y otros (2013) investigaron el impacto de los campos de viento de diagnóstico, en los resultados del cálculo, a microescala, de la dispersión atmosférica en condiciones de terreno moderadamente complejos. Compararon además los resultados de un amplio conjunto de datos radiológicos y meteorológicos, recogidos en el sitio del reactor de investigación de Chalk River Laboratories en Canadá, con JRODOS, sistema de respuesta de emergencia nuclear de los Estados Unidos, utilizando SF₆ como trazador. JRODOS se compone por un preprocesador meteorológico (que incorpora el procedimiento de minimización de la divergencia) y de los modelos de dispersión, a elegir por el usuario, ATSTEP, RIMPUFF y DIPCOT. En sus resultados, DIPCOT y RIMPUFF mostraron aproximadamente la misma exactitud, superaron a ATSTEP. Finalmente recomiendan utilizar RIMPUFF ya que es computacionalmente más eficiente que DIPCOT, a pesar de que los resultados del primero en condiciones de terreno llano podrían ser no plenamente representativos de las condiciones del terreno moderadamente complejo.

Mientras, Wen y otros (2012) propusieron un modelo de calidad del aire lagrangiano, de retrotrayectorias, sobre la base de la inversión del tiempo de trayectorias de partículas estocásticas. El modelo simula el transporte de paquetes de aire, que se mueven hacia atrás en el tiempo utilizando conjuntos de partículas ficticias generados a partir del modelo lagrangiano STILT. El modelo fue utilizado para simular concentraciones de O₃ y NO_x en ocho estaciones de la provincia canadiense de Ontario. Las concentraciones pronosticadas fueron comparadas con medidas y mostraron buena correspondencia con el O₃, además de mostrar un rendimiento mejor. Sin embargo, el modelo subestimó al NO_x en sitios alejados de las grandes ciudades, posiblemente debido a la incapacidad de las grandes celdas de emisiones de resolver los focos puntuales.

El entorno de la planta térmica As Pontes, al noroeste de la península ibérica ha sido ampliamente estudiado. Souto y otros (1998) desarrollaron un modelo de difusión atmosférica no reactivo, y lo emplearon para la simulación de la concentración de SO₂. Luego compararon la forma de los penachos. En un trabajo posterior (Souto y otros, 2000) probaron la nueva versión APM2, utilizando un foco único, muy elevado, sobre terreno complejo, durante cuatro periodos representativos. Más tarde, (Souto y otros, 2001) predijeron el transporte y la dispersión de contaminantes en la capa inferior atmosférica utilizando los acoplamientos entre el modelo de desarrollo propio PMETEO con LPM, y con APM2, de la concentración a nivel del suelo de SO₂, en condiciones inestables. Compararon además, los resultados con medidas. A continuación (Souto y otros, 2009), justificaron el uso del sistema experto SAGA. En el mismo, los pronósticos meteorológicos, se obtienen mediante el uso de un modelo meteorológico no hidrostático, nombrado Advanced Regional Prediction System, ARPS, ajustado específicamente a la región de la planta. Sus resultados pueden ser utilizados como ingesta de los modelos APM2 y LPM.

Un modelo de amplio uso es FLEXPART. Wei y otros (2011) utilizaron un acoplamiento (WRF-FLEXPART) para describir el impacto de un anticiclón sobre la calidad del aire en el norte de china. Igualmente, Bei y otros (2013) presentaron los resultados de un análisis, de las condiciones meteorológicas y los patrones de transporte del penacho durante el estudio Cal-Mex2010, llevado a cabo en Tijuana, México, utilizando el mismo acoplamiento. Halse y otros (2013) desarrollaron, basado en FLEXPART, un sistema de pronóstico para predecir y evaluar, a largo plazo, el transporte atmosférico de episodios de compuestos bifenilos policlorados, en sitios remotos en el sur de Noruega. Arnold y otros (2015) investigaron el papel de la precipitación en un escenario del accidente de Fukushima. Djambazov y Pericleous, (2015) cuantificaron el nitrógeno disuelto en el mar procedente del aire en Canal Inglés y en el sur del Mar del Norte. Mientras que Miao y otros (2015) estudiaron los mecanismos de transporte de contaminantes en un evento de bruma en la Bahía de Bohai, en China, mediante un acoplamiento WRF/FLEXPART para comprender los efectos de las circulaciones atmosféricas locales y la estructura de la capa límite atmosférica.

Los resultados de los modelos de varias instituciones que siguieron la erupción del volcán Eyjafjallajökull fueron compilados por Langmann y otros (2012). Ellos indicaron que el responsable londinés, de la vigilancia sobre los volcanes de Islandia, utilizó el modelo lagrangiano NAME, mientras que los de Montreal emplearon MLDPO. Simultáneamente, se aplicaron otros modelos de dispersión durante la erupción del Eyjafjallajökull para contribuir al pronóstico del transporte de las cenizas volcánicas en la atmósfera, o para reconstruir su distribución y estimar sus concentraciones; entre ellos se encuentra FLEXPART.

Son numerosos los reportes de utilización de HYSPLIT. Davis y otros (2010) compararon y combinaron, mediante dos enfoques diferentes, la evaluación diaria de las concentraciones vespertinas de ozono a nivel de suelo, en los alrededores del Valle de Shenandoah, en Virginia. Otro estudio es el de Wang y otros (2010) quienes identificaron, en Beijing al norte de China, las rutas regionales de transporte atmosférico de PM_{10} a través de una modelación integrada, utilizando, entre otros, HYSPLIT. Carvalho y otros (2010) caracterizaron las condiciones atmosféricas que conducen a episodios de inmisión de ozono en el noreste de Portugal y analizaron las anomalías de los patrones sinópticos y las retrotrayectorias. Mientras que Adame y otros (2012) calcularon retrotrayectorias con este modelo para tratar de comprender el origen de un evento raro de inmisión de ozono, monóxido de carbono y PM_{10} , en el sudeste de la península ibérica. Su y otros (2015) también obtuvieron retrotrayectorias de partículas en Hong Kong durante todo el año 2011. Mientras que Derstroff y otros (2015) explicaron las variaciones de las relaciones de mezcla de COV mediante el empleo de retrotrayectorias procedentes de Europa oriental hacia la occidental.

Diversas son las configuraciones implementadas en el modelo de dispersión de pufs, CALPUFF, en varios estudios, en los cuales se evidencian su versatilidad. Villasenor y otros (2003) estudiaron la dispersión del polvo procedente de Ciudad México; Cohen y otros (2005), describieron las emisiones provenientes de vehículos automotores en Portland, Oregón; Taseko (2008) lo emplearon en una zona minera en Canadá; Song y otros (2008) evaluaron un complejo industrial que incluye producción química, textil, cuero, alimentos, papel y pulpa; Lonati y otros (2010) analizaron las emisiones de buques en un puerto italiano de la costa del mar Jónico; MacIntosh y otros (2010) lo utilizaron en la industria metalúrgica; Poplawski y otros (2011) investigaron cruceros en West Virginia; Fishwick y Scorgie (2011), caracterizaron una región minera en Queensland; Ranzato y otros (2012) examinaron los olores en los alrededores de una planta de tratamiento mientras que Curci y otros (2012) estimaron las emanaciones de una planta térmica de biomasa, estas dos últimas en Italia. Posteriormente Tartakovsky y otros (2013) estudiaron canteras y minas a cielo abierto. Mientras que Rood, A. S. (2014) validó CALPUFF utilizando para ello un conjunto de datos obtenidos con trazadores en una zona industrial en Denver, Colorado, Estados Unidos. Prueksakorn y otros (2014) investigaron el efecto de las variaciones estacionales en la dispersión de olores de zonas industrial en Changwon, una ciudad industrial situada en la región sureste de Corea del Sur. Sówka y otros (2014) estimaron el impacto del olor de una planta de tratamiento de aguas residuales en Polonia y Ogneva-Himmelberger y otros (2015) evaluaron concentraciones de amoníaco en granjas porcinas para evaluar la exposición del público al contaminante. 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 (Valdenebro y otros, 2013, Deb y otros, 2014; Fenn y otros, 2015).

CONCLUSIONES

Este trabajo proporciona una revisión detallada de modelos de dispersión atmosférica y demuestra que existen diferencias considerables entre los modelos disponibles.

Algunos estudios han demostrado que un modelo podría funcionar mejor que otro en un estudio, sin embargo, los resultados se pueden invertir en un escenario diferente. Por lo tanto, la elección del modelo depende del tiempo requerido, el entorno del dominio y la naturaleza de las fuentes de emisión.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Adame, J. A., Hernandez-Ceballos, M. A., Bolívar, J. P. y De la Morena, B. (2012). Assessment of an air pollution event in the southwestern Iberian Peninsula. *Atmospheric Environment*, 55, 245-256.
2. Arnold, D., Maurer, C., Wotawa, G., Draxler, R., Saito, K. y Seibert, P. (2015). Influence of the meteorological input on the atmospheric transport modelling with FLEXPART of radionuclides from the Fukushima Daiichi nuclear accident. *Journal of environmental radioactivity*, 139, 212-225.
3. Astitha, M., Kallos, G., Spyrou, C., O'Hirok, W., Lelieveld, J. y Denier van der Gon, H. A. C. (2010). Modelling the chemically aged and mixed aerosols over the eastern central Atlantic Ocean—potential impacts. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(13), 5797-5822.
4. Bara, B. M., Wilson, D. J. y Zelt, B. W. (1992). Concentration fluctuation profiles from a water channel simulation of a ground-level release. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 26(6), 1053-1062.
5. Bei, N., Li, G., Zavala, M., Barrera, H., Torres, R., Grutter, M., Gutiérrez, W., García, M., Ruiz-Suarez, L. G., Ortinez, A., Guitierrez, Y., Alvarado, C., Flores, I. y Molina, L. T. (2013). Meteorological overview and plume transport patterns during Cal-Mex 2010. *Atmospheric Environment*, 70, 477-489.

6. Boichu, M., Clarisse, L., P  r  , J. C., Herbin, H., Goloub, P., Thieuleux, F., Ducos, F., Clerbaux, C. y Tanr  , D. (2015). Temporal variations of flux and altitude of sulfur dioxide emissions during volcanic eruptions: implications for long-range dispersal of volcanic clouds. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 15(4), 5031-5077.
7. Borge, R., L  pez, J., Lumbreras, J., Narros, A. y Rodr  guez, E. (2010). Influence of boundary conditions on CMAQ simulations over the Iberian Peninsula. *Atmospheric Environment*, 44(23), 2681-2695.
8. Borrego, C., Monteiro, A., Ferreira, J., Moraes, M. R., Carvalho, A., Ribeiro, I., Miranda, A. I. y Moreira, D. M. (2010). Modelling the photochemical pollution over the metropolitan area of Porto Alegre, Brazil. *Atmospheric Environment*, 44(3), 370-380.
9. Borrego, C., Souto, J. A., Monteiro, A., Dios, M., Rodr  guez, A., Ferreira, J., Saavedra, S., Casares, J. J. y Miranda, A. I. (2012). The role of transboundary air pollution over Galicia and North Portugal area. *Environmental Science and Pollution Research*, 20(5), 2924-2936.
10. Carvalho, A., Monteiro, A., Ribeiro, I., Tchepel, O., Miranda, A. I., Borrego, C., Saavedra, S., Souto, J.A. y Casares, J. J. (2010). High ozone levels in the northeast of Portugal: Analysis and characterization. *Atmospheric Environment*, 44(8), 1020-1031.
11. Chemel, C., Sokhi, R. S., Yu, Y., Hayman, G. D., Vincent, K. J., Dore, A. J., Tang, Y. S., Prain, H. D. y Fisher, B. E. A. (2010). Evaluation of a CMAQ simulation at high resolution over the UK for the calendar year 2003. *Atmospheric Environment*, 44(24), 2927-2939.
12. Cohan, D. S., Koo, B. y Yarwood, G. (2010). Influence of uncertain reaction rates on ozone sensitivity to emissions. *Atmospheric Environment*, 44(26), 3101-3109.
13. Cohen, J., Cook, R., Bailey, C. R. y 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.
14. Curci, G., Cinque, G., Tuccella, P., Visconti, G., Verdecchia, M., Iarlori, M. y 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.
15. Davis, R. E., Normile, C. P., Sitka, L., Hondula, D. M., Knight, D. B., Gawtry, S. P. y Stenger, P. J. (2010). A comparison of trajectory and air mass approaches to examine ozone variability. *Atmospheric Environment*, 44(1), 64-74.
16. De Castro, Miguel (2001) Calibraci  n de modelos de dispersi  n atmosf  rica: Aplicaci  n a un modelo de estructuras adaptables. Tesis doctoral. Universidad de Santiago de Compostela.
17. Deb, K., Doherty, B. A., Kanchan, A., Holland, B., Boger, W., Dai, W., Zhang, K. y 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.
18. Derstroff, B., Stoenner, C., Kl  pfel, T., Sauvage, C., Crowley, J. N., Phillips, G. J. Parchatka, U., Lelieveld, J. y Williams, J. (2015). Volatile organic compounds (VOCs) in photochemically aged air from the Eastern and Western Mediterranean. In *Geophysical Research Abstracts*. Copernicus Publications.
19. Djalalova, I., Wilczak, J., McKeen, S., Grell, G., Peckham, S., Pagowski, M., DelleMonache, L., McQueen, J., Tang, Y., Lee, P., McHenry, J., Gong, W., Bouchet, V., Mathur, R. (2010). Ensemble and bias-correction techniques for air quality model forecasts of surface O₃ and PM_{2.5} during the TEXAQS-II experiment of 2006. *Atmospheric Environment*, 44(4), 455-467.
20. Djambazov, G. y Pericleous, K. (2015). Modelled atmospheric contribution to nitrogen eutrophication in the English Channel and the southern North Sea. *Atmospheric Environment*, 102, 191-199.
21. Dolwick, P., Akhtar, F., Baker, K., Possiel, N., Simon, H. y Tonnesen, G. (2015). Comparison of background ozone estimates over the western United States based on two separate model methodologies. *Atmospheric Environment*.
22. Fenn, M. E., Bytnerowicz, A., Schilling, S. L. y 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.
23. Ferreira, J., Rodriguez, A., Monteiro, A., Miranda, A. I., Dios, M., Souto, J. A., Yarwood, G., Nopmongkol, U. y Borrego, C. (2012). Air quality simulations for North America-MM5-CAMx modelling performance for main gaseous pollutants. *Atmospheric Environment*, 53, 212-224.
24. Fishwick, S. y Scorgie, Y. (2011). Performance of CALPUFF in predicting time-resolved particulate matter concentrations from a large scale surface mining operation. In *Proceedings of CASANZ Conference*.
25. Folch, A., Costa, A. y Basart, S. (2012). Validation of the FALL3D ash dispersion model using observations of the 2010 Eyjafjallaj  kull volcanic ash clouds. *Atmospheric Environment*, 48, 165-183.

26. Foley, K. M., Hogrefe, C., Pouliot, G., Possiel, N., Roselle, S. J., Simon, H. y Timin, B. (2015). Dynamic evaluation of CMAQ part I: Separating the effects of changing emissions and changing meteorology on ozone levels between 2002 and 2005 in the eastern US. *Atmospheric Environment*, 103, 247-255.
27. Gariazzo, C., Pelliccioni, A., Bogliolo, M. P. y Scalisi, G. (2004). Evaluation of a Lagrangian particle model (SPRAY) to assess environmental impact of an industrial facility in complex terrain. *Water, air, and soil pollution*, 155(1-4), 137-158.
28. Gómez, M. C. y Tchijov, V. (2010). The FEOM technique applied to a three-dimensional model of diffusion/advection of pollutants. *Environmental Modelling & Software*, 25(4), 602-606.
29. Halse, A. K., Eckhardt, S., Schlabach, M., Stohl, A. y Breivik, K. (2013). Forecasting long-range atmospheric transport episodes of polychlorinated biphenyls using FLEXPART. *Atmospheric Environment*, 71, 335-339.
30. Han, K. M., Lee, S., Chang, L. S. y Song, C. H. (2015). A comparison study between CMAQ-simulated and OMI-retrieved NO₂ columns over East Asia for evaluation of NO_x emission fluxes of INTEX-B, CAPSS, and REAS inventories. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 15(4), 1913-1938.
31. Hauglustaine, D. A., Hourdin, F., Jourdain, L., Filiberti, M. A., Walters, S., Lamarque, J. F. y Holland, E. A. (2004). Interactive chemistry in the Laboratoire de Météorologie Dynamique general circulation model: Description and background tropospheric chemistry evaluation. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* (1984–2012), 109(D4).
32. Holmes, N. S. y Morawska, L. (2006). A review of dispersion modeling and its application to the dispersion of particles: an overview of different dispersion models available. *Atmospheric Environment*, 40(30), 5902-5928.
33. Huijnen, V., Eskes, H. J., Poupkou, A., Elbern, H., Boersma, K. F., Foret, G., Sofiev, M., Valdebenito, A., Flemming, J., Stein, O., Gross, A., Robertson, L., D'Isidoro, M., Kioutsioukis, I., Friese, E., Amstrup, B., Bergstrom, R., Strunk, A., Vira, J., Zyryanov, D., Maurizi, A., Melas, D., Peuch, V.-H. y Zerefos, C. (2010). Comparison of OMI NO₂ tropospheric columns with an ensemble of global and European regional air quality models. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(7), 3273-3296.
34. Im, U., Markakis, K., Unal, A., Kindap, T., Poupkou, A., Incecik, S., Yenigun, O., Melas, D., Theodosi, C. y Mihalopoulos, N. (2010). Study of a winter PM episode in Istanbul using the high resolution WRF/CMAQ modeling system. *Atmospheric Environment*, 44(26), 3085-3094.
35. Jung, Y. R., Park, W. G. y Park, O. H. (2003). Pollution dispersion analysis using the puff model with numerical flow field data. *Mechanics research communications*, 30(4), 277-286.
36. Kim, Y., Fu, J. S. y Miller, T. L. (2010). Improving ozone modeling in complex terrain at a fine grid resolution: Part I—examination of analysis nudging and all PBL schemes associated with LSMs in meteorological model. *Atmospheric Environment*, 44(4), 523-532.
37. Koo, Y. S., Choi, D. R., Kwon, H. Y., Jang, Y. K. y Han, J. S. (2015). Improvement of PM₁₀ prediction in East Asia using inverse modeling. *Atmospheric Environment*, 106, 318-328.
38. Kovalets, I. V., Korolevych, V. Y., Khalchenkov, A. V., Ievdin, I. A., Zheleznyak, M. J. y Andronopoulos, S. (2013). Influence of the diagnostic wind field model on the results of calculation of the microscale atmospheric dispersion in moderately complex terrain. *Atmospheric Environment*, 79, 29-35.
39. Kukkonen, J., Klein, T., Karatzas, K., Torseth, K., Fahre Vik, A., San José, R., Balk, T. y Sofiev, M. (2009). COST ES0602: towards a European network on chemical weather forecasting and information systems. *Advances in Science and Research*, 3(1), 27-33.
40. Kwok, R. H. F., Baker, K. R., Napelenok, S. L. y Tonnesen, G. S. (2015). Photochemical grid model implementation and application of VOC, NO_x, and O₃ source apportionment. *Geoscientific Model Development*, 8(1), 99-114.
41. Langmann, B., Folch, A., Hensch, M. y Matthias, V. (2012). Volcanic ash over Europe during the eruption of Eyjafjallajökull on Iceland, April–May 2010. *Atmospheric Environment*, 48, 1-8.
42. Lim, C. Y., Stein, M., Ching, J. y Tang, R. (2010). Statistical properties of differences between low and high resolution CMAQ runs with matched initial and boundary conditions. *Environmental Modelling & Software*, 25(1), 158-169.
43. Lonati, G., Cernuschi, S. y 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.
44. MacIntosh, D. L., Stewart, J. H., Myatt, T. A., Sabato, J. E., Flowers, G. C., Brown, K. W., Hlinka, D. J. y Sullivan, D. A. (2010). Use of CALPUFF for exposure assessment in a near-field, complex terrain setting. *Atmospheric Environment*, 44(2), 262-270.
45. Mao, H., Chen, M., Hegarty, J. D., Talbot, R. W., Koermer, J. P., Thompson, A. M. y Avery, M. A. (2010). A comprehensive evaluation of seasonal simulations of ozone in the northeastern US during summers of 2001–2005. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(1), 9-27.

46. Méndez, M. R., Souto, J. A., Casares, J. J., Lucas, T. y Carmichael, G. R. (2003). The effect of the limited availability of H₂O₂ in the competitive deposition of sulphur and oxidized nitrogen. *Chemosphere*, 53(9), 1165-1178.
47. Menut, L., Mailler, S., Siour, G., Bessagnet, B., Turquety, S., Rea, G., Briant, R., Mallet, M., Sciare, J. y Formenti, P. (2015). Ozone and aerosols tropospheric concentrations variability analyzed using the ADRIMED measurements and the WRF-CHIMERE models. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 15(3), 3063-3125.
48. Miao, Y., Liu, S., Zheng, Y., Wang, S., Chen, B., Zheng, H. y Zhao, J. (2015). Numerical study of the effects of local atmospheric circulations on a pollution event over Beijing-Tianjin-Hebei, China. *Journal of Environmental Sciences*.
49. Misenis, C. y Zhang, Y. (2010). An examination of sensitivity of WRF/Chem predictions to physical parameterizations, horizontal grid spacing, and nesting options. *Atmospheric Research*, 97(3), 315-334.
50. Monteiro, A., Strunk, A., Carvalho, A., Tchepel, O., Miranda, A. I., Borrego, C., Saavedra, S., Rodríguez, A., Souto, J., Casares, J., Friese, E. y Elbern, H. (2012). Investigating a high ozone episode in a rural mountain site. *Environmental Pollution*, 162, 176-189.
51. Ogneva-Himmelberger, Y., Huang, L. y 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.
52. Pan, L., Lin, C. J., Carmichael, G. R., Streets, D. G., Tang, Y., Woo, J. H., Shetty, S. K., Chu, H. W., Ho, T. C., Friedli, H. R. y Feng, X. (2010). Study of atmospheric mercury budget in East Asia using STEM-Hg modeling system. *Science of the Total Environment*, 408(16), 3277-3291.
53. Péré, J. C., Bessagnet, B., Pont, V., Mallet, M. y Minvielle, F. (2015). Influence of the aerosol solar extinction on photochemistry during the 2010 Russian wildfires episode. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 15(5), 7057-7087.
54. Pirovano, G., Colombi, C., Balzarini, A., Riva, G. M., Gianelle, V. y Lonati, G. (2015). PM_{2.5} source apportionment in Lombardy (Italy): comparison of receptor and chemistry-transport modelling results. *Atmospheric Environment*, 106, 56-70.
55. Pisoni, E., Carnevale, C. y Volta, M. (2010). Sensitivity to spatial resolution of modeling systems designing air quality control policies. *Environmental Modelling & Software*, 25(1), 66-73.
56. Poplawski, K., Setton, E., McEwen, B., Hrebnyk, D., Graham, M. y Keller, P. (2011). Impact of cruise ship emissions in Victoria, BC, Canada. *Atmospheric Environment* 45(4), 824-833.
57. Prueksakorn, K., Kim, T. H. y 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.
58. Ranzato, L., Barausse, A., Mantovani, A., Pittarello, A., Benzo, M. y 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.
59. Renner, E. y Wolke, R. (2010). Modelling the formation and atmospheric transport of secondary inorganic aerosols with special attention to regions with high ammonia emissions. *Atmospheric Environment*, 44(15), 1904-1912.
60. 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.
61. San José, R., Pérez, J. L., Callén, M. S., López, J. M. y Mastral, A. (2013). BaP (PAH) air quality modelling exercise over Zaragoza (Spain) using an adapted version of WRF-CMAQ model. *Environmental Pollution*, 183, 151-158.
62. Seinfeld, J. H. y Pandis, S. N. (2012). *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*. John Wiley & Sons.
63. Sofiev, M., Genikhovich, E., Keronen, P. y Vesala, T. (2010). Diagnosing the surface layer parameters for dispersion models within the meteorological-to-dispersion modeling interface. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 49(2), 221-233.
64. Song, S. K., Shon, Z. H., Kim, K. H., Kim, Y. K. y 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.
65. Song, J., Lei, W., Bei, N., Zavala, M., Foy, B. D., Volkamer, R., Cardenas, B., Zheng, J., Zhang, R., Molina, L. T. (2010). Ozone response to emission changes: a modeling study during the MCMA-2006/MILAGRO Campaign. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(8), 3827-3846.
66. Souto, J. A., Pérez-Muñuzuri, V., De Castro, M., Souto, M. J., Casares, J. J. y Lucas, T. (1998). Forecasting and diagnostic analysis of plume transport around a power plant. *Journal of Applied Meteorology*, 37(10), 1068-1083.
67. Souto, J. A., Castro, M. D., Casares, J. J., Souto, M. J., Perez-Munuzuri, V. y Bermudez, J. L. (2000). Testing of an adaptive puff model for regulatory purposes around As Pontes power plant. *International Journal of Environment and Pollution*, 14(1), 198-207.

68. Souto, M. J., Souto, J. A., Perez-Munuzuri, V., Casares, J. J. y Bermudez, J. L. (2001). A comparison of operational Lagrangian particle and adaptive puff models for plume dispersion forecasting. *Atmospheric Environment*, 35(13), 2349-2360.
69. Souto, J. A., Hermida, M., Casares, J. J. y Bermudez, J. L. (2009). SAGA: a decision support system for air pollution management around a coal-fired power plant. *International Journal of Environment and Pollution*, 38(4), 444-461.
70. Sówka, I., Skrzętownicz, M., Sobczyński, P. y 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.
71. Su, L., Yuan, Z., Fung, J. C. y Lau, A. K. (2015). A comparison of HYSPLIT backward trajectories generated from two GDAS datasets. *Science of The Total Environment*, 506, 527-537.
72. Szopa, S., Foret, G., Menut, L. y Cozic, A. (2009). Impact of large scale circulation on European summer surface ozone and consequences for modelling forecast. *Atmospheric Environment*, 43(6), 1189-1195.
73. Taseko Mines Limited. (2008) Taseko Prosperity Gold-Copper Project. Appendix 4-2-D: CALPUFF and CALMET Methods and Assumptions
74. Tartakovsky, D., Broday, D. M. y 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.
75. Terrenoire, E., Bessagnet, B., Rouil, L., Tognet, F., Pirovano, G., Létinois, L., Beauchamp, M., Colette, A., Thunis, P., Amann, M. y Menut, L. (2015). High-resolution air quality simulation over Europe with the chemistry transport model CHIMERE. *Geoscientific Model Development*, 8(1), 21-42.
76. Tsuang, B. J. (2003). Quantification on the source/receptor relationship of primary pollutants and secondary aerosols by a Gaussian plume trajectory model: Part I—theory. *Atmospheric Environment*, 37(28), 3981-3991.
77. Valari, M. y Menut, L. (2010). Transferring the heterogeneity of surface emissions to variability in pollutant concentrations over urban areas through a chemistry-transport model. *Atmospheric Environment*, 44(27), 3229-3238.
78. Valdenebro, V., Sáez de Cámara, E., Gangoiti, G., Alonso, L., García, J. A., Ildardia, J. L. y González, N. (2013). Estimating hourly benzene concentrations in a highly-complex topographical environment in northern Spain using RAMS and the CALPUFF modeling system. In *EGU General Assembly Conference Abstracts*, 15, 12318.
79. Van Velzen, N. y Segers, A. J. (2010). A problem-solving environment for data assimilation in air quality modelling. *Environmental modelling & software*, 25(3), 277-288.
80. Villasenor, R., Lopez-Villegas, M. T., Eidels-Dubovoi, S., Quintanar, A. y Gallardo, J. C. (2003). A mesoscale modeling study of wind blown dust on the Mexico City Basin. *Atmospheric Environment*, 37(18), 2451-2462.
81. Vivanco, M. G., Palomino, I., Vautard, R., Bessagnet, B., Martín, F., Menut, L. y Jiménez, S. (2009). Multi-year assessment of photochemical air quality simulation over Spain. *Environmental modelling & software*, 24(1), 63-73.
82. Wang, N., Guo, H., Jiang, F., Ling, Z. H. y Wang, T. (2015). Simulation of ozone formation at different elevations in mountainous area of Hong Kong using WRF-CMAQ model. *Science of The Total Environment*, 505, 939-951.
83. Wei, P., Cheng, S., Li, J. y Su, F. (2011). Impact of boundary-layer anticyclonic weather system on regional air quality. *Atmospheric Environment*, 45(14), 2453-2463.
84. Wen, D., Lin, J. C., Millet, D. B., Stein, A. F. y Draxler, R. R. (2012). A backward-time stochastic Lagrangian air quality model. *Atmospheric Environment*, 54, 373-386.
85. White, B. R. y Kavanagh, J. F. (1991). A wind-tunnel study of atmospheric dispersion of a highly buoyant stack exhaust. *84th Annual Meeting & Exhibition of the Air & Waste Management Association*, Vancouver, June, 1991.
86. Zannetti, P. (1990). *Air pollution modeling: theories, computational methods, and available software* (p. 444). Southampton: Computational Mechanics.
87. Zeng, J., Matsunaga, T. y Mukai, H. (2010). METEX—A flexible tool for air trajectory calculation. *Environmental Modelling & Software*, 25(4), 607-608.
88. Zyrichidou, I., Koukoulis, M. E., Balis, D., Markakis, K., Poupkou, A., Katragkou, E., Kioutsioukis, I., Melas, D., Boersma, K.F. y van Roozendaal, M. (2015). Identification of surface NO_x emission sources on a regional scale using OMI NO₂. *Atmospheric Environment*, 101, 82-93.