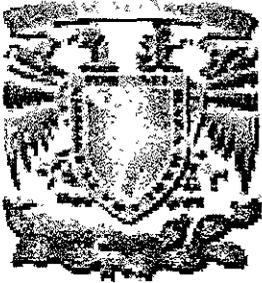


01190



18

**SIMULACION NUMERICA DE LA DISPERSION DE UNA NUBE
DE RADIONUCLIDOS EN LA ATMOSFERA**

**TESIS PARA OBTENER
EL GRADO DE DOCTORADO
EN INGENIERIA**

**PRESENTA:
SYED SHOAIB RAZA**

**DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO
FACULTAD DE INGENIERIA
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
NOVIEMBRE DE 2001**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Contenido

Prólogo	viii
Nomenclatura	xi
1 Introducción	1
1.1 Antecedentes	1
1.2 Estado del arte	3
1.2.1 Modelos eulerianos de transporte	3
1.2.2 Modelos lagrangianos de puff	4
1.2.3 Modelos eulerianos-lagrangianos de trayectorias de partículas	4
2 Modelos eulerianos para el cálculo de dosis radiológicas	7
2.1 concentración uniforme	7
2.2 concentración gaussiana	8
2.2.1 Factor de acumulación	9
Lineal	9
Berger	9
Progresión geométrica	9
2.2.2 Modelos para el cálculo de concentración	10
2.2.3 Factores de corrección de la concentración	11
Decaimiento radiológico	12
Deposición húmeda	12
Deposición seca	12
2.2.4 Factores de corrección en la altura de la liberación	13
Momento inicial	13
Flotación	14
2.3 Modelos gaussianos modificados para el cálculo de dosis radiológicas . .	15
3 Modelos lagrangianos para el cálculo de dosis radiológicas	18
3.1 Modelo lagrangiano de dispersión	18
3.2 Modelos lagrangianos para el cálculo de concentración	20
3.2.1 Modelo de conteo de partículas	20
3.2.2 Tiempo de residencia	20
3.2.3 Modelo "puff-partícula"	21

3.3	Modelo lagrangiano para el cálculo de dosis radiológicas	22
4	Modelos de campos de viento	23
4.1	Modelos semi-empíricos	23
4.2	Modelos numéricos del campo de viento	25
4.2.1	El modelo numérico $E - \epsilon$	25
4.2.2	El modelo meteorológico RAMS	27
	Parametrización de la turbulencia en RAMS	29
5	Resultados y discusión	31
5.1	Simulación numérica en una atmósfera homogénea en terreno plano	31
5.1.1	Dispersión de partículas sin el cortante vertical	31
5.1.2	Dispersión de partículas con cortante vertical	37
5.2	Simulación Numérica en topografía compleja	46
6	Conclusiones	54
6.1	Recapitulación	54
6.2	Trabajo de investigación a futuro	55
A		57
A.1	Determinación de la estabilidad atmosférica	57
A.2	Ecuación de convección-difusión en coordenadas generalizadas	63
A.3	Programa para evaluar la triple integral del modelo gaussiano	68
A.4	Relación de publicaciones generadas en esta investigación doctoral	72
	Bibliografía	73

Lista de figuras

2.1	Sistema de coordenadas en un modelo gaussiano	8
2.2	Reflejo de la pluma de superficie terrestre y de capa de inversión	11
2.3	Coefficiente de deposición en función de la intensidad de lluvia	13
2.4	Distribución finita homogénea de concentración	16
2.5	Distribución de concentración gaussiana y semigaussiana	17
3.1	Representación gráfica del modelo de puff-partículas	21
5.1	Dosis directas de γ en función de la distancia	32
5.2	Dosis directas de γ en la dirección transversal y en $x = 3,218$ m	33
5.3	Dosis directas de γ en la dirección transversal y en $x = 8,045$ m	33
5.4	Dosis directas de γ en la dirección vertical z en $x = 8,045$ m	34
5.5	Dosis directas de γ en la dirección vertical z en $x = 16,090$ m	34
5.6	Dosis directas de γ sin decaimiento nuclear	35
5.7	Dosis directas de γ con decaimiento nuclear (vida media de 34 min.	35
5.8	Dosis directas de γ con decaimiento nuclear	36
5.9	Dosis directas de γ con decaimiento nuclear (vida media de 76 min.	36
5.10	Factor de acumulación de dosis	37
5.11	Perfil vertical de la velocidad media del viento	38
5.12	Perfil vertical del ángulo del viento	38
5.13	Perfil vertical de las fluctuaciones de la velocidad del viento en la dirección horizontal	39
5.14	Perfil vertical de las fluctuaciones de la velocidad del viento en la dirección vertical	39
5.15	Perfil vertical de la vida media de los remolinos turbulentos, en la dirección horizontal	39
5.16	Perfil vertical de la vida media de los remolinos turbulentos, en la dirección vertical	39
5.17	Posición de las partículas, para una altura de liberación de 100 m	40
5.18	Posición de las partículas, para una altura de liberación de 500 m	41
5.19	Coefficiente de dispersión horizontal	41
5.20	Coefficiente de dispersión vertical	42
5.21	Coefficiente de la dispersión modificado	43
5.22	Dosis directas de γ , usando σ_y modificado	43
5.23	Concentración en función de la distancia	44
5.24	Concentración máxima integrada en tiempo	45

5.25	Mapa 2D de contornos de concentración	45
5.26	Topografía de la región bajo estudio	48
5.27	Vectores de velocidad del viento en las mallas anidadas utilizadas en el estudio	49
5.28	Vectores de velocidad para una altura $z = 77.7$ m	50
5.29	Trayectoria de la nube de radionúclidos, para el día 4 de marzo de 1997	51
5.31	Curvas de isoconcentración para el día 4 de marzo de 1997	51
5.31	Trayectoria de la nube de radionúclidos, para el día 1 de febrero de 1999	52
5.32	Curvas de isoconcentración para el día 1 de febrero de 1999	52
A.1	Determinación del parámetro p de la estabilidad atmosférica	59
A.2	Relación de la estabilidad atmosférica con la longitud de Monin-Obukhov	59
A.3	Curvas de Pasquill-Gifford (P-G) para σ_y y σ_z	60
A.4	Curvas de σ_z para rugosidad de 30 cm	62

Lista de tablas

2.1	Velocidad de depósito de radionúclidos	13
2.2	Valores del parámetro p de la estabilidad atmosférica	15
A.1	Categorías de estabilidad según Pasquill	57
A.2	Categorías de estabilidad utilizando la radiación solar	58
A.3	Categorías de estabilidad utilizando el gradiente de la temperatura . .	58
A.4	Valores de las constantes para determinar los parámetros de dispersión	60
A.5	Valores aproximados del parámetro n de rugosidad	61
A.6	Coefficientes para determinar los parámetros σ_y y σ_z	62

Prólogo

Muchos años después del accidente en el reactor de la Isla de las Tres Millas en los Estados Unidos, el accidente nuclear de Chernobyl en Ucrania cambió totalmente la perspectiva del riesgo que se corre con la operación de las plantas nucleares. Estos accidentes no sólo han dado lugar a investigaciones más intensas relacionadas con el desarrollo de sistemas de seguridad más confiables y eficaces sino también a pensar en mejorar los planes de emergencia para mitigar las consecuencias radiológicas de un accidente severo en una central nuclear. Obviamente las consecuencias de éstos no se delimitan solamente a las fronteras del país donde sucede el accidente sino que, debido al largo alcance de una nube de radionúclidos, también se tiene que incorporar a las autoridades de los países vecinos. Se dice que un accidente nuclear en algún lado es un accidente nuclear en todas partes. La experiencia de Chernobyl ha indicado que existen un desconocimiento de las consecuencias de un accidente nuclear y la percepción social insuficiente a esos accidentes.

Se ha hecho recientemente una revisión completa acerca de la protección radiológica y la preparación para las emergencias con el fin de llegar a anticipar con mejor certidumbre el impacto de una catástrofe de gran magnitud. El enfoque no solamente es para salvar las vidas humanas sino también su medio ambiente. Se ha estimado que debido al accidente de Chernobyl, se alcanzó 1760×10^{15} Bq (la mitad de la actividad total del núcleo) a una altura de orden de 1 km. Los radionúclidos volátiles como Yodo y Cesio se dispersaron casi en todo el hemisferio norte, específicamente en Europa del sur y norte, Canadá, Japón y Estados Unidos. Todavía alrededor de 5 millones de personas viven en las zona de alta contaminación (≥ 37 kBq/m², de Cs-137). Se tuvo que evacuar a más de 116,000 personas (que vivían dentro de un radio de 30 km del sitio), que recibieron altas dosis radiológicas debido a la nube de radionúclidos en la atmósfera. De los 600 trabajadores (personal de la operación, bomberos y médicos), que sufrieron de síndrome agudo de radiación, 31 personas murieron de inmediato y 140 sufrieron complicaciones graves de salud. Aunque no se ha reportado un aumento de cáncer en los adultos, se han detectados más de 1790 casos de cáncer de tiroides en niños. Cabe mencionar que durante el accidente de Chernobyl 600,000 personas (civiles y militares) trabajaron como "liquidators" los cuales recibieron un promedio de 100 mSv de la dosis radiológica por persona (el límite anual de la dosis es 50 mSv [1]).

Aunque el accidente de Chernobyl fue muy específico en su naturaleza y no se debe considerar como una referencia para futuras emergencias, sin embargo quedó muy claro, por la reacción de las autoridades públicas en varios países, que no estaban preparados de manera adecuada para enfrentar un accidente de esta magnitud y que existían deficiencias técnicas y operativas tanto en los planes de emergencias como en la capacidad de preparación y gestión para enfrentar tales desastres. Entre los factores más importantes en la gestión de una situación grave de un accidente nuclear están: la percepción pública hacia al accidente, la toma de decisión por parte de los autoridades, la anticipación de la posible trayectoria y alcance de la nube, las condiciones meteorológicas, etc. El accidente de Chernobyl fue una muestra real de los aspectos de tipo internacional de un accidente nuclear grave. Quedó muy claro que la

amplia naturaleza, la sincronización y la escala de los peligros radiológicos presentados por accidentes severos en plantas nucleares, estaban poco entendidos [2]. Desde 1986, ha habido un aumento considerable en el interés público y el de autoridades en la reevaluación de los planes de emergencias externos y se ha hecho mucho esfuerzo importante a nivel nacional e internacional. Destacan entre otros, los ejercicios multinacionales INEX [3] para elaborar una propuesta o estrategia para combatir las consecuencias de un accidente nuclear con el fin de disminuir los daños al medio ambiente y a la salud humana. En INEX-2000 participaron 54 países y 5 organismos internacionales con el objeto principal de probar los procedimientos existentes a nivel nacional e internacional para responder a las emergencias nucleares y evaluar la eficacia del mecanismo de análisis y toma de decisiones. En estos ejercicios se enfatizó la importancia de un aviso anticipado de alerta junto con un pronóstico del impacto radiológico del accidente nuclear, así como el uso de los pronósticos de las condiciones meteorológicas a nivel regional y los cálculos de posibles trayectorias de la nube [4]. Se recomendó el uso del modelado de la dispersión de radionúclidos en la pluma, para calcular la exposición radiológica potencial de la población. Los resultados del modelado se deben actualizar en cuanto se tengan los datos de mediciones en campo. Existe una tendencia clara a incorporar las nuevas técnicas para modelar la dispersión atmosférica, los cálculos de las dosis radiológicas y el impacto ambiental en los sistemas de predicción y análisis usados comúnmente [5], [6].

En este trabajo se desarrolla un modelo lagrangiano (que utiliza el método de Monte Carlo) de partículas para simular la dispersión atmosférica y el cálculo de las dosis directas de los rayos gamma de una nube de radionúclidos, con el fin de proponer su incorporación en los procedimientos regulatorios. Se demuestra que para grandes distancias (≥ 10 km) los modelos convencionales gaussianos para el cálculo de la concentración y dosis no son capaces de tomar en cuenta diversos fenómenos meteorológicos, tales como el cortante vertical del viento, la variación de la intensidad de la turbulencia con la altura y el cortante horizontal de vientos en una región de topografía compleja. En esta investigación doctoral, se muestra que los modelos lagrangianos de partículas proporcionan una mejor descripción del fenómeno de transporte y dispersión de radionúclidos en condiciones atmosféricas más generales.

En el primer capítulo, se presentan las antecedentes y una breve descripción de los modelos convencionales gaussianos de la dispersión atmosférica, el cálculo de la concentración y de las dosis radiológicas, frecuentemente usados en la industria nuclear.

En el segundo capítulo, se presentan los modelos de cálculo de dosis basados en formulaciones gaussianas. Se presenta también los modelos gaussianos modificados por otros autores.

En el tercer capítulo, se presentan los detalles del modelo de partículas lagrangianas para calcular el transporte, la dispersión, concentración y las dosis radiológicas.

En el cuarto capítulo, se presentan los modelos matemáticos eulerianos para calcular los campos de vientos. Se describe el modelo básico de mecánica de fluidos (Navier-Stokes) modificado para flujo atmosféricos. Se presenta la descripción del modelo de turbulencia $E - \epsilon$ y el modelo meteorológico comercial RAMS.

En el quinto capítulo, se presentan los resultados del modelo de dispersión de partículas radioactivas en un terreno plano y del modelo de la capa límite planetaria

homogénea. También, se presentan y discuten los resultados de la simulación de la dispersión en la zona costera con topografía compleja usando el modelo meteorológico RAMS.

En el sexto capítulo, se presentan las conclusiones y trabajo de investigación a futuro.

Agradecimiento

Deseo agradecer a mi director de tesis Dr. Rubén Ávila R. del ININ y a mi comité tutorial: Dr. Francisco Solorio, Dr. Jaime Cervantes y Dr. Federico Méndez del Departamento de Termofluidos, Dr. Arturo Palacio del Instituto de Ingeniería, Dr. Aron Jazilevich del Centro de Ciencias de la Atmósfera y Dr. Arturo Quintanar del Instituto Mexicano de Petróleo por su gran apoyo durante este trabajo.

Deseo agradecer a las autoridades del Gobierno Mexicano a través de Secretaría de Relaciones Exteriores por el apoyo económico para hacer mis estudios de doctorado y aprender español en México, y al Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (lugar en donde se desarrolló principalmente esta tesis). Igualmente deseo agradecer a las autoridades gubernamentales Pakistaníes a través de Ministerio de Educación, por otorgarme la beca para estudiar en el extranjero y especialmente al Instituto Pakistaní de Ciencias Nucleares y Tecnología, en Islamabad, por su apoyo.

Agradezco al apoyo recibido por la Universidad Nacional Autónoma de México a través de la Facultad de Ingeniería, División de Estudios de Posgrado, y el Departamento de Termofluidos. También agradezco al Departamento de Supercómputo y al Laboratorio de Visualización de la DGSCA-UNAM y el Centro de Ciencias de la Atmósfera por el uso de los recursos de cómputo y biblioteca.

Agradezco mucho el cariño y la paciencia de mi esposa Najam-us-Sehar, mis hijas Maryam y Aiman, y mi hijo Abir Mukhtar por vivir 4 años sin mí. Agradezco también el gran apoyo recibido por mi mamá, mis hermanos y hermanas.

Nomenclatura

B	factor de acumulación para la dosis radiológica []
c_p	calor específico del fluido a presión constante [J/kg·K]
c_μ	constante del modelo de turbulencia []
C_ϵ	constante del modelo de turbulencia []
$C_{1\epsilon}$	constante del modelo de turbulencia []
$C_{2\epsilon}$	constante del modelo de turbulencia []
D	coeficiente de difusividad del fluido [m ² /s]
E	energía cinética turbulenta [m ² /s ²]
f	parámetro de Coriolis [1/s]
g	aceleración de la gravedad [m/s ²]
G	viento geostrófico [m/s]
h	altura de la liberación, altura de la capa de mezcla [m]
H	altura de la capa de inversión [m]
K	factor de conversión de dosis [Gy/MeV]
K_t	difusividad turbulenta [m ² /s]
l	escala de longitud de la turbulencia [m]
L	escala de longitud de Monin-Obukhov [m]
m_p	masa de la partícula [kg]
N_p	número de partículas []
n	un parámetro de rugosidad []
p	un parámetro de estabilidad []
P	presión [mbar]
Pr	número de Prandtl []
q	flujo de calor por unidad de área [W/m ²]

\dot{Q}	taza de liberación de radioactividad [Bq/s]
$\bar{\mathbf{r}}$	coordenadas de las partículas [m]
r	razón de mezcla de agua-vapor []
Re	número de Reynolds []
Ri	número de Richardson []
t	tiempo [s]
T	temperatura del fluido [K]
T_i	vida media de los remolinos turbulentos [s]
T_a	temperatura de aire [K]
$\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$	velocidades medias del fluido [m/s]
u, v, w	velocidades instantáneas del fluido [m/s]
u', v', w'	fluctuaciones de velocidad del fluido [m/s]
u_g, v_g	velocidades geostróficas [m/s]
u_{rms}	desviación estándar de las fluctuaciones de velocidad [m/s]
$\overline{u_i^2}$	varianza de las fluctuaciones de velocidad [m ² /s ²]
$\overline{u_i' u_j'}$	esfuerzos de Reynolds [m ² /s ²]
$\overline{u_i' \theta'}$	flujos turbulentos de calor [m K/s]
u_*	velocidad de fricción [m/s]
v_d	velocidad terminal de las partículas [m/s]
\mathbf{x}	vector de la posición inicial de las partículas [m]
x, y, z	coordenadas cartesianas [m]
x_p, y_p, z_p	posición de las partículas [m]
z_o	parámetro de rugosidad [m]

Símbolos griegos

α	difusividad molecular [m ² /s]
β	coeficiente de expansión térmica [1/K]
γ	energía de los rayos gamma [MeV]
Γ	gradiente adiabático de la temperatura [K/m]
δ	espesor de la capa límite [m]
δt	incremento de tiempo lagrangiano [s]
Δt	incremento de tiempo euleriano [s]
ΔV	volumen de la celda numérica [m ³]

ϵ	disipación de energía cinética turbulenta [m^2/s^3]
θ	temperatura potencial [K]
θ'	fluctuación de temperatura [K]
$\overline{\theta'^2}$	varianza de las fluctuaciones de temperatura [K^2]
$\bar{\theta}$	valor medio de la temperatura potencial del fluido [K]
κ	constante de von Kármán []
λ	constante de decaimiento de radionúclido [s^{-1}]
μ_t	viscosidad dinámica turbulenta [$\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}$]
ν_t	viscosidad cinemática turbulenta [m^2/s]
ρ	densidad del fluido [kg/m^3]
σ_i	desviación estándar de las fluctuaciones de velocidad [m/s]
σ_y	coeficiente de dispersión en la dirección y [m]
σ_z	coeficiente de dispersión en la dirección z [m]
τ	variable temporal [s]
ϕ	variable general de la ecuación de velocidad []
π	función de Exner []
ψ	variable general de la ecuación de temperatura []
χ	concentración de radionúclidos []
χ_0	concentración de radionúclidos a una distancia x_0 [Bq/m^3]
ω	velocidad angular de la tierra [radian/s]

Capítulo 1

Introducción

1.1 Antecedentes

Cuando una nube de contaminantes se libera a la atmósfera, ésta es transportada por el viento medio y simultáneamente se dispersa en un dominio tridimensional, debido a las fluctuaciones de velocidad (componente aleatorio). Consecuentemente la pluma se extiende tanto en la dirección horizontal como vertical. El tamaño de la nube se expresa, en términos de los coeficientes de dispersión, σ_y , para la dirección horizontal (transversal) y σ_z , para la dirección vertical. Las formulaciones empíricas de estos coeficientes en función de la estabilidad atmosférica y la distancia del punto de liberación, han sido propuestos y publicadas por varios autores. Las formulaciones de σ_y y σ_z que se usan con mayor frecuencia son las de Pasquill-Gifford (P-G) [7], [8], las cuales se basan en los datos obtenidos durante el experimento de Prairie-Grass [9] y se presentaron originalmente en forma gráfica. Los σ_y y σ_z de P-G son independientes de la altura de liberación y únicamente son aplicables en condiciones rurales y para fuentes de liberación cercanas a la superficie. Briggs [10] combinó las σ 's evaluadas durante los experimentos del Valle de Tennessee (TVA) [11], de Brookhaven [12] y de St. Louis [13], y usando las fórmulas teóricas para los límites asintóticos de la difusión, publicó relaciones analíticas de estos coeficientes, válidos hasta 10 km. Las σ 's de Briggs fueron desarrolladas para dos casos específicos de la rugosidad, regiones rurales (con rugosidad de 3 cm) y zonas urbanas (con rugosidad de 1 m). Sin embargo estas σ 's también son independientes de la altura de liberación. En la literatura, también se han publicado valores de σ 's basados en los experimentos de Julich y Karlsruhe que pueden ser utilizados en situaciones que presenten diferentes alturas de liberación (50, 100 y 180 m), en regiones con rugosidad de 1 m [14].

El uso de P-G σ 's para calcular la dispersión atmosférica, ha sido un punto de controversia y debate continuo debido al papel importante que desempeñan en decisiones reguladoras. Según Hanna (1984), las σ 's de P-G se han usados muchas veces, de manera errónea, ya que se han aplicado fuera de su rango de validez experimental (específicamente, tiempo de muestreo y distancia), conduciendo a una comparación no satisfactoria con respecto a las observaciones de campo. Las σ 's de P-G únicamente son confiables hasta distancias de orden de 1 km. Sin embargo, la confiabilidad se reduce significativamente después de 500 m, a partir del punto de liberación, cuando

las condiciones de la estabilidad atmosféricas son extremas (altamente inestable y altamente estable) [15].

El uso de estas σ 's requiere conocer la estabilidad de la atmósfera la cual se ha sido dividido, desde el punto de vista meteorológico, en 6 categorías que varían desde la condición altamente inestable (categoría A) hasta altamente estable (categoría F). En condiciones reales la atmósfera puede estar entre dos categorías cualquiera, por lo que en caso de evaluar la dispersión considerando las categorías asignadas a las condiciones de estabilidad (entre A y F) conduce a errores en los resultados. Se ha propuesto en la literatura, una variedad de esquemas para determinar la estabilidad de la atmósfera, cada uno de estos se basa, ya sea en el nivel de la insolación solar, en el porcentaje de cobertura del cielo por las nubes (condiciones nocturnas), en la velocidad del viento, en el gradiente vertical de la temperatura o en las fluctuaciones del ángulo del viento en las direcciones horizontal y vertical [16], [17]. Los detalles de estos esquemas se presentan en Apéndice A.1. Determinar la estabilidad atmosférica a partir de estos esquemas puede conducir a establecer una categoría equivocada de la estabilidad [18]. En este sentido el nomograma de Smith [19] ha demostrado mejor, ya que determina la estabilidad atmosférica, como una función continua de la radiación solar, de la velocidad del viento y de la cobertura del cielo [20], sin embargo presenta serias limitaciones ya que los parámetros que requiere son difíciles de medir. Por lo tanto es recomendable elegir cuidadosamente el esquema que conduzca a la determinación más adecuada de la estabilidad atmosférica. Debido a las limitaciones de los esquemas mencionados Pasquill ha recomendado desde 1974 [16] y es la tendencia actual determinar la estabilidad de la atmósfera en base a datos experimentales, específicos del sitio, de las fluctuaciones del ángulo del viento [21]. Estos coeficientes de dispersión (σ 's) son incluidos en los modelos simples (gaussianos) que han servidos para fines reguladoras y de cálculo del impacto ambiental de las liberaciones de contaminantes a la atmósfera. El modelo gaussiano (GPM) consiste de una sola ecuación a partir de la cual se obtiene la distribución de concentración media de la nube. El GPM es una generalización de la solución analítica de la ecuación de Fick para una difusión homogénea [22], [23], y está formulado en términos de los coeficientes de dispersión σ 's, velocidad media del viento a la altura de liberación y el término fuente.

El GPM se ha utilizado extensamente para estimar las consecuencias radiológicas y el impacto ambiental de los accidentes nucleares, bajo recomendación de las agencias reguladoras internacionales [14], [24]. Los resultados del modelo se consideran confiables dentro de un factor de 2-4, para las distancias cortas a partir del punto de liberación. En este factor se incluyen los efectos acumulados de la incertidumbre en los coeficientes σ 's y velocidad del viento a la altura de liberación (la cual se calcula generalmente usando una ley de potencia). A pesar de tanto margen de error (200 – 400%), el GPM se ha sido utilizado extensamente en aplicaciones industriales [25], [23], debido a que es fácil de usar y conceptualmente simple.

Tomando en cuenta los conceptos teóricos de la capa límite planetaria puede decirse que la formulación del modelo GPM es incorrecta ya que: (i) no considera la variación espacial y temporal de la velocidad media del viento (la cual depende de las condiciones meteorológicas del sitio) y (ii) el coeficiente de dispersión horizontal σ_y no toma en cuenta el constante vertical del viento. En el modelo GPM, se utiliza σ_y (de Pasquill)

el cual crece linealmente con la distancia hasta 100 km del punto de liberación. Esto es incorrecto ya que en la atmósfera real se ha observado que el cortante vertical del viento motiva que σ_y crezca como una cierta potencia del tiempo de recorrido. Cuando no existe cortante del viento σ_y es proporcional a t para pequeñas distancias mientras que para grandes distancias (de orden de kilómetros) σ_y es proporcional a $t^{1/2}$ [15]. Es conveniente mencionar que el valor medio de la concentración que se obtiene con el GPM, corresponde al intervalo de tiempo que se utilizó para obtener el valor promedio de la σ 's, por lo que utilizar el modelo para obtener una concentración promediada en un intervalo de tiempo diferente (para el cual se obtuvieron las σ 's) conduce a serios errores. Si el intervalo de promediado es pequeño, el rango de variación de la dirección del viento será limitado, dando por resultado una extensión limitada de la nube. Por otra parte, si se aumenta el tiempo de muestreo, resultará en una dispersión mayor y en consecuencia una concentración baja [15]. Pasquill utilizó un tiempo de promediado de 3 min., para el cálculo de las σ_y y de 10 min., para las σ_z [21], por su parte Briggs utilizó un tiempo de promediado de 20 min. [10]. Es necesario señalar que el modelo gaussiano original (derivado del trabajo de Sutton) nunca fue pensado para ser usado en condiciones complejas tales como zonas de montañas y costas, velocidades pequeñas del viento (calmas), condiciones de inversión, ambiente urbano, transporte de largo alcance (meso-escala), etc. Su uso en tales condiciones conduce a una comparación muy mala con las mediciones [26].

1.2 Estado del arte

En la simulación numérica del cálculo de la dispersión y concentración de radionúclidos en la atmósfera, básicamente existen tres enfoques:

- Modelos eulerianos de transporte
- Modelos lagrangianos de dispersión (modelos de puff)
- Modelos eulerianos lagrangianos de trayectorias de partículas

1.2.1 Modelos eulerianos de transporte

Estos modelos son utilizados para calcular, a partir de resolver una ecuación de advección-difusión, los cambios temporales y espaciales de la concentración media. El cambio de la concentración en un punto del dominio en estudio se rige por el desplazamiento de la nube de radionúclidos debido al viento medio de gran escala y por la difusión turbulenta que surge de las fluctuaciones de la velocidad. Los modelos gaussianos forman parte del enfoque euleriano ya que surgen de la solución de la ecuación de Fick en donde se utiliza un coeficiente de difusión molecular. En los modelos gaussianos el coeficiente de difusión se aproxima a partir de la relación del parámetro de dispersión turbulenta K_t y del tiempo transcurrido después de la liberación ($K_t = \sigma/2t$).

Aunque en la literatura han aparecido varias modificaciones del modelo gaussiano básico original, útiles para situaciones meteorológicas complejas (ver las guías reguladoras [27], [14], [24]), estas siguen siendo muy limitadas en su rango de aplicación (entre 5 y 10 km). Adicionalmente debido a la necesidad de utilizar en estos modelos

los coeficientes empíricos σ 's, que como se comentó anteriormente, se definen con gran grado de incertidumbre y conducen a errores significativos, se recomienda el uso de modelos sofisticados [28], como los que se describen a continuación.

1.2.2 Modelos lagrangianos de puff

Estos modelos pueden tomar en cuenta la variación temporal y espacial del viento por lo que ofrecen mejores resultados que el modelo gaussiano, tanto para distancias cortas como para distancias grandes (mayores que 10 km). Estos modelos pueden tomar en cuenta las mediciones de campo en varios puntos del dominio y simulan la trayectoria de una sola partícula lagrangiana, que evoluciona en el tiempo, de acuerdo a las características turbulentas de la atmósfera. La posición del centro de masa de esta partícula se calcula usando la velocidad media del viento y el tiempo transcurrido después de la liberación. La distribución de la concentración alrededor del centro de masa del puff imaginario, se calcula utilizando los coeficientes empíricos σ 's [28].

1.2.3 Modelos eulerianos-lagrangianos de trayectorias de partículas

Estos modelos permiten simular la dispersión atmosférica, a partir de calcular la trayectoria de una gran cantidad de partículas individuales (sólidas o de gas), por lo tanto, son computacionalmente caros. Para simular un escenario de liberación y transporte que dure varios días, se requiere seguir la trayectoria de cientos de miles de partículas, lo que permite obtener una distribución suave de los campos de concentración y dosis radiológica en tierra y aire. Esto fija altas demandas en recursos de cómputo. Las partículas cuando se liberan a la atmósfera son transportadas por los vientos medio y sus trayectorias aleatorias se modelan a partir de generar números aleatorios que representan las fluctuaciones turbulentas de la velocidad [29]. La base teórica para la mayoría de los modelos de partículas fue desarrollada por Thomson (1987). Un nomograma muy completa de los principios teóricos de modelos lagrangianos estocásticos ha sido publicada por Rodean [30]. Otros trabajos interesantes son de Wilson y Sawford (1996), Zannetti [31] y Uliasz [32].

Los modelos de partículas son capaces de simular de manera adecuada el transporte de largo alcance, la difusión, la deposición seca o húmeda y el decaimiento nuclear de los radionúclidos liberados a partir de fuentes puntuales, fuentes en forma de una línea, área o volumen. Los modelos de partículas, se pueden utilizar en modo hacia adelante para simular la dispersión con el punto de liberación conocido. Estos modelos también pueden utilizarse en modo hacia atrás con el propósito de determinar el área de influencia sobre el receptor de diversas fuentes emisoras localizadas en su vecindad. Una de las ventajas más importante de estos modelos es que no tienen la difusión numérica artificial que presentan los modelos eulerianos. Los modelos de partículas son independientes de la malla computacional utilizada para calcular los campos de vientos, y proveen una resolución que puede ser muy pequeña, la cual depende del número de partículas liberadas y de la resolución de los datos meteorológicos. Además de incluir la precipitación húmeda y seca, y la estabilidad atmosférica, los modelos de

partículas tienen un acoplamiento directo entre los vientos, el terreno y la variación de la rugosidad de la superficie ya que toman en cuenta la topografía de la región. Este enfoque lagrangiano es muy útil para conocer la trayectoria exacta de la nube de radionúclidos en la atmósfera y es el único que permite a conocer los detalles de la trayectoria de las partículas (velocidad instantánea, posición, intensidad de turbulencia, etc.) desde el punto de liberación hasta el receptor.

Se ha reportado que estos modelos proporcionan mejores resultados que los modelos eulerianos-gaussianos y que los modelos lagrangianos de puff, para el cálculo del transporte y dispersión tanto de gran escala como de pequeña escala [33]. El cálculo de la trayectoria de la partículas requiere de una buena aproximación de los campos de vientos, los cuales no se obtienen con el modelo lagrangiano en sí, sino a partir de la componente euleriana del modelo o de los datos medidos e interpolados a la malla computacional. En consecuencia el uso de los modelos eulerianos-lagrangianos de escala intermedia (meso-escala), como el que se presenta en este trabajo, requiere de un acoplamiento en un solo sentido (one way coupling) con un modelo de pronóstico de gran escala.

Los programas de cómputo euleriano-lagrangiano actualmente en uso (HYPACT [34], ASHFALL [35], FLEXPART [36]) tienen un acoplamiento indirecto entre sus dos componente ya que calculan el transporte y dispersión de partículas en dos pasos. En el primer paso se evalúan los campos de viento para el dominio computacional (tanto en espacio como en tiempo) y se almacenan con una resolución temporal del orden de una hora (dependiendo de la duración de la simulación y del espacio de almacenamiento de la computadora). En el segundo paso se calculan las trayectorias de las partículas utilizando los campos meteorológicos almacenados con una resolución temporal muy baja. Es conveniente mencionar que un acoplamiento directo entre el modelo euleriano y el modelo lagrangiano (cálculo de trayectorias de partículas simultáneo al cálculo de vientos), permite tener una mejor sincronización entre los dos modelos, ya que las partículas reciben la información de las variaciones de pequeña escala.

En este trabajo se desarrolla un modelo de escala intermedia, estocástico, lagrangiano y tridimensional, para determinar la dispersión atmosférica de radionúclidos en regiones con topografía compleja. El modelo calcula las trayectorias de partículas que representan los radionúclidos que son liberados en caso de una situación de accidente en una planta nuclear de potencia. El modelo es capaz de simular una liberación continua o intermitente de un nube de gas y/o partículas en una atmósfera estratificada. El trabajo se divide en dos partes. En la primera parte la dispersión de una nube de radionúclidos se calcula utilizando los campos medios y las características turbulentas del viento, los cuales se obtienen al resolver las ecuaciones de la capa límite planetaria acopladas con un modelo de turbulencia de dos ecuaciones, E (energía cinética turbulenta) y ϵ (disipación de la energía cinética) [37], [38]. Los perfiles de velocidad media, fluctuaciones de velocidad y la vida media de los remolinos turbulentos, obtenidos con este modelo numérico, fueron comparados con datos experimentales y con modelos empíricos publicados en la literatura. Las dosis radiológicas que recibirá la población expuesta a la nube de radionúclidos, calculadas utilizando el modelo de partículas, fueron comparadas con la solución de los modelos eulerianos/gaussianos presentada por Raza y Avila (2000), y por otros autores [39].

En la segunda parte de este trabajo, se simula una liberación hipotética de radionúclidos en la región de costa y montaña del sur-este de México. Los campos de viento fueron obtenidos usando el programa comercial meteorológico RAMS (Regional Atmospheric Modeling System) desarrollado por 'Colorado State University' y 'Mission Research Corporation'. El programa RAMS es un modelo de predicción que es capaz de simular las circulaciones atmosféricas de escala intermedia, regional y hemisférica. Sus aplicaciones más frecuentes están enfocadas a la predicción de las condiciones meteorológicas (entre 200 y 2000 km), a la generación de modelos de calidad de aire y al desarrollo de investigación básica de los procesos meteorológicos (formación de nubes, dispersión de ceniza volcánica, transformación fotoquímica, etc). La base de datos que se requiere para dar inicio a los cálculos del modelo RAMS, se encuentran disponibles con acceso libre, en el sitio del NCEP (National Center for Environmental Prediction) de la US-NOAA (United States-National Oceanic and Atmospheric Administration). Los datos globales del NCEP tienen una resolución espacial de 2.5° (≈ 300 km) de latitud y longitud, y 17 niveles en la dirección vertical, desde la superficie hasta una altura equivalente a 10 mbar (≈ 30 km). La resolución temporal de los datos de NCEP es de 6 horas.

Para regiones de Europa también se encuentran disponibles (no gratuitos) los datos recopilados por la ECMWF, los cuales tienen una resolución espacial de 0.5° en la horizontal y 31 niveles en la dirección vertical. La resolución temporal de estos datos es de 3 horas.

En este trabajo se utilizó el programa RAMS acoplado ('on-line') con un modelo de dispersión de partículas y un modelo de cálculo de dosis radiológica para predecir la trayectoria de una nube de radionúclidos en la región de costa y montaña del sur-este de México.

En el siguiente capítulo, se presentan los modelos matemáticos que se utilizaron para calcular la concentración de partículas radioactivas y la dosis radiológica que recibiría la población en caso de una liberación accidental hipotética de radionúclidos a la atmósfera. También se presenta una breve descripción de los modelos de partículas basados en el método de Cadenas de Markov-Monte Carlo [29].

En el tercer capítulo, se presentan los modelos que se han utilizados para calcular el campo medio de vientos y las características turbulentas de la atmósfera.

Capítulo 2

Modelos eulerianos para el cálculo de dosis radiológicas

En caso de una liberación accidental de radionúclidos en una planta nuclear de potencia, es importante conocer las dosis radiológicas que recibirá la población que se encuentra a lo largo de la trayectoria de la nube. Las dosis radiológicas se clasifican en dosis internas y dosis externas. Las dosis internas son las que se reciben a través de las vías respiratorias y para su cálculo se requiere conocer solamente la concentración local de radionúclidos en el aire. Las dosis externas (directas) son las que recibe la población debido a los rayos gamma que se emiten desde toda la extensión de la nube, para su cálculo se requiere conocer la distribución espacial de radionúclidos. Los modelos actualmente usados en la industria nuclear incorporan formulaciones simples para obtener una respuesta rápida y resultados conservadores (límite superior) de la dosis. Los paquetes comerciales como RASCAL [40] e IRDAM [41], están basados en modelos de concentración uniforme. Los modelos como el de Lahti (1985) y el de Nie et al.(1982) utilizan modelos de concentración gaussiana. Estos modelos y el modelo propuesto por el autor de esta tesis se presentan a continuación.

2.1 concentración uniforme

Para calcular la tasa de dosis radiológicas externas (directas) de rayos γ recibida por la población, es necesario conocer las dimensiones de la nube y la distribución espacial de la concentración, sin embargo, la información de estos parámetros es difícil de obtener. Por lo tanto se han desarrollado modelos simples que proporcionan de manera inmediata resultados conservadores (el límite superior). En estos modelos simples se supone que la nube se extiende infinitamente en las 3 direcciones, con una distribución uniforme de concentración. Esto da lugar a una expresión muy simple para calcular la dosis en un medio semi-infinito en donde se supone que existe equilibrio entre la energía liberada por los rayos γ y la energía absorbida por el aire [42].

$$\dot{D}_\gamma(x_0) = K \frac{E_\gamma \chi_0}{2\rho} \quad (2.1)$$

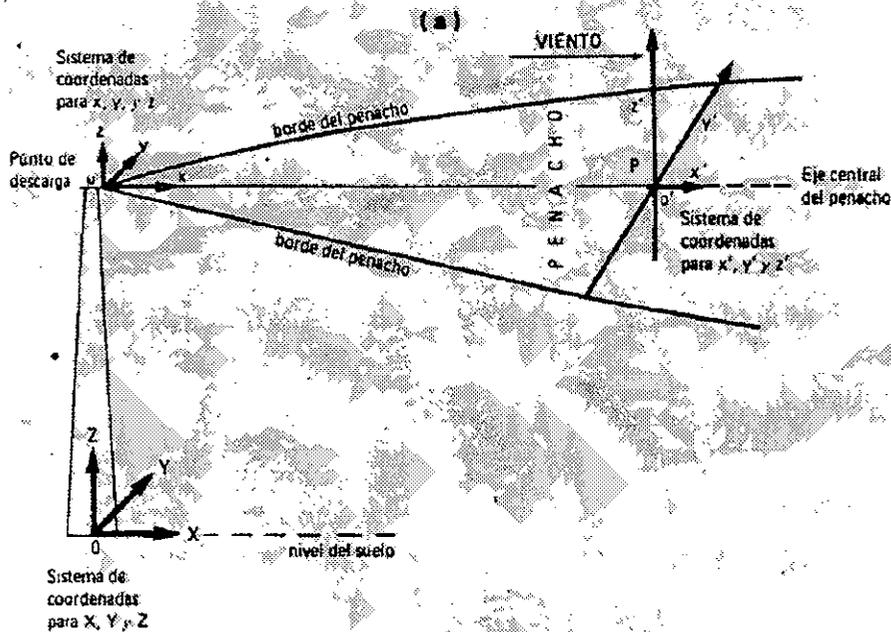


Fig. 2.1: Sistema de coordenadas en un modelo gaussiano

donde K es el factor de conversión de la dosis, E_γ es la energía de los rayos γ liberada por desintegración de radionúclidos, χ_0 es la concentración a una distancia x_0 del punto de liberación en la dirección de viento y ρ es la densidad local del aire. Esta ecuación puede ser utilizada únicamente para calcular la dosis a lo largo del eje central de la pluma (ver figura 2.1).

Para las liberaciones al nivel de superficie sobre un terreno plano, la concentración a lo largo del eje central de la pluma, a una distancia x_0 del punto del liberación se calcula mediante [43]:

$$\chi_0 = \frac{\dot{Q}_0}{\pi \bar{u} \sigma_y \sigma_z} \quad (2.2)$$

donde \dot{Q}_0 es la tasa de la liberación de radionúclidos, \bar{u} es la velocidad media del viento, σ_y y σ_z son los coeficientes de la dispersión en las direcciones transversal (horizontal) y vertical, respectivamente.

2.2 concentración gaussiana

Una aproximación más apropiada es suponer una distribución gaussiana de la concentración, la cual se presenta en caso de una atmósfera homogénea, no necesariamente isotrópica. En este caso para calcular la dosis directa en el punto x_0, y_0, z_0 , se requiere

resolver una integral triple en las tres direcciones, es decir

$$\dot{D}_\gamma(x_0, y_0, z_0) = \frac{K E_\gamma \mu_a}{\rho} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{B(E_\gamma, \mu r) \exp(-\mu r) \chi(x', y', z') dx' dy' dz'}{4\pi r^2} \quad (2.3)$$

donde μ_a y μ son el coeficiente de absorción de la energía de los rayos γ y el coeficiente de atenuación lineal en el aire, respectivamente, $r^2 = (x_0 - x')^2 + (y_0 - y')^2 + (z_0 - z')^2$, $B(E_\gamma, \mu r)$ es el factor de la acumulación de rayos γ en el aire (ver sección 2.2.1) y χ es la concentración de radionúclidos.

2.2.1 Factor de acumulación

El factor de acumulación (llamada "build-up") toma en cuenta el aumento del flujo de fotones (rayos γ) por unidad de superficie (debido a la dispersión en el aire), que llegan a un punto dado del espacio. En la literatura se han propuesto varias formulaciones empíricas para calcular el factor de acumulación el cual es utilizado en el cálculo de dosis. A continuación se presentan las formulaciones lineal, de Berger y de Progresión Geométrica (GP).

Lineal

La formulación lineal del factor de acumulación es el más simple y ha sido usada extensamente [23]. Para una fuente puntual e isotrópica, este factor se calcula por la expresión siguiente [42]:

$$B(E_\gamma, \mu r) \approx 1 + \frac{\mu - \mu_a}{\mu_a} \mu r \quad (2.4)$$

donde μ y μ_a son coeficientes que dependen de la energía de los rayos γ y del medio atenuante (aire atmosférico).

Berger

Otra formulación también extensamente usada es el factor de acumulación de Berger [42]:

$$B(E_\gamma, \mu r) \approx 1 + a \mu r e^{+b \mu r} \quad (2.5)$$

donde los parámetros a y b dependen de la energía de los rayos γ y del medio atenuante (aire atmosférico).

Progresión geométrica

Una formulación extraordinariamente exacta para determinar el factor de acumulación es la llamada Progresión Geométrica (GP) [44]:

$$B(E_\gamma, \mu r) \approx 1 + \frac{(b-1)(k^{\mu r})}{k-1}, k \neq 1 \quad (2.6)$$

$$\approx 1 + (b-1)\mu r, \quad k = 1$$

donde

$$k(\mu r) = c(\mu r)^a + d \frac{\tanh(\mu r/\epsilon - 2) - \tanh(-2)}{1 - \tanh(-2)},$$

los parámetros a, b, c, d y ϵ dependen de la energía de los rayos γ y del medio atenuante. El valor de estos parámetros para una energía de 0.8 MeV (valor representativo de una mezcla de gases nobles con vida media de 3-4 horas [45]) y aire como medio atenuante es: -0.103, 2.207, 1.532, 0.0425 y 14.12, respectivamente [44].

2.2.2 Modelos para el cálculo de concentración

En los modelos gaussianos de cálculo de dosis, la concentración de radionúclidos en un punto con coordenadas (x', y', z') se calcula usando la siguiente ecuación [43]:

$$\chi(x', y', z') = \frac{\dot{Q}_0}{2\pi\bar{u}\sigma_y\sigma_z} \exp\left(-\frac{y'^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z' - h)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z' + h)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (2.7)$$

donde \dot{Q}_0 y h es la tasa y altura de la liberación, respectivamente. La ecuación (2.7) se puede usar para calcular la dosis en cualquier punto, no necesariamente a lo largo del eje central de la nube.

Si la liberación es a nivel de superficie, la ecuación anterior se simplifica:

$$\chi(x', y', z') = \frac{Q_0}{\pi\bar{u}\sigma_y\sigma_z} \exp\left(-\frac{y'^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z')^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (2.8)$$

Si la concentración se mide sobre superficie, la ecuación anterior se simplifica aún más:

$$\chi(x', y', 0) = \frac{Q_0}{\pi\bar{u}\sigma_y\sigma_z} \exp\left(-\frac{y'^2}{2\sigma_y^2}\right) \quad (2.9)$$

Si se calcula la concentración a lo largo del eje central de la pluma ($y' = 0.0$) la ecuación anterior se simplifica a la ecuación (2.2) Si se supone que la relación σ_y/σ_z no varía rápidamente, la concentración sobre la superficie a lo largo del eje central de la pluma, para una fuente de liberación a una altura h esta dada aproximadamente por:

$$\chi_{max}(x', 0, 0) = \frac{2Q_0}{\pi e \bar{u} h^2} \frac{\sigma_z}{\sigma_y} \quad (2.10)$$

donde e es la base de los logaritmos naturales = 2.718. La distancia en la dirección del viento a la que ocurre χ_{max} es cuando $\sigma_z = h/\sqrt{2}$.

Si la distribución de la concentración es uniforme en la dirección vertical hasta la altura de la capa de inversión H (condiciones de fumigación), y se estima integrando la ecuación (2.7) con respecto a z desde 0 a ∞ , con lo que se obtiene:

$$\chi(x', y') = \frac{Q_0}{\sqrt{2\pi}\sigma_y\bar{u}H} \exp\left[-\frac{y'^2}{2\sigma_y^2}\right] \quad (2.11)$$

La ecuación anterior es válida para distancias en donde: $\sigma_z \geq 1.6H$.

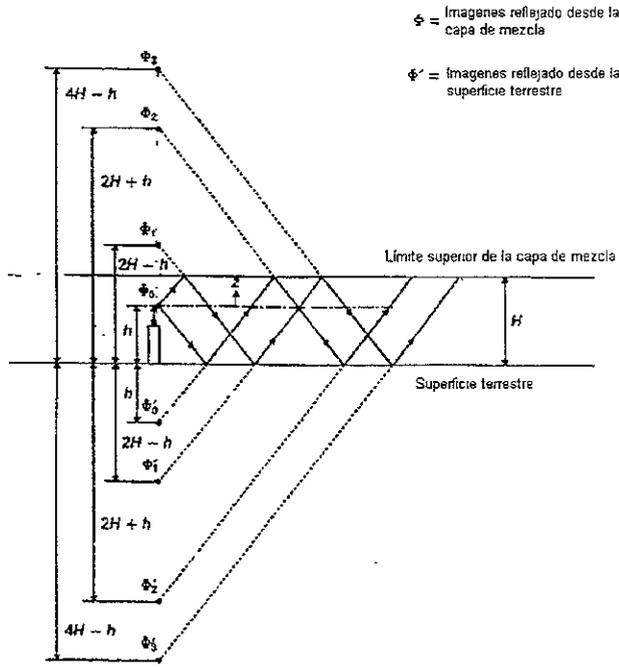


Fig. 2.2: Reflejo de la pluma de la superficie sólida y de la capa de inversión

Para distancias menores se debe tomar en cuenta también el reflejo de la nube tanto de la capa de inversión como de la superficie terrestre. Lo anterior resulta en una sumatoria de los términos reflejos de las fuentes imaginarias (ver figura 2.2) [46]:

$$\chi(x', y') = \frac{Q_0}{\sqrt{2\pi\sigma_y \bar{u}}} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] \Theta(z) \quad (2.12)$$

donde $\Theta(z)$ esta dada por:

$$\begin{aligned} \Theta(z) = & \exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+2h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \\ & + \sum_{k=1}^N \exp\left[-\frac{(2kH-2h-z)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \sum_{k=1}^N \exp\left[-\frac{(2kH-z)^2}{2\sigma_z^2}\right] \\ & + \sum_{k=1}^N \exp\left[-\frac{(z+2kH)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \sum_{k=1}^N \exp\left[-\frac{(z+2h+2kH)^2}{2\sigma_z^2}\right] \end{aligned}$$

2.2.3 Factores de corrección de la concentración

En esta sección se presentan formulaciones empíricas que son utilizadas para calcular los factores de corrección de la concentración debido al proceso nuclear de decaimiento

radiológico y a los procesos físicos de deposición húmeda y seca. La concentración calculada por la ecuación (2.7), se multiplica por el factor de corrección f , el cual es una función del tiempo y de la distancia.

Decaimiento radiológico

El proceso de decaimiento de los radioisótopos y la formación de los núclidos estables descendientes (no radioactivos) modifica la concentración de radionúclidos en la nube. El factor de corrección f , que multiplica a la concentración χ (ver ecuación 2.7) se expresa como función de la constante de decaimiento del radionúclido y del tiempo transcurrido. Para un solo radioisótopo con una constante de decaimiento λ , el factor de corrección esta dado por [25], [45]:

$$f(x/\bar{u}) = \exp(-\lambda t) = \exp(-\lambda x/\bar{u})$$

donde, \bar{u} es la velocidad media del viento, t es el tiempo transcurrido después de la liberación y x es la distancia recorrida.

Deposición húmeda

La deposición de los radionúclidos sobre la superficie terrestre, debido a la precipitación pluvial (lluvia) que puede presentarse a lo largo de la trayectoria de la nube, se toma en cuenta al utilizar el siguiente factor de corrección:

$$f(x) = \exp\left(-\frac{\Lambda}{\bar{u}}x\right)$$

donde Λ es un coeficiente de arrastre producido por la lluvia, el cual es función de la intensidad de la precipitación, del tamaño de las partículas liberadas y de la solubilidad del effluente en el agua (ver figura 2.3).

Deposición seca

Cuando la nube de radionúclidos se impacta con la superficie, las partículas se depositan debido a la adsorción. En el caso de partículas pesadas con una densidad mayor que la del aire, la fuerza de la gravedad juega un papel importante por lo que se incorpora en la definición de la velocidad de depósito de los radionúclidos (ya sean gases volátiles o partículas pesadas). Esta velocidad se define como:

$$V_g = (\text{Tasa de deposición}) / (\text{Concentración en aire}) \equiv [\text{g}/\text{m}^2\text{s}] / [\text{g}/\text{m}^3]$$

Velocidades de depósito (obtenidas experimentalmente) para varios tipos de radioisótopos como gases nobles, yodos etc., se presentan en la tabla 2.1:

El factor de corrección de la concentración debido al proceso de deposición seca se calcula a partir de la siguiente relación:

$$f(x) = \exp\left(-\frac{V_g h}{\bar{u} x}\right)$$

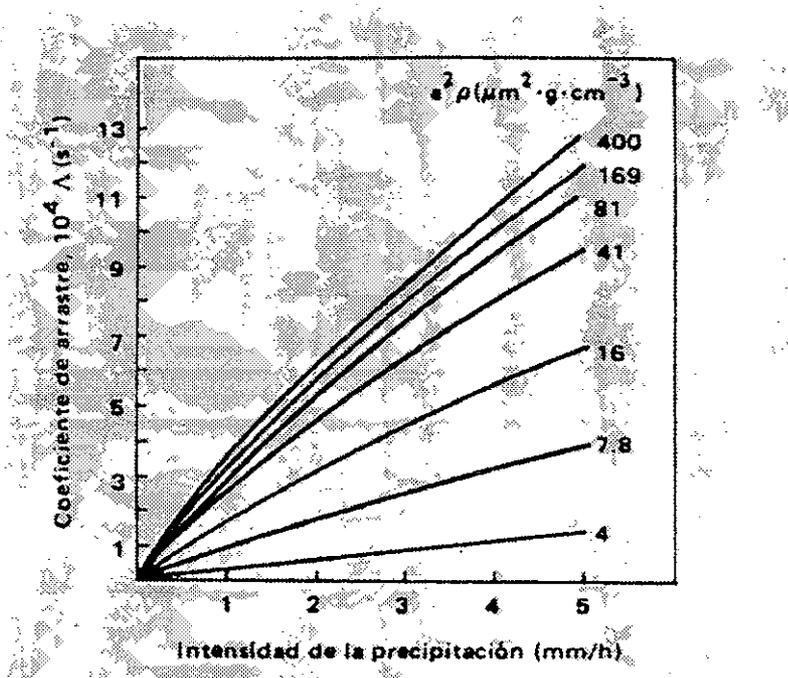


Fig. 2.3: Coeficiente de deposición en función de la intensidad de lluvia

Tabla 2.1: Velocidad de depósito de radionúclidos

Radionúclidos	Velocidad [m/s]
Gases nobles	0.15
Yodos	0.15
Volátiles	0.20
Material Particulado	0.25

donde, V_g es la velocidad de deposición y h es la altura de la liberación.

2.2.4 Factores de corrección en la altura de la liberación

Para tomar en cuenta el efecto de flotación y el momento inicial de los efluentes, en la literatura, se ha propuesto modificar la altura de la liberación por un factor Δh el cual se suma a h (ver ecuación 2.7). Es importante mencionar que un aumento en esta altura por un factor de 2 bajaría la concentración superficial por un factor de 4.

Momento inicial

Cuando los efluentes se liberan con un momento inicial, la altura de liberación se debe modificar sumando un factor de corrección (Δh), en la altura de la chimenea. Esta corrección se hace siempre y cuando la altura de la chimenea sea mayor de $2\frac{1}{2}$ veces la altura de las estructuras vecinas. Para una atmósfera neutra o inestable el factor de

corrección se calcula a partir de la siguiente ecuación:

$$\Delta h(x) = 1.44d_i \left(\frac{w_0}{\bar{u}} \right)^{2/3} \left(\frac{x}{d_i} \right)^{1/3} - C$$

donde w_0 es la velocidad vertical de salida de los efluentes (m s^{-1}), x es la distancia en la dirección del viento, \bar{u} es la velocidad media del viento a la altura de la liberación, d_i es el diámetro interior de la chimenea (m), $C = 3(1.5 - w_0/\bar{u})d_e$, es un factor positivo ($w_0 < 1.5\bar{u}$) que toma en cuenta el descenso de la nube debido a la estela turbulenta producida por la chimenea, y d_e es el diámetro externo de la chimenea. También se recomienda calcular Δh con la relación: $\Delta h = 3w_0/ud_i$ y usar el mínimo de los dos valores.

En condiciones estables Δh se calcula a partir de las siguientes ecuaciones y se usa el valor mínimo:

$$\Delta h = 4 \frac{F_m^{1/4}}{S}$$

y

$$\Delta h = 1.5S^{-1/6} \frac{F_m^{1/3}}{u}$$

donde, $F_m = w_0^2 (d_i/2)^2$ y S es igual a 8.7×10^{-4} para estabilidad E y 1.75×10^{-3} para estabilidad F.

Otras formulaciones simples para liberaciones cercanas a la superficie son [47], [48]:

$$\Delta h = 3.75w_0r_0/\bar{u}$$

y

$$\Delta h = 3.0w_0r_0/\bar{u}$$

donde, r_0 es el radio interior de la chimenea.

Flotación

Para las liberaciones con una fuerza de flotación (fuerza ascensional aerostática), la corrección en la altura de la liberación (Δh) puede ser evaluada a partir de cualquiera de las siguientes ecuaciones [47], [48]:

$$\Delta h = 5.0 \frac{F_0}{\bar{u}_{(10m)}^3}$$

$$\Delta h = A \frac{F_0}{u_{(10m)}^3}$$

donde,

$$F_0 = w_0 r_0^2 \frac{g}{T_{po}} (T_{po} - T_{co})$$

g es la aceleración de la gravedad, T_{po} y T_{co} son las temperaturas iniciales de la pluma y del medio ambiente, respectivamente, a la altura de la chimenea. El coeficiente empírico

Tabla 2.2: Valores del parámetro p de la estabilidad atmosférica.

Clase de estabilidad	A	B	C	D	E	F
Zonas urbanas	0.15	0.15	0.20	0.25	0.40	0.60
Zonas rurales	0.07	0.07	0.10	0.15	0.35	0.55

A , puede adquirir un valor que varía entre 300 a 400, basado en las observaciones [49].

Para calcular el incremento en la elevación de la pluma en condiciones estables se utiliza la siguiente formulación la cual toma en cuenta al mismo tiempo tanto el momento inicial como la flotación de los efluentes [15]:

$$\Delta h(x) = 1.6F_0^{1/3}\bar{u}^{-1}x^{2/3}$$

El valor máximo del coeficiente de corrección Δh , en una atmósfera estable se calcula a partir de [47]:

$$\Delta h = 2.6 \left(\frac{F_0}{\bar{u}s} \right)^{1/3}$$

donde, s es un parámetro de la estabilidad dado por: $s = (g/T_e)(\delta T_e/\delta z + 0.01^\circ K/m)$, $\delta T_e/\delta z$ es el gradiente vertical de la temperatura ambiental, y \bar{u} es la velocidad media $\bar{u}(z) = \bar{u}_{10m}(z/10)^p$ [50]. El parámetro p depende de la estabilidad atmosférica (ver tabla 2.2).

Para una atmósfera con condiciones de calma ($\bar{u} = 0.0$), el valor máximo del coeficiente de corrección Δh se calcula como [47]:

$$\Delta h = 5.3F_0^{1/4}s^{3/8} - r_0$$

Para condiciones neutras y convectivas el valor máximo del coeficiente de corrección Δh se calcula a partir de las siguientes formas:

$$\Delta h = 1.54 \left(\frac{F_0}{\bar{u}u_*^2} \right)^{2/3} (z_s)^{1/3} \text{(atmósfera neutra)}$$

y

$$\Delta h = 3 \left(\frac{F_0}{\bar{u}} \right)^{3/5} (g/T\overline{w'\theta'_0})^{-2/5} \text{(atmósfera convectiva)}$$

donde, u_* es la velocidad de fricción, T es la temperatura del efluente, y $\overline{w'\theta'_0}$ es el flujo de calor turbulento en la dirección vertical.

2.3 Modelos gaussianos modificados para el cálculo de dosis radiológicas

Debido a que no es posible obtener una solución analítica de la ecuación (2.3) con una distribución gaussiana de concentración, es necesario usar técnicas numéricas. Muchos autores han propuesto modificar la ecuación (2.3) proponiendo ciertas aproximaciones

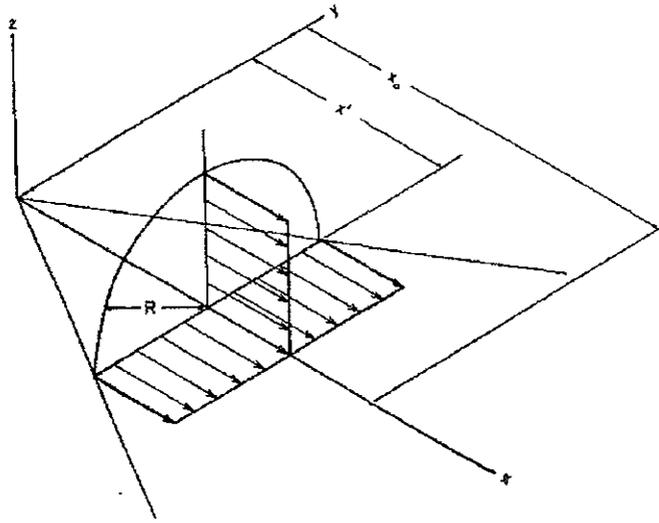


Fig. 2.4: Distribución finita homogénea de concentración en el modelo de Nie et al. [51]

para calcular la dosis debido a una nube de radionúclidos, algunas de las cuales, se presentan a continuación.

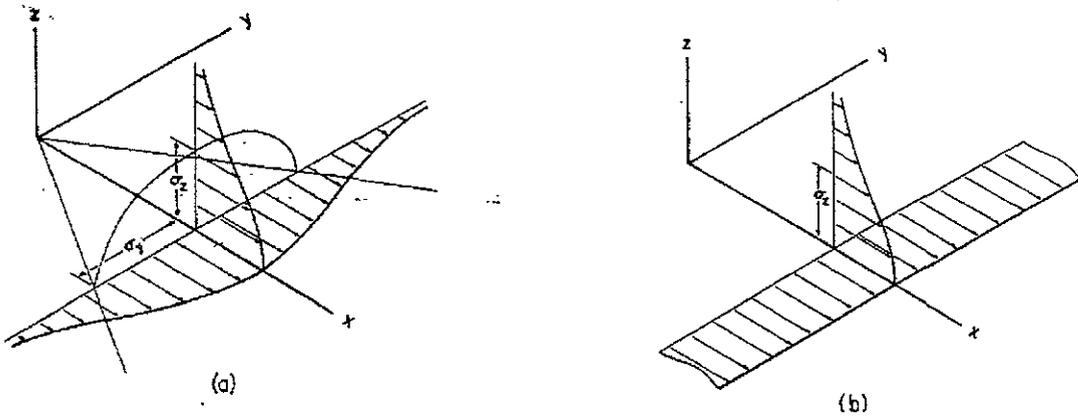
Nie et al.(1985), aproximó la distribución gaussiana de la concentración en las direcciones horizontal ("cross-wind") y vertical con una concentración equivalente que se considera uniforme en una sección transversal semicircular de un cono cuyo eje se orienta en la dirección del viento (ver Fig. 2.4). El radio de estos planos semicirculares el cual aumenta con la distancia a la fuente de liberación, se calcula usando $R(x') = (\sigma_y(x')\sigma_z(x'))^{1/2}$. Las dosis a lo largo del eje del cono se calcula resolviendo la integral 1-D [51]:

$$\begin{aligned} \dot{D}_\gamma(x_0) = & \frac{KE_\gamma\mu_a}{2} \int_0^\infty \frac{Q_{x'}}{\pi\bar{u}R^2} E_1[\mu(x_0 - x')] - E_1[\mu\sqrt{(x_0 - x')^2 + R^2}] \\ & + k [\exp(-\mu(x_0 - x')) - \exp(-\mu\sqrt{(x_0 - x')^2 + R^2})] dx' \end{aligned} \quad (2.13)$$

Los resultados obtenidos al integrar la ecuación (2.13) son 30% más alto que la solución de la ecuación (2.3), con distribución gaussiana de la concentración, para la estabilidad atmosférica D y 50% para la estabilidad F. Además el error en el modelo de Nie et al.(1985) es sensible a la relación de los coeficientes de dispersión σ_y/σ_z [51].

Overcamp y Fjeld (1987) simplificaron la integral triple de la ecuación (1.3) por una integral unidimensional, la cual permite calcular la dosis a lo largo del eje central de la pluma, manteniendo la distribución gaussiana de la concentración en la dirección vertical pero una concentración uniforme en la dirección horizontal perpendicular al viento medio ("cross-wind"), es decir (ver Fig. 2.5):

$$\dot{D}_\gamma(x_0) = \frac{KE_\gamma\mu_a}{\sqrt{2\pi\rho u\sigma_y}} [I_1 + kI_2] \quad (2.14)$$



Figs. 2.5a-2.5b: Distribución gaussiana y semigaussiana de concentración, en el modelo de Overcamp [39]

donde,

$$I_1(\mu\sigma_z) = \frac{1}{2\sqrt{2}\sigma_z} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\exp(-\mu r)}{r^2} \left(\exp\left[-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right) LdLdz$$

y

$$I_2(\mu\sigma_z) = \frac{1}{2\sqrt{2}\sigma_z} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\exp(-\mu r)}{r} \left(\exp\left[-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right) LdLdz$$

Los detalles de esta formulación se pueden consultar en los artículos citados. Se ha reportado que esta formulación, para distancias cercanas (del orden de 1 km), predice dosis 50% mayores que los obtenidos con con el modelo gaussiano (1.3).

El problema con el método de Nie et al.(1985) y el de Overcamp y Fjeld (1987) es que solamente proporcionan resultados de la dosis en el centro de masa de la nube y en consecuencia, no son válidos para calcular dosis en puntos localizados a cierta distancia perpendicular al eje central de la nube.

Capítulo 3

Modelos lagrangianos para el cálculo de dosis radiológicas

En este capítulo se presentan los modelos lagrangianos desarrollados en este trabajo doctoral para calcular la dispersión, concentración y dosis radiológica de una nube de radionúclidos que es liberada a la atmósfera, bajo condiciones de accidente en una planta nuclear.

Como se ha mencionado en la introducción, los modelos lagrangianos tienen marcadas ventajas sobre los modelos eulerianos, entre las que se cuentan: (i) mejor resolución espacial y temporal, (ii) no requieren malla computacional, (iii) permiten conocer los detalles de la trayectoria de la nube y (iv) están libre de difusión numérica.

Además, estos modelos permiten asociar a cada partícula individual los procesos físicos (intercambio de momento, precipitación húmeda y seca), químicos (transformación fotoquímica) y nucleares (decaimiento radioactivo), los cuales son parametrizados de manera global en los modelos eulerianos. Llevando a cabo el promedio de ensamble sobre todas las partículas que constituyen la nube, es posible determinar los valores promedio de las variables de interés tales como: velocidad y posición de la nube, concentración y dosis radiológicas.

3.1 Modelo lagrangiano de dispersión

En esta sección se presenta el modelo de dispersión de partículas de Monte Carlo, el cual se utiliza para simular la dispersión turbulenta de un gas no-flotante en la atmósfera. El modelo requiere de un campo conocido de la velocidad instantánea del viento, la cual está compuesta por una componente media y otra turbulenta/fluctuante según la descomposición de Reynolds [52]. Las fluctuaciones en la velocidad del viento pueden evaluarse a partir de los valores rms $(\overline{(u'(z))^2})^{1/2}$, $(\overline{(v'(z))^2})^{1/2}$, $(\overline{(w'(z))^2})^{1/2}$, que son una medida de la turbulencia/estabilidad atmosférica. Los valores rms pueden ser medidos directamente o calculados ya sea a partir del uso de modelos de turbulencia o a partir de formulaciones que requieren de la velocidad media del viento $(\bar{u}(z))$ y de las desviaciones estándar $(\sigma_\theta$ y σ_ϕ) de las fluctuaciones de la dirección del viento alrededor

de su dirección media, es decir [15]:

$$\sigma_v(z) = (\overline{v'(z)^2})^{1/2} \approx \bar{u}(z)\sigma_\theta(z) \quad (3.1)$$

$$\sigma_w(z) = (\overline{w'(z)^2})^{1/2} \approx \bar{u}(z)\sigma_\phi(z) \quad (3.2)$$

donde, σ_θ y σ_ϕ son los ángulos (radianes) en la dirección horizontal y vertical respectivamente. Se han publicados curvas empíricas de la variación de estos parámetros como función de la altura y de la estabilidad atmosférica en la literatura [23], [53]. Para una atmósfera neutra, σ_θ y σ_ϕ tienen valores casi constantes del orden de 8 y 6 grados respectivamente, en toda la capa límite planetaria [53].

En un modelo de Monte Carlo las fluctuaciones de la velocidad (remolinos turbulentos) son generadas como números aleatorios con una distribución normal con media cero y una desviación estándar igual al valor rms. Estas fluctuaciones de velocidad se agregan al viento medio para obtener la velocidad instantánea del viento. En el modelo de Monte Carlo, se supone que esta velocidad instantánea prevalece durante un intervalo de tiempo conocido como el tiempo de vida del remolino. La vida del remolino aumenta con la altura y tiene un valor máximo de alrededor de 100s para una atmósfera neutra [54], [55].

Cada partícula lagrangiana es transportada por la velocidad instantánea del viento durante el tiempo de duración del remolino que acompaña a cada una. Cuando la vida del remolino se termina, se genera uno nuevo (independiente del anterior) y se continua el cálculo de la trayectoria de la partícula hasta que el tiempo de la simulación termina. Los detalles de los modelos lagrangiano (tanto Monte Carlo como Cadenas de Markov) han sido publicados por Avila (1997) y Wang y Stock(1992). La trayectoria de cada partícula lagrangiana se calcula integrando las ecuaciones de momento en las 3 direcciones:

$$\frac{dx}{dt} = u(z, t) = \bar{u}(z) + u'(z, t) \quad (3.3)$$

$$\frac{dy}{dt} = v(z, t) = \bar{v}(z) + v'(z, t) \quad (3.4)$$

$$\frac{dz}{dt} = w(z, t) = \bar{w}(z) + w'(z, t) \quad (3.5)$$

donde, \bar{u}_i, u'_i ($i = 1, 2, 3$) son las velocidades medias del viento y las fluctuaciones de la velocidad respectivamente, las cuales son función de la altura z y del tiempo t .

Si la velocidad media en la dirección vertical (medida o calculada) es cero, es necesario incorporar una modificación para la dirección vertical, la cual toma en cuenta el efecto del gradiente vertical de la turbulencia.

$$\frac{dz}{dt} = w(z, t) = w'(z, t) + \exp(-t/T_t)T_t \frac{\partial}{\partial z}(\sigma_w^2) \quad (3.6)$$

El segundo término del lado derecho de la ecuación (3.6) se agrega para corregir la acumulación de las partículas en las regiones de baja turbulencia [56], [57], [58]. Según lo mencionado por Legg y Raupach (1982) un gradiente vertical de las fluctuaciones w'^2 en un sistema horizontalmente homogéneo está en equilibrio con el gradiente vertical

de la presión hidrostática. Esto conduce a una fuerza adicional, la cual se incluye como un término extra en la ecuación de movimiento vertical de un elemento de fluido [59].

Aunque, el intervalo de tiempo, δt , en las ecuaciones (3.3-3.6) puede ser del orden del tiempo de vida del remolino, se usan intervalos relativamente pequeños para asegurar que una partícula, en su trayectoria, no salte varias celdas eulerianas del dominio discretizado, en el cual se conoce la velocidad media. La trayectoria de cada partícula lagrangiana se calcula de manera independiente durante el incremento de tiempo euleriano utilizado para calcular el campo medio del viento. Esto permite seguir de manera simultánea (on-line) la trayectoria de las partículas que constituyen la nube [37].

En un proceso de Monte Carlo las fluctuaciones que se generan como números aleatorios independientes (sin memoria) a diferencia de los modelos de cadenas de Markov en donde los remolinos recuerdan la fluctuación de velocidad que se generó anteriormente, a través de una función de correlación [60], [61].

3.2 Modelos lagrangianos para el cálculo de concentración

Con los modelos lagrangianos de dispersión atmosférica, la concentración de la nube de radionúclidos se puede calcular por varias técnicas, las cuales se presentan enseguida:

3.2.1 Modelo de conteo de partículas

En esta técnica, la concentración de radionúclidos se calcula en el dominio de interés contando el número de partículas lagrangianas en volúmenes arbitrarios de control ("box"). La concentración es igual al número de partículas (multiplicadas por la masa representada por cada partícula) dividido entre el volumen del paralelepípedo [62], este valor se asocia a las coordenadas del centro del volumen de control. Los resultados obtenidos con este método dependen del tamaño de la celda elegida para contar las partículas. Para tener resultados estadísticamente razonables este método requiere un número suficientemente grande de partículas en el dominio, lo cual, algunas veces está limitado por la memoria de la computadora. Si el volumen de control tiene dimensiones Δx , Δy y Δz y contiene N_p partículas, la concentración $\chi(x, y, z)$ se calcula como:

$$\chi(x, y, z) = \frac{N_p}{\Delta x \Delta y \Delta z} \quad (3.7)$$

3.2.2 Tiempo de residencia

En esta técnica se supone que la concentración en un volumen arbitrario de control es proporcional al tiempo de residencia de las partículas en el volumen durante el curso de su trayectoria [63] [61]. Esta técnica, aunque, proporciona resultados estadísticamente mejores que la anterior, es muy costosa en términos de tiempo de cálculo y los resultados, también, son dependientes de las dimensiones de la celda. Si el número de la trayectoria simulado es N y t_j es la duración de residencia de la $j^{ésima}$ trayectoria en

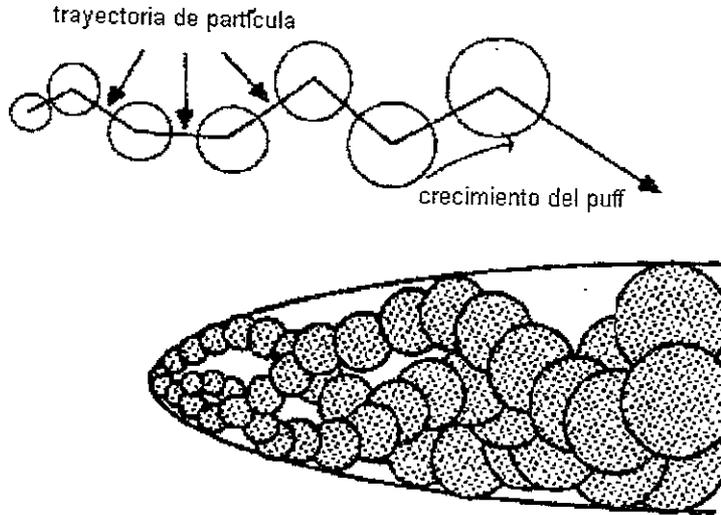


Fig. 3.1: Trayectoria de un puff y puffs múltiples en el modelo puff-partículas [64]

el volumen, la concentración es:

$$\chi(x, y, z) = \frac{\dot{Q}}{N\Delta x\Delta y\Delta z} \sum_{j=1}^N t_j \quad (3.8)$$

donde \dot{Q} es la tasa de liberación y $\Delta x, \Delta y$ y Δz son las dimensiones del volumen.

3.2.3 Modelo "puff-partícula"

En esta técnica se supone que cada partícula lagrangiana representa el centro de la masa de un "puff" que tiene una distribución arbitraria de la concentración (ver figura 3.1).

Esta distribución generalmente se supone gaussiana teniendo una desviación estándar para la dirección horizontal σ_y y σ_z para la dirección vertical [65], [66]. Según Hurley (1994) estas σ 's pueden ser cualquiera de las reportadas en la literatura. La concentración puntual debido a una partícula lagrangiana se calcula usando la ecuación siguiente, en donde se lleva a cabo, una sumatoria sobre todas las partículas que constituyen la nube [56].

$$\chi(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^{1.5}} \sum_{p=1}^N \frac{1}{\sigma_{x_p}\sigma_{y_p}\sigma_{z_p}} \exp\left(-0.5\frac{(x_p - x)^2}{\sigma_{x_p}^2}\right) \exp\left(-0.5\frac{(y_p - y)^2}{\sigma_{y_p}^2}\right) \left[\exp\left(-0.5\frac{(z_p - z)^2}{\sigma_{z_p}^2}\right) + \exp\left(-0.5\frac{(z_p + z)^2}{\sigma_{z_p}^2}\right) \right] \quad (3.9)$$

donde, el subíndice p se refiere a cada partícula lagrangiana.

Esta esquema rinde estadísticamente mejores resultados que el modelo de conteo y

consume mucho menos tiempo que la técnica del tiempo de residencia. Además, los resultados son independientes de las dimensiones arbitraria del volumen de control. En este trabajo, se utilizó esta técnica para cálculo de la concentración de radionúclidos.

3.3 Modelo lagrangiano para el cálculo de dosis radiológicas

En caso de fuentes radiológicas, las partículas representan una cierta radioactividad que va decayendo con el tiempo, con una rapidez que depende del tipo de radionúclido. La concentración de estas partículas se usa para calcular las dosis internas recibidas por la población por inhalación. Aunque las mismas concentraciones se pueden usar para cálculos de las dosis externas y directas, ello requiere conocer la distribución de la concentración en el espacio, lo cual en la mayoría de las veces se aproxima como uniforme [42] o gaussiana [45]. No obstante lo anterior, en este trabajo se propone el uso de las trayectorias de las partículas lagrangianas (y su posición en el espacio) con objeto de calcular las dosis radiológicas, lo cual según el autor de este trabajo, no se ha publicado anteriormente. En este caso no se tiene que aproximar la distribución de la concentración en el espacio, la cual se toma en cuenta de manera automática en el modelo. Las tasas de las dosis de rayos γ , debido a la nube, se calculan agregando la contribución de cada partícula lagrangiana en el dominio computacional. Las dosis directas se calculan usando la aproximación de la fuente isotrópica la cual permite determinar la intensidad de rayos γ por unidad de superficie, que llegan a un punto determinado [67]. Para una fuente monoenergética de emisión de fotones con una energía E_γ , la tasa de la dosis \dot{D}_p , a un receptor en un punto (x_0, y_0, z_0) , debido a una fuente puntual localizada en (x', y', z') se calcula mediante:

$$\dot{D}_p(x_0, y_0, z_0) = \frac{K \mu_a E_\gamma}{\rho} \sum_{p=1}^N \frac{B(E_\gamma, \mu r) \exp(-\mu r) q(x', y', z')}{4\pi r^2} \quad (3.10)$$

donde q es la radioactividad de la partícula en el punto (x', y', z') , K es un factor de conversión de unidades de energía a unidades de dosis radiológica y la sumatoria se hace sobre todas las partículas lagrangianas que constituyen la nube.

Esta técnica obviamente es más costosa en términos de tiempo de cálculo y recursos computacionales (memoria y espacio), porque se requiere de muchas trayectorias para obtener resultados confiables estadísticamente.

Capítulo 4

Modelos de campos de viento

4.1 Modelos semi-empíricos

En esta sección se presentan varias relaciones propuestas para calcular los campos del viento basados en las observaciones y en función de la estabilidad atmosférica. La capa límite planetaria de una altura h , se divide en una capa de superficie de altura $0.1h$ y una capa exterior. En una atmósfera convectiva la capa exterior se puede subdividir en una capa de mezcla la cual se extiende hasta la base de la capa de inversión y una capa estable transitoria arriba.

En la capa de superficie (donde los flujos de momentos son aproximadamente constante) el viento medio y la temperatura potencial se representan, basados en la teoría de semejanza de Monin-Obukhov [68]:

$$\frac{\bar{u}}{u_*} = \frac{1}{k} \left(\ln \frac{z}{z_0} - \phi_m\left(\frac{z}{L}\right) \right) \quad (4.1)$$

$$\frac{\bar{\theta} - \bar{\theta}_0}{\theta_*} = \frac{\alpha}{k} \left(\ln \frac{z}{z_0} - \psi_h\left(\frac{z}{L}\right) \right) \quad (4.2)$$

donde, z_0 es la altura de rugosidad, $\bar{\theta}_0$ es la temperatura potencial media en la superficie, u_* es la velocidad de fricción, $\theta_* = -q_0/u_*$ es la temperatura de conducción en la superficie, q_0 es el flujo de calor cinemático en la superficie, $L = -u_*^3/\kappa\beta q_0$ es la longitud de Monin-Obukhov, κ es la constante de von Kármán, β es el coeficiente de expansión volumétrica, α es difusividad molecular, y ϕ y ψ son las funciones de semejanza que dependen de la estabilidad: $\phi_m(z/L) = (kz/u_*)\partial\bar{u}/\partial z$, y $\psi_h(z/L) = (kz/\theta_*)\partial\bar{\theta}/\partial z$.

En la capa exterior los perfiles de viento y temperatura dependen mucho de la estabilidad. Las condiciones estables se caracterizan por tener una gran variación de la dirección del viento con la altura. Sin embargo el viento medio \bar{V} y la temperatura potencial media se pueden considerar que varían linealmente con la altura, en el interior de toda la capa límite planetaria, es decir:

$$\bar{V} = \bar{V}_s + \frac{z - h_s}{h - h_s} (\bar{V}_h - \bar{V}_s) \quad (4.3)$$

$$\bar{\theta} = \bar{\theta}_s + \frac{z - h_s}{h - h_s} (\bar{\theta}_h - \bar{\theta}_s) \quad (4.4)$$

donde, los subíndices s y h se refieren al tope de la capa de superficie y de la capa límite planetaria, respectivamente.

En el caso de una atmósfera con condiciones convectivas, en la capa de mezcla con altura h , los campos medios de velocidad y temperatura potencial se pueden considerar uniformes e independientes de la altura y se calculan a partir de las siguientes relaciones:

$$\frac{\bar{u}_m}{u_*} = \frac{1}{k} \left(\ln \frac{h}{z_0} - \frac{1}{2} \ln \frac{h}{L} - 2.3 \right) \quad (4.5)$$

$$\bar{\theta}_m(t) = \theta_m(t_0) + \gamma_\theta [h(t) - h(t_0)] \quad (4.6)$$

donde, $\gamma_\theta \equiv \partial \bar{\theta} / \partial z$.

Las fluctuaciones de la velocidad para las direcciones horizontal y vertical se puede calcular mediante:

$$(\overline{u'^2})^{1/2} = \sigma_u(z) = \frac{2.2u_*(z)}{(1 + 15z/h)^{1/3}} \quad (4.7)$$

$$(\overline{w'^2})^{1/2} = (\overline{v'^2})^{1/2} = \sigma_w(z) = 1.3u_*(z) \quad (4.8)$$

donde, la velocidad de fricción (u_*) se calcula usando la ecuación siguiente:

$$\frac{u_*^2(z)}{u_{*0}^2} = 1 - \frac{\hat{z}}{k} \left[b_1 \left(\frac{\hat{z}}{2} - a_1 \right) + b_2 \left(\frac{\hat{z}^3}{4} - a_1^3 \right) \right] \quad (4.9)$$

y, $a_1 = fh/u_{*0}$, $b_1 = 3/a_1(4k/3a_1 - 5)$, $b_2 = -2/3a_1^2(b_1 + 2k/a_1^2)$, $\hat{z} = fz/u_{*0}$, f es el parámetro de Coriolis, h es la altura de la capa límite planetaria, u_{*0} es la velocidad de la fricción en la superficie (que tiene un valor de 0.65 m s^{-1} según datos de experimento de Leipzig) y z es la distancia vertical desde la superficie.

La vida media de los remolinos turbulentos en la dirección transversal (a lo largo del eje y) y vertical (a lo largo del eje z) se calculan usando las relaciones siguientes [54], [69]:

$$Tl_u = \frac{0.4}{40f} [1 - e^{-400\hat{z}}] \quad (4.10)$$

$$Tl_w = \frac{0.4z}{u_{*0}} \left(\frac{1}{(1 + 40\hat{z})} \right) \quad (4.11)$$

Hanna (1984) presenta la siguiente relación empírica para calcular la vida media de los remolinos turbulentos, la cual se basa en observaciones:

$$T_l = \frac{0.5z/\sigma_w}{1 + 15fz/u_*} \quad (4.12)$$

donde, f es el parámetro de Coriolis (del orden de 10^{-5} para latitudes medias) y u_* adquiere valores de 0.35 y 0.65 m/s para terrenos suave y rugoso, respectivamente.

4.2 Modelos numéricos del campo de viento

4.2.1 El modelo numérico $E - \epsilon$

En esta sección se presenta el modelo matemático-numérico $E - \epsilon$ el cual es muy usado para simular los procesos turbulentos en la atmósfera [37], [38]. Este modelo consiste en resolver además de las ecuaciones de Navier-Stokes, la ecuación de conservación de masa (la ecuación de continuidad) y la ecuación de la energía térmica o de la temperatura, una ecuación para la energía cinética turbulenta y otra para la disipación turbulenta.

Las ecuaciones del modelo $E - \epsilon$ simplificadas para una atmósfera homogénea, en un terreno plano son:

Ecuación de la energía cinética turbulenta:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho \nu_t}{\sigma_E} \frac{\partial E}{\partial z} \right) + \rho \nu_t \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 \right] - \rho \epsilon - \rho \beta g \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \quad (4.13)$$

Ecuación de disipación de la energía cinética turbulenta:

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho \nu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{E} \rho \nu_t \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 \right] - \rho C_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{E} \quad (4.14)$$

Las ecuaciones anteriores se resuelven junto con las siguientes:

Ecuación de Continuidad:

$$\frac{\partial (\rho \bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho \bar{v})}{\partial y} + \frac{\partial (\rho \bar{w})}{\partial z} = 0 \quad (4.15)$$

Ecuación de Cantidad de Movimiento en dirección longitudinal, x :

$$\frac{\partial (\rho \bar{u})}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial (\rho \overline{u'w'})}{\partial z} - 2\rho \bar{v}\omega \sin(\phi) \quad (4.16)$$

Ecuación de Cantidad de Movimiento en dirección transversal, y:

$$\frac{\partial(\rho\bar{v})}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\partial(\rho\overline{v'w'})}{\partial z} + 2\rho\bar{u}\omega \sin(\phi) \quad (4.17)$$

Ecuación de energía térmica en términos de temperatura potencial:

$$\frac{\partial(\rho\bar{\theta})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}(-\rho\overline{w'\theta'}) \quad (4.18)$$

Al suponer un equilibrio entre el gradiente de la presión y la fuerza de Coriolis, las ecuaciones de momento fuera de la capa límite planetaria se convierten en:

$$-\frac{\partial p}{\partial x} = \rho v_g f \quad (4.19)$$

y

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \rho u_g f \quad (4.20)$$

donde, $f = 2\omega \sin(\phi)$ es el parámetro de Coriolis, y u_g, v_g son las velocidades del viento geostrófico en las direcciones x y y , respectivamente.

Al sustituir las ecuaciones (4.17, 4.18) en las ecuaciones de momento, se obtiene lo siguiente:

Las ecuaciones del momento se modifican:

$$\frac{\partial\rho\bar{u}}{\partial t} = -\rho f(\bar{v} - v_g) - \frac{\partial(\rho\overline{u'w'})}{\partial z} \quad (4.21)$$

$$\frac{\partial\rho\bar{v}}{\partial t} = \rho f(\bar{u} - u_g) - \frac{\partial(\rho\overline{v'w'})}{\partial z} \quad (4.22)$$

donde,

$$\overline{u'w'} = -\nu_t \frac{\partial\bar{u}}{\partial z}$$

$$\overline{v'w'} = -\nu_t \frac{\partial\bar{v}}{\partial z}$$

$$\overline{w'\theta'} = -\frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial\bar{\theta}}{\partial z}$$

$$\nu_t = c_\mu \frac{E^2}{\epsilon}$$

donde, Pr_t es el número de Prandtl cuyo valor es igual a 0.86, ν_t es la viscosidad

turbulenta y c_μ es un constante empírico cuyo valor es de orden de 0.3 [37]. Para usar este tipo de modelos se tiene que especificar las condiciones iniciales y de frontera.

El modelo proporciona los componentes medias de la velocidad del viento (u y v) en la capa límite planetaria, donde u es la velocidad en la dirección del viento geostrófico y v es la velocidad en la dirección transversal. A partir de las dos componentes de la velocidad media, se calculan el viento medio resultante y el ángulo con respecto al viento geostrófico.

Las fluctuaciones de la velocidad (valores rms) se calculan suponiendo una turbulencia isotrópica $\overline{u'^2} = \overline{v'^2} = \overline{w'^2}$, cuyo valor se calcula a partir de la siguiente relación:

$$u\text{-rms} = (\overline{u'^2})^{1/2} = \left(\frac{2}{3}E\right)^{1/2} \quad (4.23)$$

La vida media de los remolinos turbulentos se calculan usando la energía cinética turbulenta y su tasa de disipación [70]:

$$T_i = 0.3 \frac{E}{\epsilon} \quad (4.24)$$

4.2.2 El modelo meteorológico RAMS

En esta sección se presenta una breve descripción del modelo meteorológico modificado para este trabajo desde el código comercial RAMS (Regional Atmospheric Modeling System) [71]. El modelo RAMS modificado calcula los campos del viento en la línea ('on-line') con el modelo de trayectorias de partículas (ver capítulo 3), para simular la trayectoria de una nube de radionúclidos en la atmósfera.

RAMS se desarrolló en el departamento de Ciencias de la Atmósfera de la Universidad del Estado de Colorado en Estados Unidos. El código es capaz de calcular los campos de vientos con mallas anidadas de manera interactiva y la versión actual (4.3.0) se puede resolver hasta 8 mallas. RAMS tiene la opción no-hidrostática, la cual permite resolver, en principio, la circulación atmosférica de microescala (0-1 km), además de que el cálculo de velocidad vertical mejora en terreno complejo. RAMS usa coordenadas σ ("terrain following") en la dirección vertical y el esquema numérica de marcha hacia adelante para resolver las ecuaciones de fluidos. El desarrollo de varios términos de las ecuaciones de fluidos, tales como: advección, difusión, etc., en las coordenadas generalizadas se presenta en Apéndice A.2. RAMS incluye varias parametrizaciones de los procesos físicos de la atmósfera, entre otras: el esquema de turbulencia de Deardoff de nivel 2.5 (en donde se supone que la viscosidad turbulenta es una función de la energía cinética turbulenta), el esquema de primer orden de Blackadar para condiciones estables, procesos de formulación de cumulus (nubes), la microfísica de gotas de lluvia (evaporación y condensación), dispersión y absorción de la radiación solar en aire y nubes, predicción de la rugosidad para superficie del mar y un modelo de suelo y de vegetación para calcular la humedad y temperatura de la superficie.

El modelo se inicializa con los datos de escala global de NCEP (National Center for Environment Prediction) con una resolución espacial de 2.5° , los cuales se interpolan a la malla numérica computacional usada en RAMS. Además, se puede mejorar el campo inicial usando datos de radiosondeo y de estaciones meteorológicas de la superficie

(cuando disponibles). Los datos de NCEP incluyen los componentes horizontales (zonal y meridional) de viento, altura geopotencial, temperatura y humedad relativa.

Las ecuaciones de los variables primitivos (promediados en tiempo según decomposición de Reynolds y en espacio), en forma no-hidrostática son las siguientes:

Ecuaciones del Momento:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} - \bar{w} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} - \theta \frac{\partial \pi'}{\partial x} + f\bar{v} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_m \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_m \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} - \bar{w} \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} - \theta \frac{\partial \pi'}{\partial y} - f\bar{u} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_m \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_m \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} - \bar{w} \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} - \theta \frac{\partial \pi'}{\partial z} - \frac{g\theta'_v}{\theta_0} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_m \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_m \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) \quad (4.27)$$

Ecuación termodinámica:

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y} - \bar{w} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_h \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_h \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_h \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} \right)_{rad} \quad (4.28)$$

Ecuación de razón de mezcla de agua-vapor:

$$\frac{\partial \bar{r}}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial \bar{r}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial \bar{r}}{\partial y} - \bar{w} \frac{\partial \bar{r}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_h \frac{\partial \bar{r}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_h \frac{\partial \bar{r}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_h \frac{\partial \bar{r}}{\partial z} \right) \quad (4.29)$$

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \pi'}{\partial t} = -\frac{R\pi_0}{c_v \rho_0 \theta_0} \left(\frac{\partial \rho_0 \theta_0 \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \rho_0 \theta_0 \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \rho_0 \theta_0 \bar{w}}{\partial z} \right) \quad (4.30)$$

En la opción hidrostática, la ecuación de continuidad y de la función de Exner ($\pi = c_p(P/P_0)^{0.286}$), se ve como:

$$\frac{\partial \pi}{\partial t} = -\frac{g}{\theta_v} + g(r_T - r_v) \quad (4.31)$$

donde, c_p es calor específico del fluido a presión constante y subíndices $r_{T,v}$ refieren a agua total y vapor de agua.

$$\frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \rho \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \rho \bar{w}}{\partial z} = 0 \quad (4.32)$$

Parametrización de la turbulencia en RAMS

El tamaño de la malla computacional determina las escalas espaciales de las variables que se pueden resolver. Las componentes que la malla no puede resolver y se tienen que parametrizar son: (i) $u'_i u'_j$, para el momento, y (ii) $u'_i \phi'$ para un escalar, donde los subíndices i, j representan las dimensiones espaciales [1, 2, 3], u'_i es la velocidad que transporta y u'_j es la componente transportada, ϕ representa el escalar que se esta transportada, la barra representa el promediado de Reynolds y la prima representa la desviación desde valor medio.

La contribución a la tendencia del variable resuelto debido al transporte turbulento se calcula a partir de convergencia del flujo turbulento:

$$\left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial t} \right)_{Turb} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{u'_i u'_j}) \quad (4.33)$$

y

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_{Turb} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{u'_i \phi}) \quad (4.34)$$

Se usa la teoría de K para el transporte no-resuelto, la cual permite a evaluar las covarianzas a partir de un coeficiente de mezcla turbulenta y del gradiente de variable transportada.

$$\overline{u'_i u'_j} = -K_{mi} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.35)$$

La cual se usa para la dirección $i, j = 1, 2, 3$, K_{mi} es el coeficiente de mezcla turbulenta y se supone que $u'_i u'_j = u'_j u'_i$.

$$\overline{u'_i \phi'} = -K_{hi} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (4.36)$$

donde, K_{hi} es el coeficiente de mezcla para escalar para la dirección i . Se supone que K_h es siempre positivo, lo cual permite que el transporte de flujo (eddy flux) es siempre hacia gradiente abajo.

Las coeficientes K_m, K_h , se parametrizan utilizando el esquema de la deformación local:

$$K_{mi} = \rho (C_x \delta x) (C_y \delta y) (C_z \delta z) \left(S_3 + F_H [\max(0, -F_B)]^{0.5} \right) [\max(0, 1 - R_{hm} R_i)]^{0.5} \quad (4.37)$$

$$K_{hi} = -R_{hm} K_{mi} \quad (4.38)$$

donde, C_s son los coeficientes adimensionl que se usan para calcular las escalas de mezcla, F_H es 0 o 1, F_B es la frecuencia de Brünt Vaisala, R_z es el número de Richardson, R_{hm} es la razón de los coeficientes para escalar y momento y S_3 es el magnitud del tensor de deformación de tres dimensión dado por:

Capítulo 5

Resultados y discusión

5.1 Simulación numérica en una atmósfera homogénea en terreno plano

En esta sección se presentan los resultados del cálculo de la concentración y de las dosis directas de los rayos γ para una nube con una distribución de concentración gaussiana en un terreno plano. Se consideran dos casos atmosféricos: (i) sin el cortante vertical del viento (se desprecia la variación de la magnitud y dirección de la velocidad del viento con la altura), en una atmósfera neutra, convectiva e inestable, (ii) considerando el cortante vertical del viento en una atmósfera real con estabilidad neutra.

5.1.1 Dispersión de partículas sin el cortante vertical

Para estos cálculos numéricos se usó el LDM (ver sección 3.3), en donde se liberaron 100 partículas lagrangianas cada δt de 20 s, las trayectorias de estas partículas fueron calculada para un tiempo total de simulación de 24 horas. Las posiciones de las partículas en un espacio 3-D fueron guardadas cada 20 s para calcular la tasa de las dosis directas de rayos γ . La ecuación (2.13) fue utilizada para calcular la dosis que recibirá la población, debido a una nube de radionúclidos en la atmósfera. Se supone que la nube está constituida por un radionúclidos hipotético que emite una radiación γ de energía 1.0 MeV por desintegración. Se usaron las siguientes suposiciones y datos de entrada para el modelo de dosis radiológica:

Tasa de liberación de actividad nuclear, $\dot{Q}_0 = 3.7 \times 10^{10}$ Bq/s ¹

Altura de la liberación, $h = 0$ m (liberación a nivel de superficie)

Energía de los rayos γ emitida por desintegración, $E_\gamma = 1.0$ MeV

Coefficiente de atenuación lineal en aire, $\mu = 0.0082$ m⁻¹

Coefficiente de absorción de la energía en aire, $\mu_a = 0.0076$ m⁻¹

Densidad del aire, $\rho = 1.293$ kg m⁻³

Categoría de la estabilidad atmosférica = D (neutra)

¹Bq es la unidad de radioactividad nuclear, un Bq significa una desintegración por segundo.

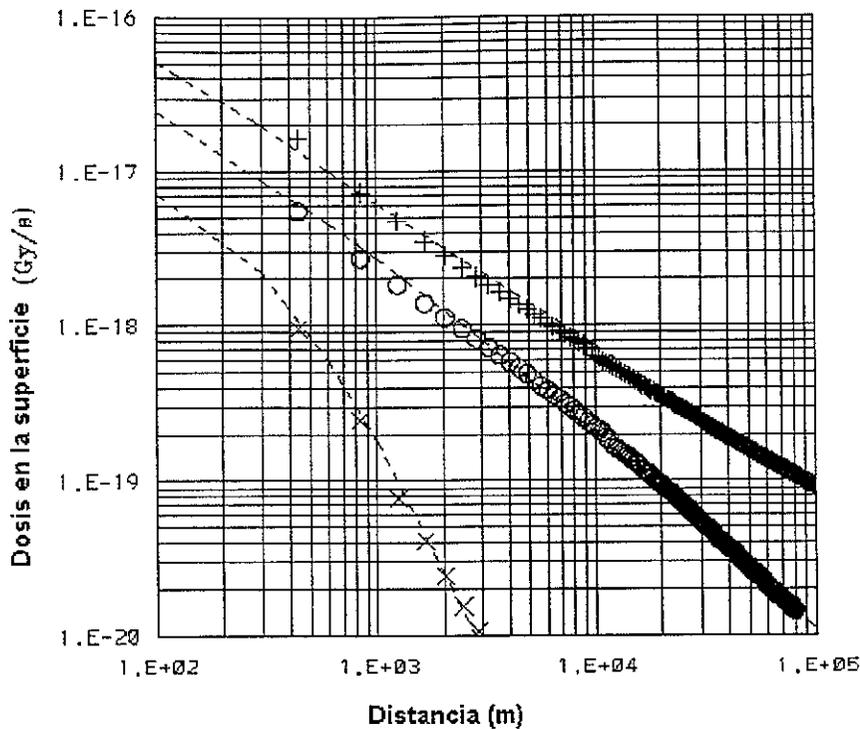


Fig. 5.1: Dosis directas de rayos γ en función de la distancia y la categoría de estabilidad atmosférica; línea discontinua: modelo gaussiano [51]; resultados numéricos del modelo LDM, (+): estable, (o): neutra, (x): inestable.

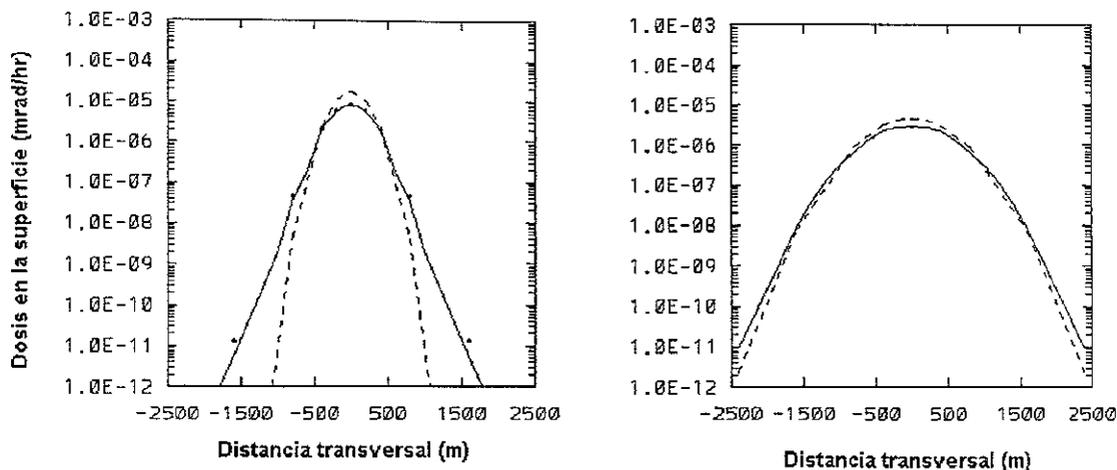
Factor de conversión de dosis, $K = 1.6 \times 10^{-13} \text{Gy kg MeV}^{-1}$

Se supone una forma lineal del factor de acumulación (se toma en cuenta el efecto de la dispersión de γ en aire), $B(E_\gamma, \mu r) = 1 + 1.5\mu r$.

Para obtener las estimaciones de dosis conservadoras, el decaimiento nuclear durante el transporte no fue considerado.

Los resultados calculados con el modelo LDM (ver sección 3.3) se comparan en la figura 5.1 con la solución del modelo gaussiano publicada por Nie et al. (1985). En esta figura se presentan las dosis de los rayos γ debido a una nube en la atmósfera, como función de la distancia a partir del punto de la liberación, para tres estabilidades de la atmósfera. En general, se observa una buena concordancia.

Enseguida se presentan las dosis a lo largo de la dirección transversal al viento medio (tanto en el plano horizontal como el vertical), usando el modelo simple de concentración uniforme y el modelo con distribución gaussiana. El modelo gaussiano se resolvió a partir de integrar la ecuación (2.3) en las tres direcciones espaciales usando técnicas numéricas (Gauss legendre de orden 24). Para integrar la ecuación (2.3), en este trabajo se desarrolló un procedimiento numérico basado en el uso del paquete comercial NAG ("Numerical Algorithms Group Inc"). El programa principal de este procedimiento, el cual hace llamadas a varias subrutinas estándares de NAG

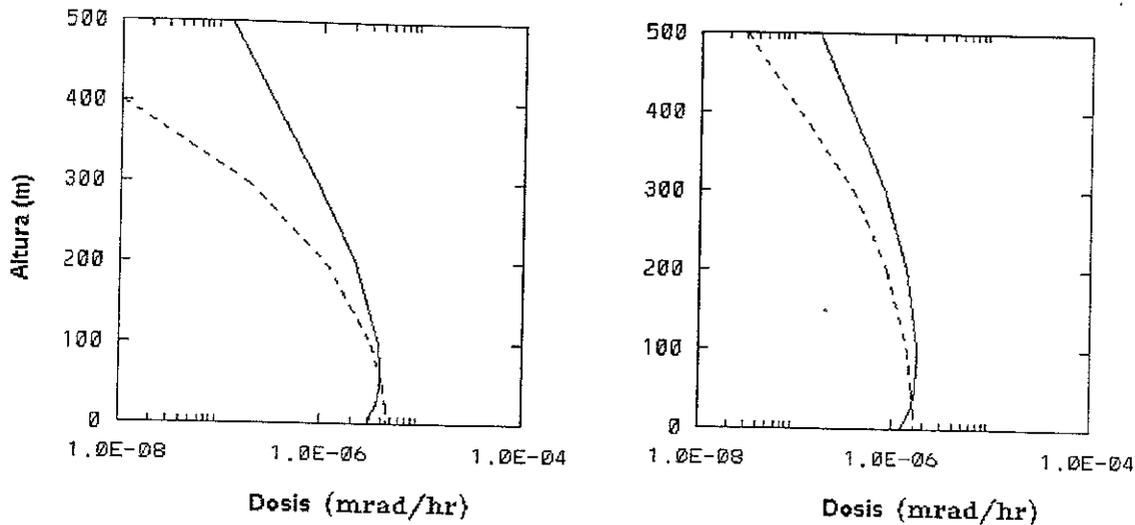


Figs. 5.2-5.3: Dosis directas de rayos γ en la direcci3n transversal y en $x = 3,218$ m y $x = 8,045$ m. L3nea continua: modelo gaussiano (ecuaci3n 2.3); l3nea discontinua: modelo uniforme (ecuaci3n 2.1); (·): resultados de Lahti (1982).

se presenta en el Ap3ndice A.3. En las figuras 5.2-5.5 se comparan los resultados del modelo gaussiano (usando las subrutinas NAG) con los resultados del mismo modelo publicados por Lahti [45]. En las figuras se muestran tambi3n los resultados del modelo con concentraci3n uniforme [72]. La comparaci3n muestra que el procedimiento de integraci3n num3rica proporciona resultados satisfactorios. Es conveniente mencionar que se observ3 una sensibilidad de los resultados dependiente del orden de la cuadratura de Gauss legendre. Es interesante observar que las dosis m3ximas no se presentan en la superficie (en donde se tiene la m3xima concentraci3n) sino a una altura del orden de 50 m. La localizaci3n m3xima de la dosis tiende hacia el centro de masa de la nube en la direcci3n vertical, este hecho no es visible en el modelo uniforme simple ya que sus predicciones son siempre proporcionales a la concentraci3n local de radion3clidos. Tambi3n se observa que las dosis a lo largo del eje y , comparadas con las dosis en la direcci3n del eje z (calculadas con el modelo gaussiano), se aproximan al modelo uniforme a menores distancias en la direcci3n longitudinal x . Esto es obviamente debido al valor m3s alto de σ_y con respecto al valor de σ_z a lo largo de direcci3n longitudinal. As3 que la aproximaci3n de suponer una concentraci3n uniforme se acerca m3s a la realidad en la direcci3n y , que en la direcci3n z .

En las figuras 5.6-5.9 se presenta la tasa de la dosis para una nube de radion3clidos, tomando en cuenta el decaimiento nuclear. Se supone que los radion3clidos emiten una energ3a media de rayos γ de 0.8 MeV por desintegraci3n y tienen una vida media ($T_{1/2}$) de 34 min. Esto representa una nube que contiene una mezcla de gases nobles que son productos de fisi3n [45]. Los resultados para una atm3sfera neutra y altura de liberaci3n de 0 y 100 m, se presentan en las figuras 5.6 y 5.7. En las figuras 5.8 y 5.9 se presenta la tasa de la dosis considerando una vida media de radion3clidos de 76 minutos (lo cual corresponde al gas noble ^{87}Kr).

La comparaci3n con el modelo gaussiano, muestra que el modelo num3rico de

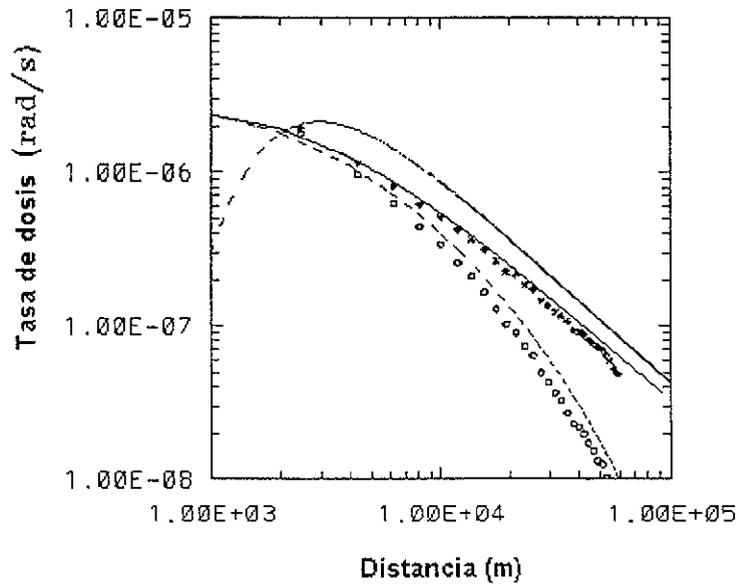
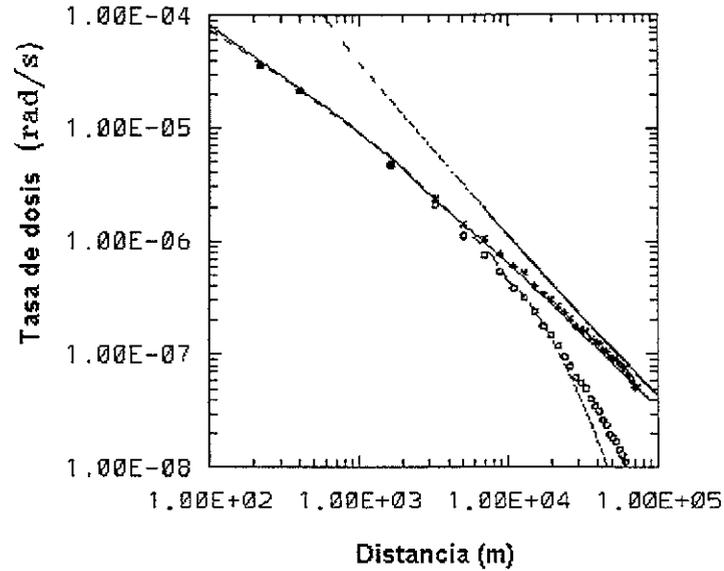


Figs. 5.4-5.5: Dosis directas de γ en la direcci3n vertical z en $x = 8,045$ m y $x = 16,090$ m. L3nea continua: modelo gaussiano (ecuaci3n 3); l3nea discontinua: modelo uniforme (ecuaci3n 3.1).

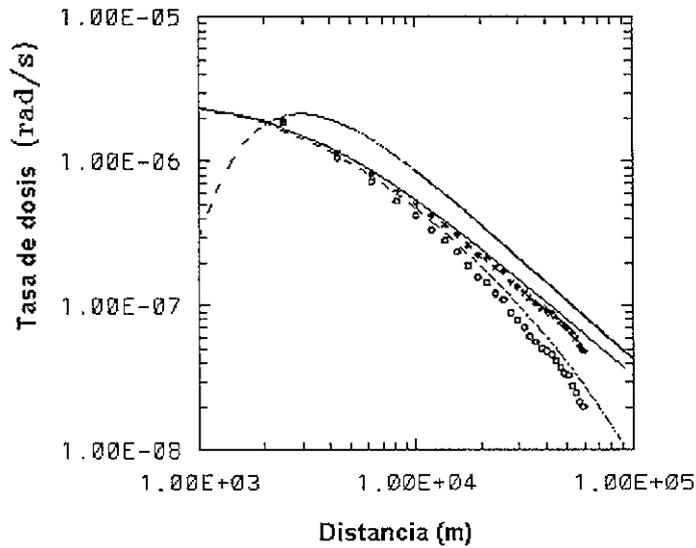
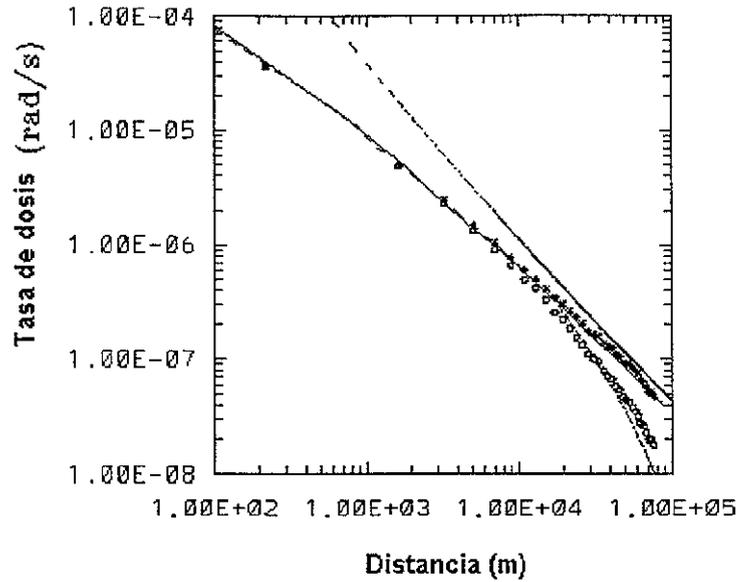
part3culas (con y sin decaimiento nuclear) proporciona resultados satisfactorios. La comparaci3n tambi3n indica que el modelo simple de concentraci3n uniforme es una buena aproximaci3n para distancias grandes (del orden de 10 km) y proporciona resultados conservadores (l3mite superior) de la dosis a lo largo de la l3nea central de la nube para una liberaci3n a nivel de superficie. Sin embargo, para una liberaci3n a 100 m de altura, el modelo subestima la dosis para distancias menores de 2 km.

Aunque, en este trabajo, utilizamos una forma lineal del factor de acumulaci3n (para ser consistente con los c3lculos de [45]), en la figura 5.10 se presenta una comparaci3n de este factor lineal con el factor exponencial de Berger y el de progresi3n geom3trica (GP), ver secci3n 1.3. Es posible observar que el factor lineal es menor que el de Berger y el de GP. El factor de Berger es aproximadamente igual al de GP hasta 4000 m de distancia, sin embargo, para distancias mayores (debido a su car3cter exponencial) crece m3s r3pidamente que el factor GP. Se ha reportado que la formulaci3n GP coincide mejor con las mediciones [44].

Los resultados obtenidos con nuestro modelo num3rico (LDM) y su buena comparaci3n con los resultados del modelo gaussiano, es una prueba clara de la validez de nuestro modelo lagrangiano. Tambi3n, se puede comentar que el modelo simple de concentraci3n uniforme es una buena aproximaci3n para distancias grandes, sobre todo a lo largo del eje central de la pluma. No obstante, el modelo uniforme, para las distancias cortas, debe ser utilizado con mucho cuidado, porque puede predecir menor dosis, lo cual es en contra de la pol3tica de seguridad nuclear.



Figs. 5.6-5.7: Dosis directas de γ en la direcci3n longitudinal x , para una atm3sfera neutra (0 y 100 m de altura de liberaci3n); l3nea continua: modelo gaussiano sin decaimiento nuclear; l3nea discontinua: modelo gaussiano con decaimiento ($T_{1/2}=34$ min.); (*): modelo de part3culas sin decaimiento; (o): modelo de part3culas con decaimiento; l3nea punteada: modelo uniforme (sin decaimiento).



Figs. 5.8-5.9: Dosis directas de γ en la direcci3n longitudinal x , para una atm3sfera neutra (0 y 100 m de altura de liberaci3n); l3nea continua: modelo gaussiano sin decaimiento nuclear; l3nea discontinua: modelo gaussiano con decaimiento ($T_{1/2}=76$ min.); (*): modelo de part3culas sin decaimiento; (o): modelo de part3culas con decaimiento; l3nea punteada: modelo uniforme (sin decaimiento).

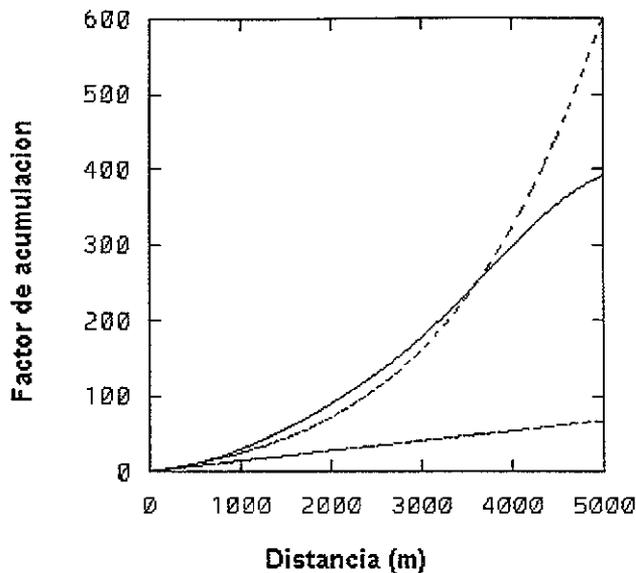
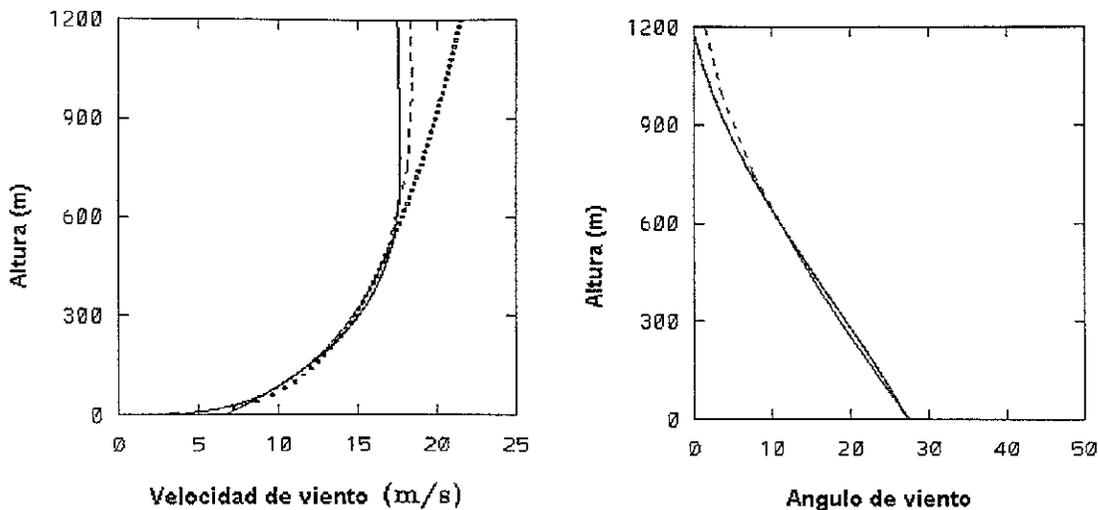


Fig. 5.10: Factor de acumulación de dosis en la dirección longitudinal x ; línea discontinua: lineal; línea punteada: Berger; línea continua: GP.

5.1.2 Dispersión de partículas con cortante vertical

En el segundo caso, el campo medio del viento y las características turbulentas fueron calculadas for los modelos de viento descritos en el capítulo 4. Los perfiles del viento medio fueron calculados para una atmósfera homogénea utilizando el modelo $(E - \epsilon)$ [37], [38], mientras que las componentes turbulentas fueron calculadas utilizando los modelos semi-empíricos de Davis [54] y Hanna [15]. En este caso, se supone que el campo de viento no varía con el tiempo durante el cálculo de las trayectorias de las partículas. El viento medio en la dirección vertical (\bar{w}), es cero para un terreno plano (ver sección 3.2). Para los cálculos de la concentración se utilizó el modelo "puff-partícula" (ver sección 3.2) el cual proporciona resultados estadísticamente mucho mejores que el modelo de partículas [66], [65].

Las figuras 5.11 y 5.12 muestran una buena comparación entre el viento medio resultante, calculado con el modelo $E - \epsilon$ y los datos del experimento de Leipzig [73]. El viento medio calculado por la ley de potencia (con el parámetro $p=0.25$ para una atmósfera neutra, ver tabla 2.2) según recomiendo Hanna (1984), también se muestra en la Fig. 5.11. Se puede observar que la ley de potencia proporciona una buena comparación con el perfil observado del viento. Los perfiles verticales de la desviación estándar de las fluctuaciones de velocidad se presentan en las figuras 5.13 y 5.14 y se comparan con los calculados con el modelo $E - \epsilon$ [37]. Dado que en un terreno plano la turbulencia atmosférica es horizontalmente homogénea, las fluctuaciones de la velocidad solamente varían en la dirección vertical. En las figuras 5.13 y 5.14 las líneas punteadas corresponden a las predicciones del modelo $E - \epsilon$. Las fluctuaciones de la velocidad se calculan suponiendo una turbulencia isotrópica ($u'_i = \sqrt{\frac{2}{3}E}$, $i =$



Figs. 5.11-5.12: Perfiles verticales de la velocidad media del viento y su ángulo con la dirección del viento geostrófico, para una atmósfera neutra; línea continua: datos de Leipzig [73]; línea discontinua: modelo $E - \epsilon$ [37]; línea punteada: ley de potencia [43].

1, 2, 3). Los perfiles verticales para la vida media de los remolinos turbulentos en la dirección vertical y horizontal, calculados por el modelo semi-empírico de Hanna (1984) se muestran en las figuras 5.15 y 5.16. La duración de los remolinos calculada con el modelo $E - \epsilon$, utilizando la relación $T_l = 0.3E/\epsilon$ [37], también se muestra en estas figuras.

Del análisis dimensional, se desprende que la vida media de los remolinos turbulentos se puede representar por $Tl = \nu_t/\overline{u^2}$ [74], donde ν_t es la difusividad de los remolinos, la cual se calcula por $\nu_t = c_k \frac{E^2}{\epsilon}$, siendo c_k una constante empírica [37], [38]. En la atmósfera la duración de los remolinos turbulentos es del orden de 100 a 1000 s [74]. Los argumentos físicos basados en la teoría de la semejanza indican que cerca de la superficie, la duración del remolino es proporcional a z/u_* [15]. Las observaciones de campo indican que en una atmósfera neutra, Tl_w continúa aumentando asintóticamente hacia un valor proporcional a G/f , donde G es el viento libre geostrófico, y f es el parámetro de Coriolis. A diferencia de Tl_w , la duración de los remolinos para la dirección horizontal, Tl_u , tiene poca dependencia de la altura, y fuera de la capa límite planetaria adquiere el valor de Tl_w [75], [76].

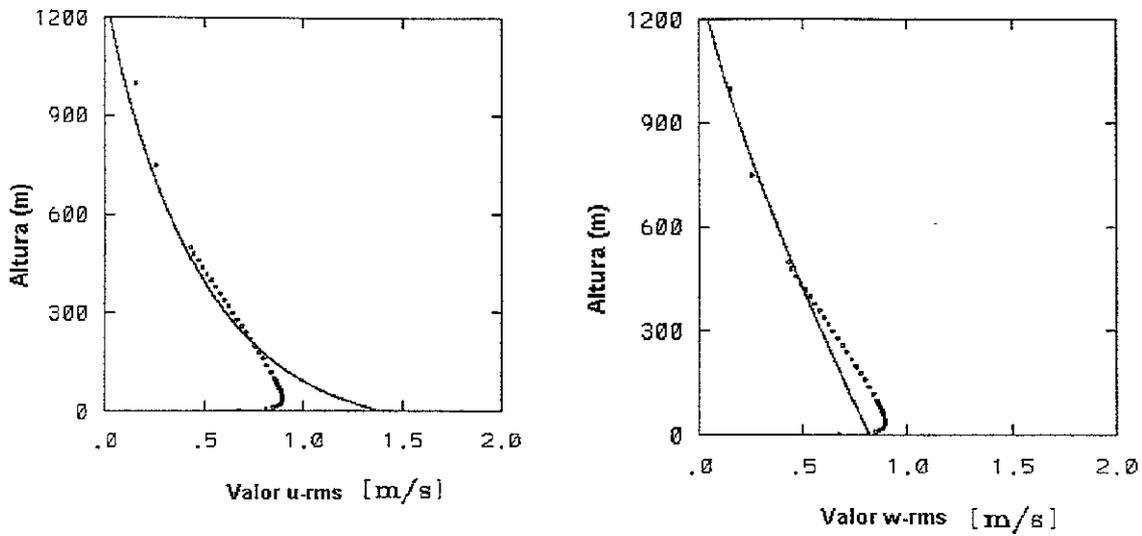
En este caso los siguientes datos de entrada para resolver el modelo de viento (ver sección 4.2.1) fueron utilizados:

Viento geostrófico $u_g = 17.5$ m/s y $v_g = 0$,

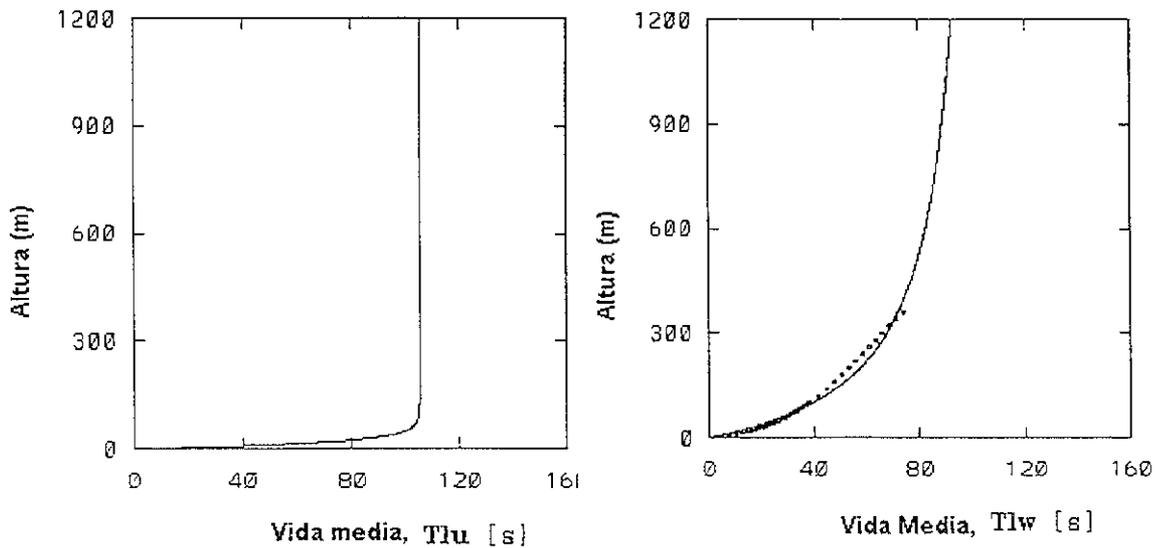
$\bar{u}(z \rightarrow \infty) = u_g$,

$\bar{v}(z \rightarrow \infty) = v_g$,

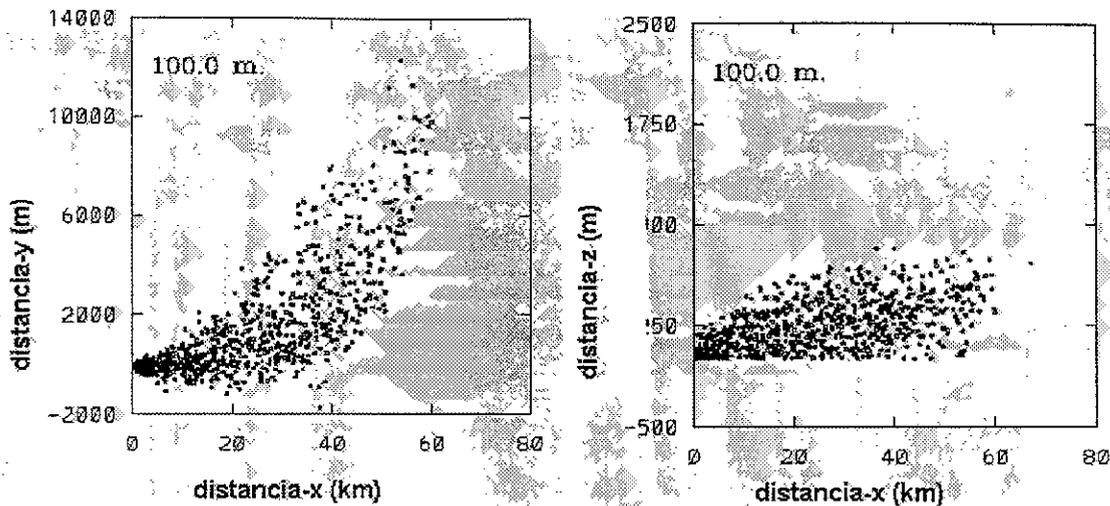
latitud del sitio $\phi = 40^\circ$ N



Figs. 5.13-5.14: Perfiles verticales de las fluctuaciones de la velocidad del viento (rms valores), en las direcciones horizontal y vertical, para una atmósfera neutra; línea continua: modelo empírico [54]; línea punteada: modelo $E - \epsilon$ [37].



Figs. 5.15-5.16: Perfiles verticales de la vida media de los remolinos turbulentos en las direcciones horizontal y vertical; línea continua: modelo empírico [54]; línea punteada: $E - \epsilon$ model [37].



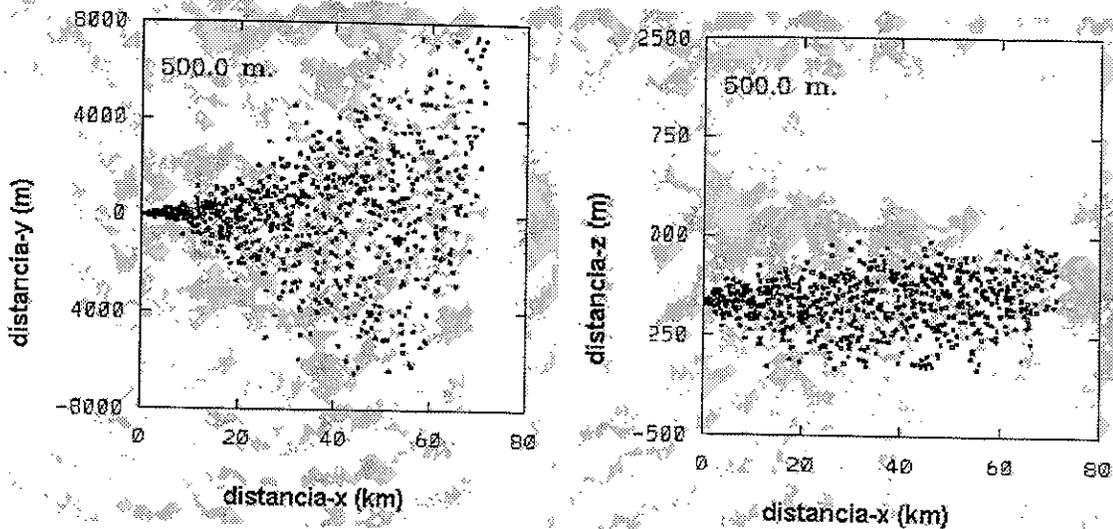
Figs. 17a-17b: Posición de las partículas en un plano horizontal ($x - y$) y vertical ($x - z$) para una altura de liberación de 100 m.

Para calcular la dosis radiológica, en este caso, se liberaron 100 partículas lagrangianas cada δt de 20 s. Las trayectorias de estas partículas fueron calculadas utilizando el método de Monte Carlo por un tiempo total de simulación de 24 horas. Se simularon varios casos en los cuales se varió la altura de la liberación 10 m, 50 m, 100 m y 500 m. Las posiciones de las partículas en un espacio 3-D fueron almacenadas cada 20 s para calcular la tasa de la dosis directa de rayos γ . La tasa de dosis radiológica debido a una nube de radionúclidos en una atmósfera neutra, también se calculó utilizando el modelo gaussiano con σ_y modificado [21]. Para usar el modelo gaussiano (GPM), la velocidad del viento se calculó a partir de la ley de potencia y la dirección del viento dentro de la capa límite planetaria se aproximó con una variación lineal con un ángulo de 26° , entre el viento de superficie y el viento geostrófico a una altura de 1400 m. Los datos radiológicos utilizados para este caso fueron los mismos que en el caso anterior (sin cortante del viento).

Los resultados de esta simulación se presentan en las Figs. 5.17-5.23. Las posiciones de las partículas en los planos horizontal y vertical, para una altura de liberación de 100 m y 500 m se muestran en las Figs. 5.17-5.18. La forma de la pluma para las alturas de liberación de 10 m y 50 m, fue muy similar a la de 100 m, por lo tanto, no se presenta.

En las Figs. 5.19 y 5.20, se presentan los coeficientes de dispersión (σ_y y σ_z) calculados a partir del modelo de partículas y se comparan con las σ 's empíricas [8], [21], [14]. El efecto de la altura de la liberación en los coeficientes de dispersión se observa claramente en estas figuras. La extensión de la pluma en los planos horizontal ($x - y$) y vertical ($x - z$) se reduce ya que la intensidad de la turbulencia disminuye con un aumento en la altura de la liberación (ver también Figs. 5.17 y 5.18). Este comportamiento es consistente con la teoría de la capa límite planetaria [77], [78].

Para distancias mayores a 10 km (cuando la extensión vertical de la nube es sufi-



Figs. 5.18a-5.18b: Posición de las partículas en un plano horizontal ($x - y$) y vertical ($x - z$) para una altura de liberación de 500 m.

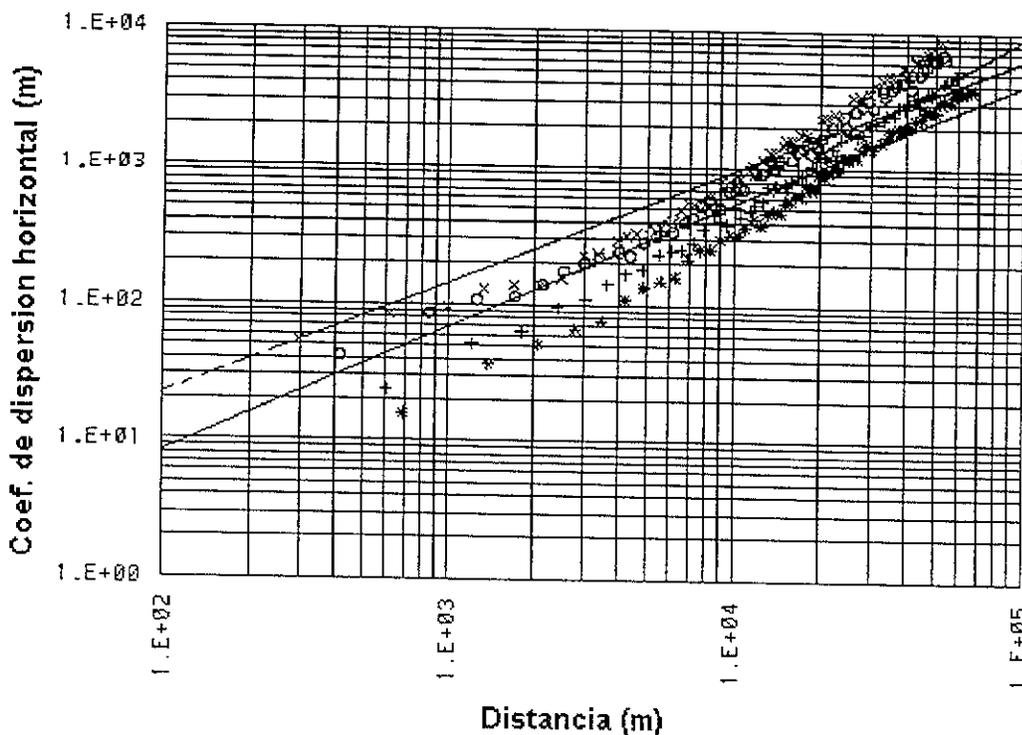


Fig. 5.19: Coeficiente de dispersión horizontal; línea discontinua: JK para una altura de liberación de 100 m [14]; línea continua: P-G [8] y Pasquill modificada [79], [21]; puntos discretos: resultados numéricos para altura de liberación de (x) 10 m, (o) 50 m, (+) 100 y (*) 500 m.

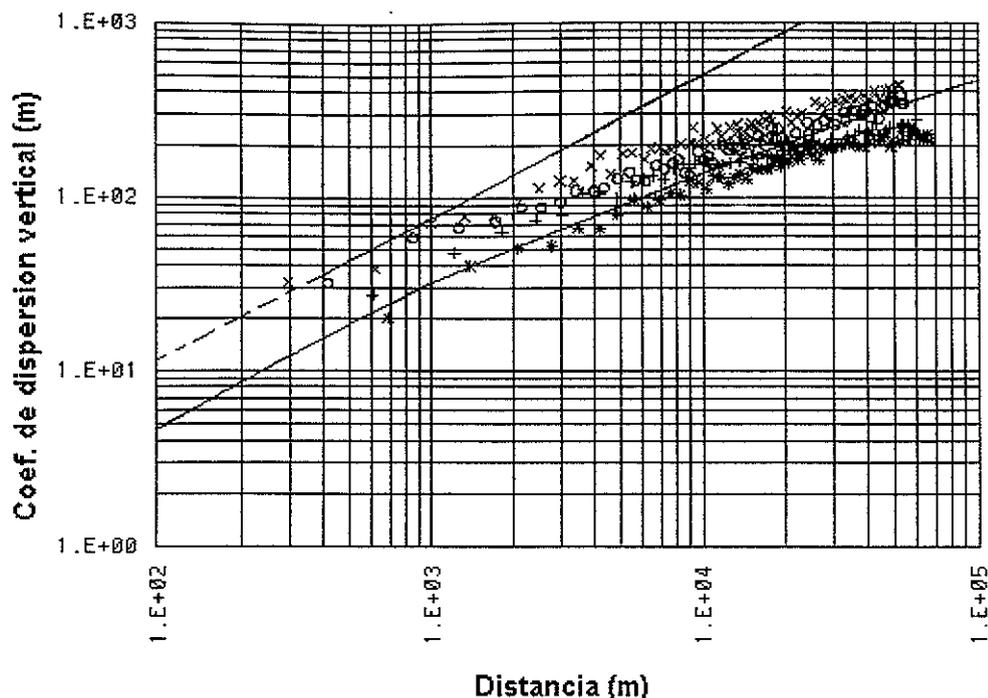


Fig. 5.20: Coeficiente de dispersión vertical; línea discontinua: JK para una altura de liberación de 100 m [14]; línea continua: P-G [8]; puntos discretos: resultados numéricos para altura de liberación de (x) 10 m, (o) 50 m, (+) 100 m y (*) 500 m.

cientemente grande para sentir el efecto del cortante vertical del viento), la dispersión de partículas no solamente se debe a las fluctuaciones turbulentas (del orden de 1 m/s) sino también a la componente media del viento (del orden de 10 m/s). Esta componente media se genera debido al cambio en la dirección del viento con la altura. En la figura 5.21 se observa que la σ_y calculada utilizando el método de partículas (obtenida a partir de la relación $\sigma_{yn} \equiv (\langle y'^2 \rangle)^{1/2}$), se compara muy bien con la σ_y modificada [79], la cual se calcula agregando un factor empírico ($0.03x^2 \delta\theta^2$) en la varianza σ_y^2 , donde $\delta\theta$ (en radianes) es el cambio en la dirección horizontal del viento a lo largo del eje vertical, a una distancia x (en metros) desde el punto de la liberación. Las coeficientes σ_y y σ_z obtenidos numéricamente se comparan relativamente mejor con los de Pasquill, en caso de liberación cercana a la superficie (hasta 100 m). Las coeficientes de dispersión de JK [14], predicen altos valores de σ 's debido a que fueron obtenidos en un terreno rugoso ($z_0=1$ m).

En la figura 5.22 se observa una buena concordancia en la concentración para una atmósfera homogénea (sin el cortante vertical del viento) y para una atmósfera neutra, hasta una distancia de aproximadamente de 20 km.

La figura 5.23 muestra una comparación de la concentración numérica con el modelo gaussiano para varias alturas (10 m, 50 m y 100 m) de liberación. La concentración se presenta en unidades de $\chi u / \dot{Q} \equiv (\text{m}^2)$. Para las liberaciones elevadas, se observa que las concentraciones son mayores que las que predice el modelo gaussiano para las distancias cortas (hasta la concentración máxima). Ello se debe a que en el modelo gaussiano

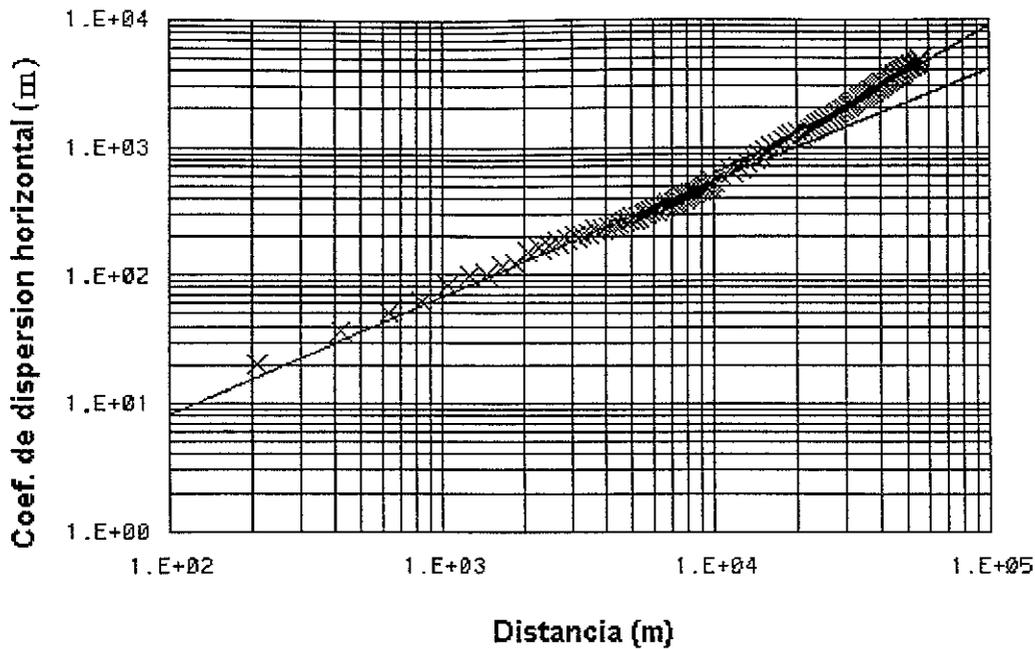


Fig. 5.21: Coeficiente de la dispersión horizontal, σ_y , en función de la distancia; línea continua: P-G σ_y [8], línea superior: σ_y modificada [21], puntos discretos (x): resultados numéricos.

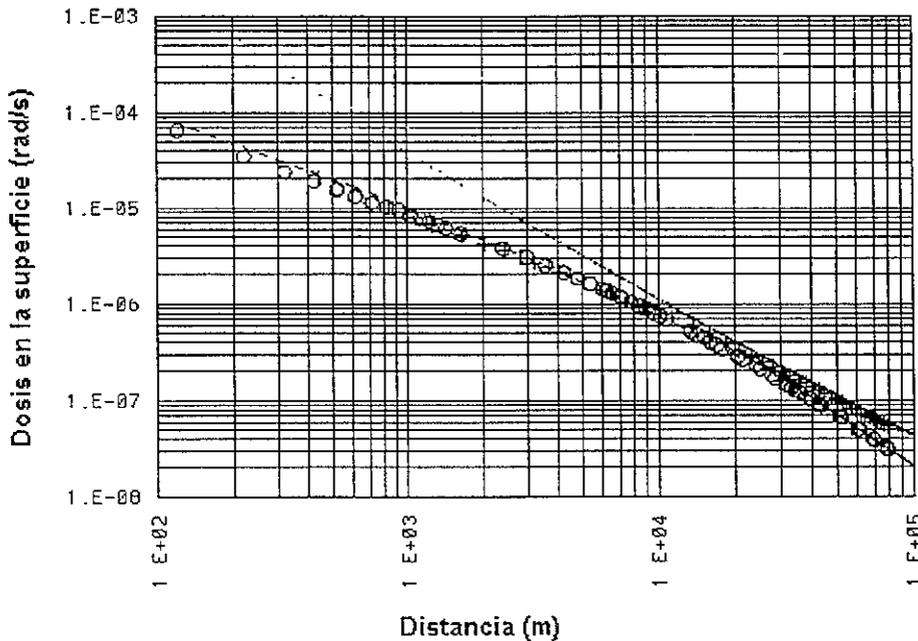


Fig. 5.22: Tasa de dosis directas de γ en función de la distancia para una liberación a nivel de superficie; línea punteada: modelo uniforme (ecuación 2.1); línea discontinua: modelo gaussiano (ecuación 2.3); línea continua: el modelo gaussiano con σ_y modificado; (o) y (x): resultados numéricos.

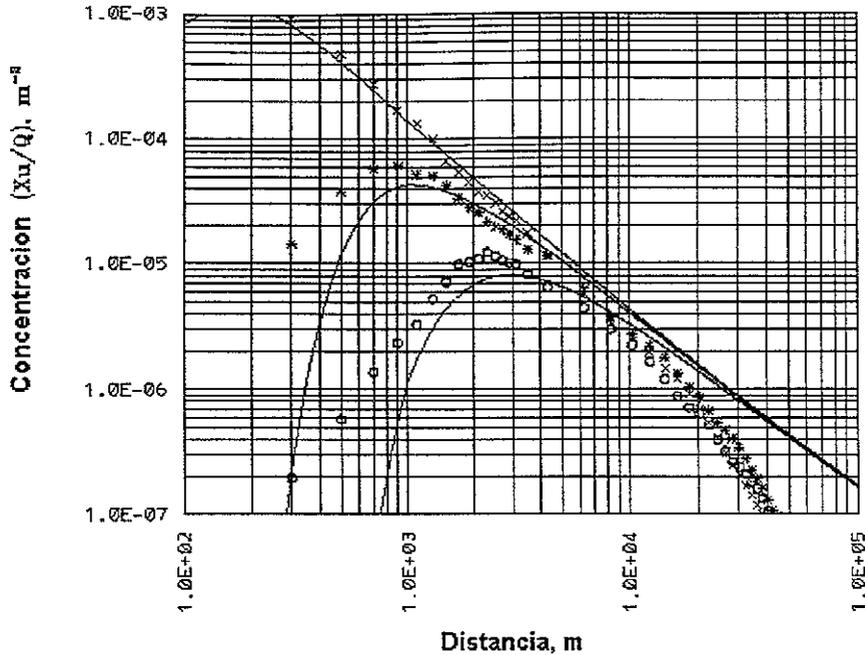


Fig. 5.23: Concentración en función de la distancia para varias alturas de liberación; línea continua: el modelo gaussiano, puntos discretos: resultados numéricos para liberaciones a altura de 10, 50 y 100 m.

se utiliza únicamente la velocidad del viento a la altura de liberación, lo implica que se consideran vientos intensos (no reales) cerca de la superficie. Debido a usar estos vientos altos cerca de la superficie, el modelo gaussiano subestima la concentración (ver ecuaciones 2.2 y 2.7). Para las distancias intermedias la concordancia es muy buena mientras que para las distancias mayores de 20 km, el modelo gaussiano sobrestima la concentración debido a que no considera el cortante vertical del viento.

Una comparación de los valores de la concentración (calculados numéricamente) integrada en el tiempo (χt) a nivel de superficie con los datos del experimento de Green Glow [80], se muestra en la Fig. 5.24. Los datos medidos corresponden a los valores de la concentración máxima obtenidos en los arcos de 200, 800, 1600, 3200, 12800 y 25600 m para una liberación de 30 min., de una fuente en la superficie en un terreno plano. La figura 5.25 muestra la distribución de la concentración en la superficie en forma de curvas de contorno.

Las discrepancias antes mencionadas se entienden claramente, si analizamos la teoría de la capa límite la cual establece que la velocidad del viento es cero en la superficie sólida y aumenta con la altura, sin embargo los modelos gaussianos suponen un perfil constante de viento. Muy cerca de la superficie (10-15% de la capa límite) el perfil del viento presenta una variación logarítmica y dentro de esta capa las características turbulentas (fluctuaciones) no varían más de 10 %. La altura de esta capa de superficie varía con la estabilidad atmosférica (150 m (inestable) y 25 m (estable) [77]. El viento medio alcanza 70% de su valor máximo (viento geostrofico), dentro de esa capa. Fuera de esa capa, la magnitud del viento varía ligeramente. La intensidad de

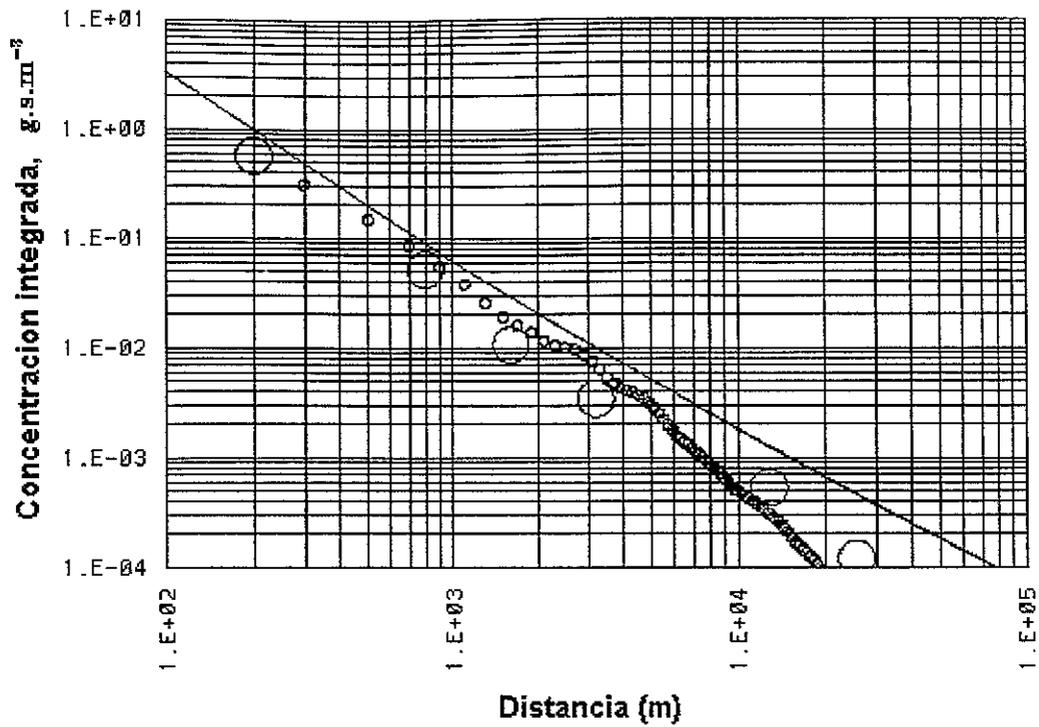


Fig. 5.24: Concentración máxima integrada en tiempo en función de la distancia; círculos pequeños: resultados numéricos, círculos grandes: datos experimentales [80].

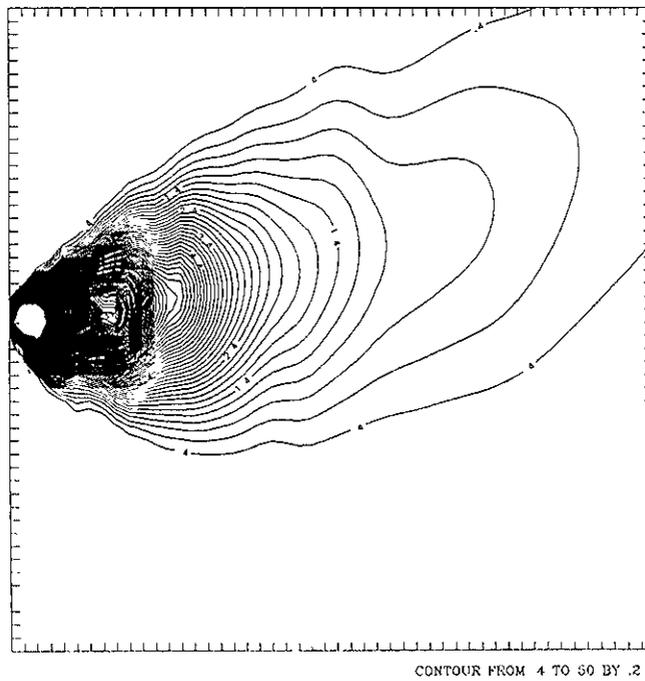


Fig. 5.25: Mapa 2D de contornos calculados numéricamente de la concentración integrada en tiempo ($\times 10^3 \text{g.s.m}^{-3}$) sobre un dominio horizontal de 10 x 2 km.

la turbulencia se reduce con la altura, y al exterior de la capa límite es igual a cero. El cortante vertical del viento, se observa durante todas las condiciones de la estabilidad atmosféricas, debido a rotación de la tierra. El ángulo entre los vientos de la superficie y el viento geostrófico varía con la estabilidad atmosférica (entre 15° (inestable) y 45° (estable), aproximadamente).

Como la extensión vertical de una pluma aumenta con el recorrido, las componentes del viento medio que surgen en la dirección perpendicular (en el plano horizontal) son mucho más fuertes que las fluctuaciones. Estos dan lugar a una dispersión más alta, en la dirección horizontal transversal al viento medio, que el coeficiente de difusión σ_y de P-G [8]. El hecho de suponer un viento uniforme en el modelo gaussiano da lugar al transporte de la nube, con una velocidad erróneamente grande, lo cual conduce a que la localización de la concentración máxima ocurra a una distancia mayor que en un caso de una atmósfera real (ver figura 5.23).

5.2 Simulación Numérica en topografía compleja

En esta sección se presentan los resultados de una liberación hipotética de radionúclidos en la región costera del estado de Veracruz, México. La región de simulación es de 600×600 km, con centro en las coordenadas latitud 19.72 N y longitud 96.38 W. Se usaron dos mallas anidadas, con una resolución espacial en la horizontal de 15×15 km para la malla grande y de 3×3 km para la malla fina (anidada). La resolución espacial en la vertical es variable, con el primer nodo a 30 m y en los nodos sucesivos nodos la distancia aumenta en 12 % hasta un valor máximo de 1200 m.

Los campos de viento fueron obtenidos usando el programa comercial RAMS (ver capítulo 3). Se simularon dos casos de liberación: (i) 4 de marzo de 1997 y (ii) 1 de febrero de 1999, con el objetivo de encontrar condiciones críticas bajo las cuales la nube de radionúclidos puede ser transporta hacia los núcleos de población que se encuentran en la vecindad del sitio de la liberación. Como condiciones iniciales y de frontera se utilizaron los datos globales de reanálisis del NCEP (National Center for Environmental Prediction) de la US-NOAA (United States-National Oceanic and Atmospheric Administration), correspondientes a las fechas antes mencionadas. Estos datos tienen una resolución espacial en la horizontal de 2.5° de ángulo (latitud y longitud), la cual corresponde aproximadamente a 300×300 km. En la dirección vertical los datos del NCEP tienen 17 niveles que parten desde la superficie terrestre (1000 mbar) hasta aproximadamente 30 km de altura (10 mbar). La resolución temporal de los datos del NCEP es de 6 horas. Los datos de la topografía de la región se obtuvieron de la base de datos del Departamento de Geología de los Estados Unidos (US-GS), los cuales tienen una resolución de 1×1 km. El número de nodos utilizados para discretizar la región (600×600 km) fue de 40×40 . La región cercana al punto de liberación (120×120 km) se discretizó con una malla anidada de 40×40 nodos. En la dirección vertical las dos malla tienen la misma discretización (38 nodos). El incremento de tiempo utilizado en la integración de las ecuaciones (descritas en la sección 4.2) es del orden de 10 s. Se utilizó el modelo de turbulencia de Mellor-Yamada, en donde se resuelve la ecuación de la energía cinética turbulenta y se parametriza la tasa

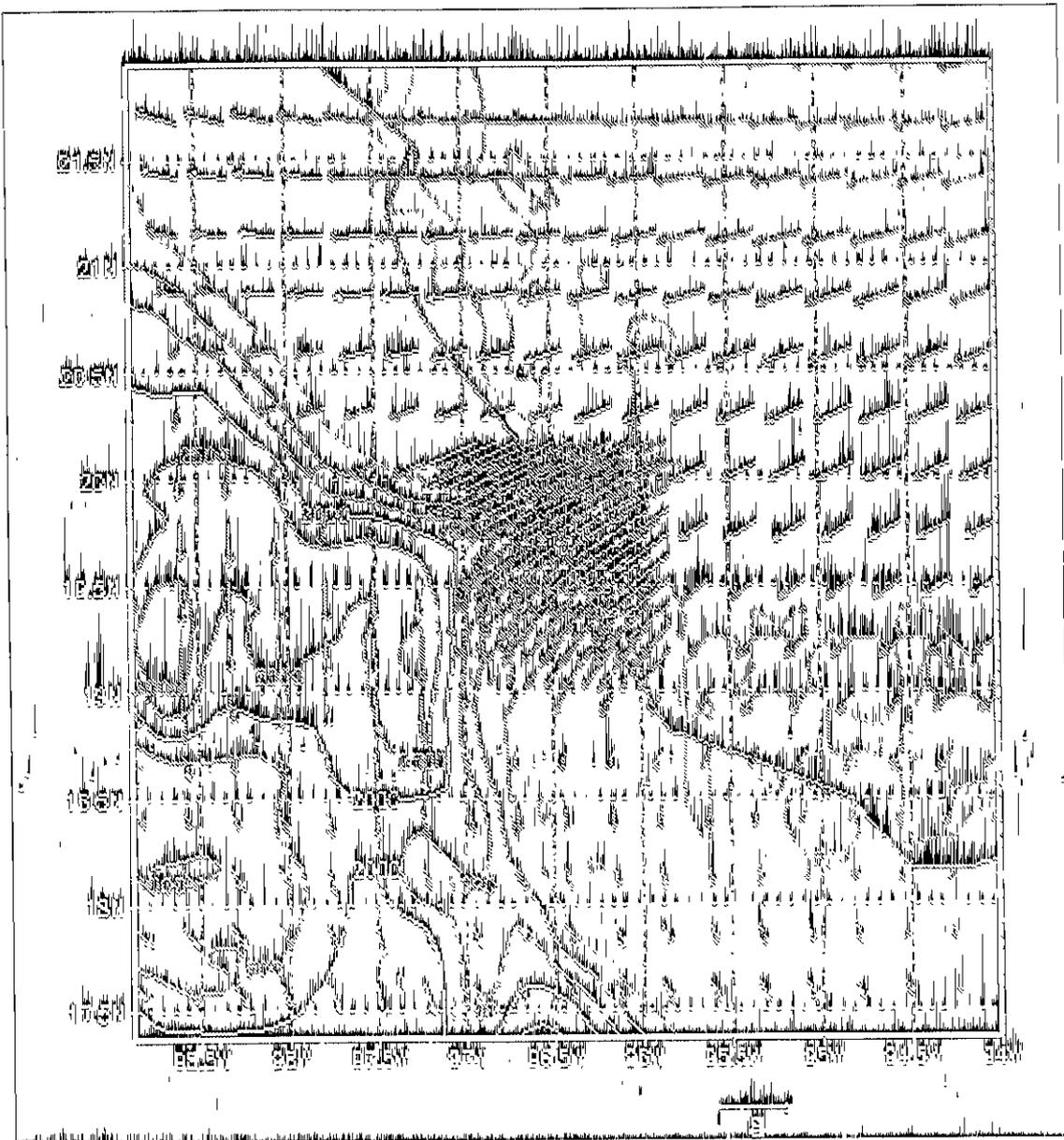


Fig. 5.27: Vectores de velocidad del viento correspondientes al primer nodo en la liberación de la partícula (z = 20 m). Malla coarsa en latitud al grado de 19.7° a 20° N y de 95° a 99° W. Malla fina de 19° a 20° N y de 95° a 97° W. Punto de la liberación en las coordenadas 19.72° N y 96.58° W.

de disipación de la energía turbulenta (ϵ), ver sección (4.2.2). El uso del suelo de la región en estudio se obtuvo de la base de datos de US-GS.

Los campos de vientos calculados y las curvas de nivel correspondientes a la topografía de la región se presentan en las figuras 5.26-5.28.

La trayectoria de la nube y las curvas de isoconcentración, para una liberación instantánea de 100 partículas lagrangianas, para el día 4 de marzo de 1997 (con altura de liberación 100 m), se presentan en las figuras 5.29 y 5.30. En las figuras 5.31 y 5.32 se muestra la trayectoria de la nube y las curvas de isoconcentración correspondientes al 1 de febrero de 1999. La concentración de partículas se calculó utilizando el modelo "puff-partícula" (ver ecuación 3.9). La concentración se presenta en unidades de $\#/m^3$ (número de partículas por unidad de volumen).

Para el caso del 4 de marzo de 1997, a las 0800 hrs tiempo local, los vientos soplaron hacia el noroeste, después del medio día cambiaron hacia el oeste, por lo tanto la nube de radionúclidos, cuando alcanzó a la zona de montañas, y debido a no tener momento vertical suficiente rodeó la montaña y se abrió en dos partes (ver figura 5.29). La parte que se fue hacia el oeste entró a los vientos de menor intensidad de la cañada por lo que fue transportada a una menor distancia. Puede observarse que los vientos de mayor intensidad que soplaron hacia el noroeste, transportaron a la nube hasta el límite del dominio computacional después de 16 hrs de simulación. Además, se puede observar que la nube que se transportó hacia el noroeste tuvo mayor dispersión horizontal (debido a una gran intensidad de turbulencia) que la parte transportada hacia la cañada. En la figura 5.30 se presentan las curvas de isoconcentración al nivel de la superficie, puede observarse que las curvas de concentración siguen la trayectoria (no en línea recta) de la nube. Este comportamiento no se puede predecir con los modelos simples gaussianos, los cuales suponen una trayectoria rectilínea de la pluma. Por lo tanto los modelos gaussianos no son capaces de predecir la concentración en regiones con topografía compleja, y en consecuencia, las dosis radiológicas no se pueden calcular de manera adecuada.

En la figura 5.31 se presenta la dispersión de partículas correspondiente al caso del día 1 de febrero de 1999. Puede observarse que al inicio de la liberación (a las 0600 de la mañana hora local) los vientos soplaron hacia el golfo de México. Alrededor del medio día los vientos cambiaron de dirección y soplaron hacia el continente. Este cambio en la dirección del viento es muy común de observar en las zonas costeras (efecto de brisa), y se debe a que la superficie sólida se calienta durante el día por lo que provoca un gradiente horizontal de temperatura motivando que los vientos locales soplen del mar hacia la costa, el fenómeno inverso se observa durante la noche, es decir se presentan vientos del continente hacia el mar. Ya que la liberación empezó a las 0600 hrs, todavía dominaban los vientos nocturnos, por lo que la nube, al principio de la liberación, empezó a moverse hacia el continente, pero al regresar a tierra con suficiente momento para poder subir hasta la parte superior de las montañas. En este caso la atmósfera presentó una estratificación inestable y no hubo mucha dispersión en la dirección horizontal.

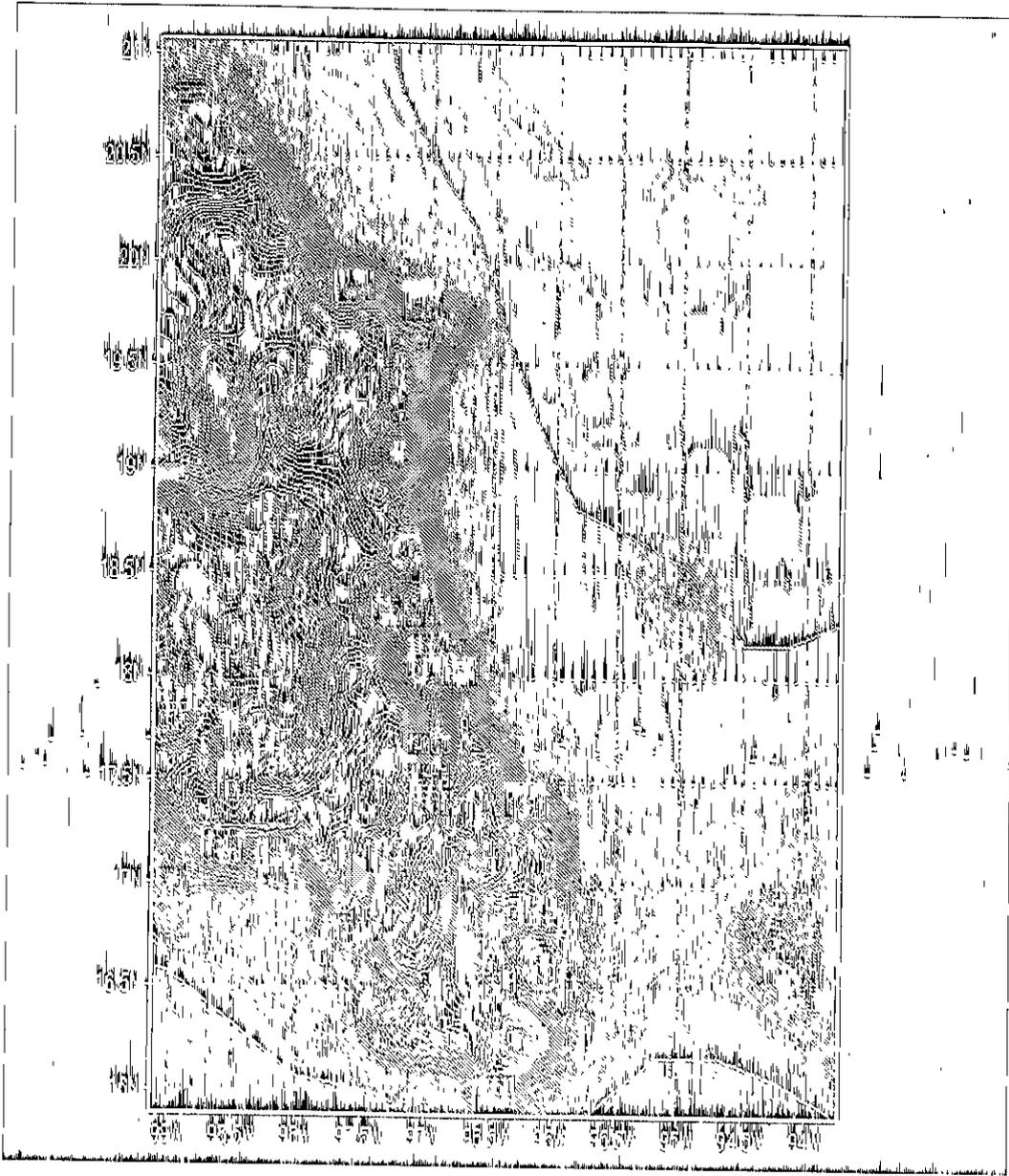
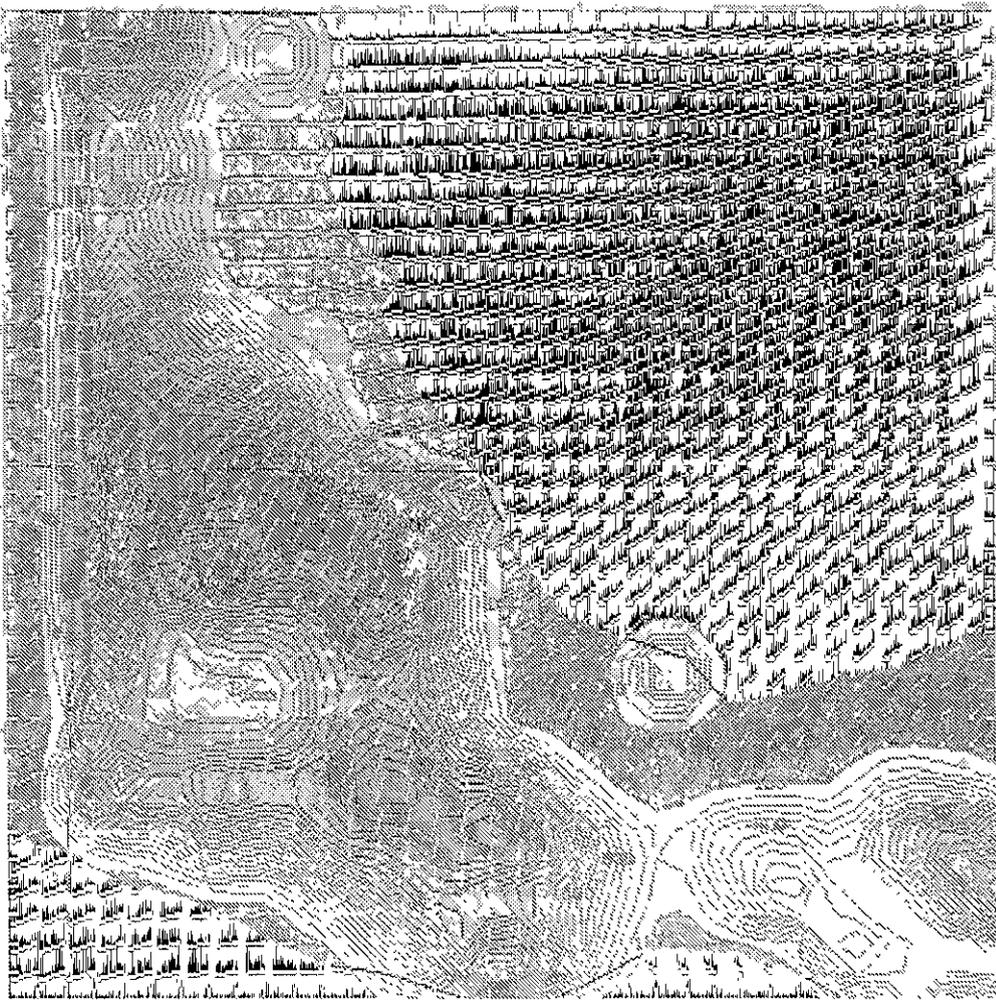


Fig. 5.26: Topografía de la región bajo estuario (de río completo -
junto de 75° a 22° H y de 5° a 59° L).



$\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$ $\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$ 10^3 10^4
 colorbar $\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ $-50000-0$ 50000 100.0 150.0

Fig. 5.20: Vectores de velocidad del viento para una altura $z = 11.1 \text{ m}$ y en los 8 de nivel de la topografía de la región (malla grande)

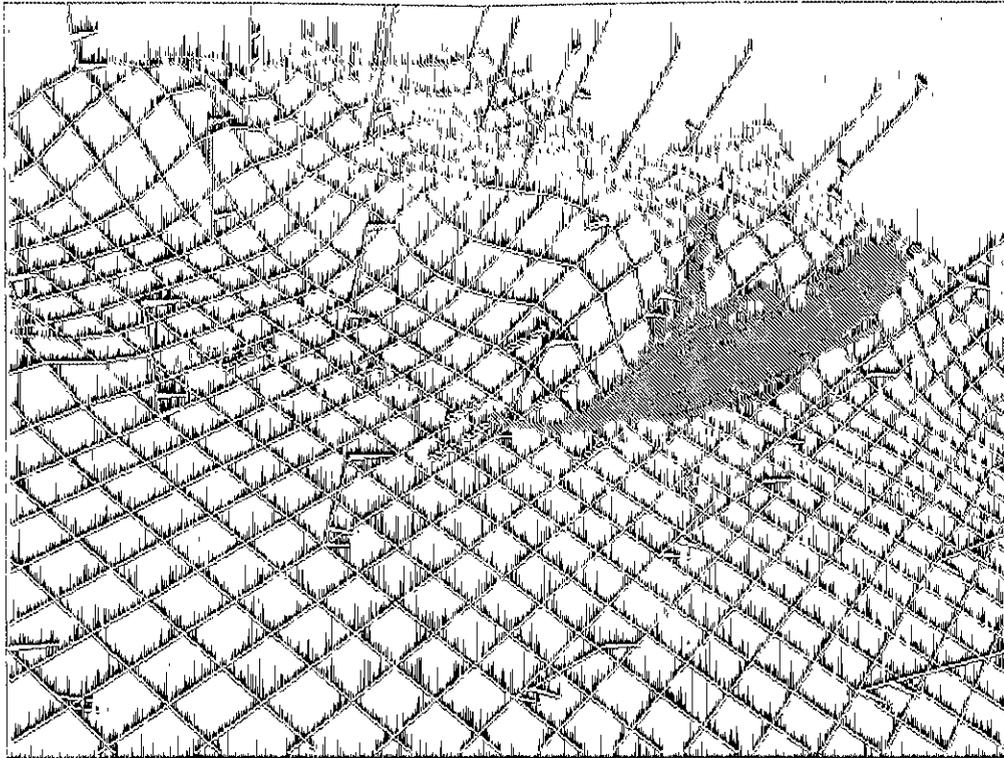


Fig. 5.29: Trayectoria de la nube de radionúclidos (vista desde noreste); inicio de la simulación 0800 hrs de tiempo local, fin de la simulación 2400 hrs, para el día 4 de marzo de 1997.

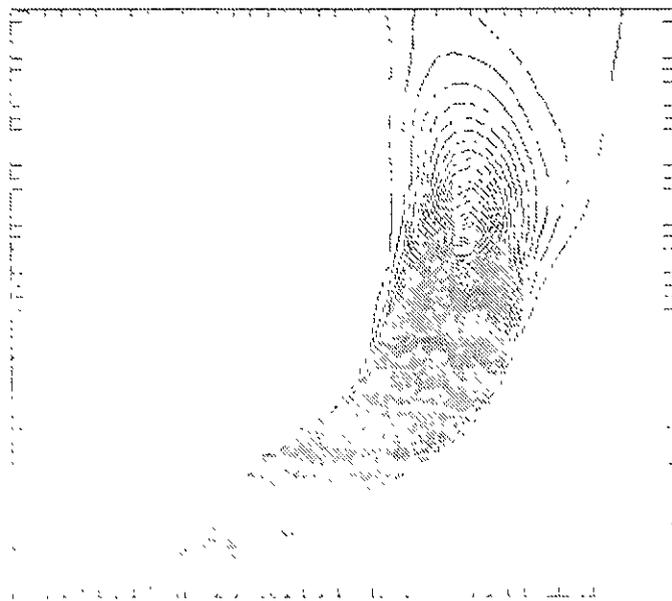


Fig. 5.29: Contorno de concentración de radionúclidos (Ci m^{-3}) en el día 4 de marzo de 1997, con una resolución de 500 m (altura de 0 m).

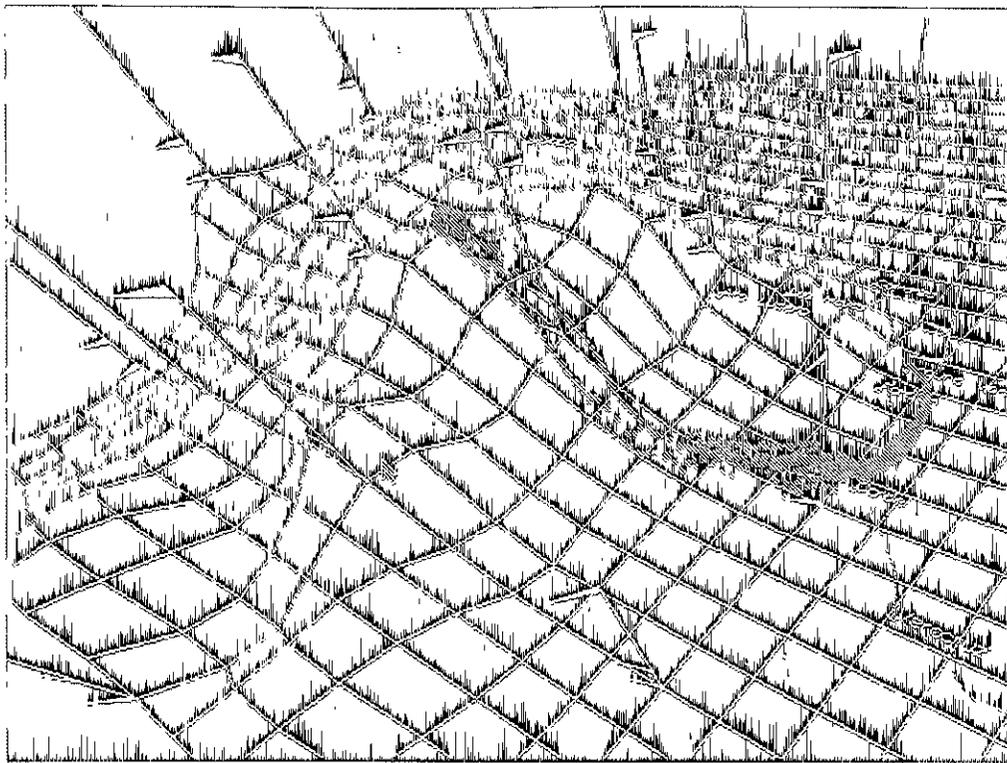


Fig. 5.31: Trayectoria de la nube de radionúclidos (vista desde sureste); inicio de la simulación 0600 hrs de tiempo local, fin de la simulación 2200 hrs, para el día 1 de febrero de 1999.

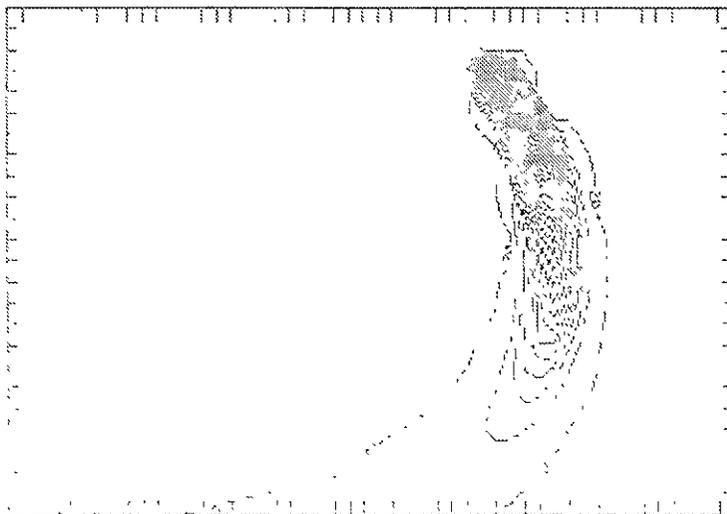


Fig. 5.32: Campos de isocóncntraciones de radionúclidos (en $\mu\text{Ci}/\text{m}^3$) para el día 1 de febrero de 1999, en una relación de 23 a 2×10^4 con 1 a 10^6 .

Es importante comentar que el efecto de brisa sobre el transporte y dispersión de la nube no se puede estudiar utilizando los modelos gaussianos. La ventaja de usar un modelo euleriano-lagrangiano (partículas acopladas con un modelo regional de pronóstico de campos de vientos en 3-D), como el desarrollado en este trabajo, es que se puede tomar en cuenta tanto la influencia de las montañas como el efecto de la brisa costera.

De acuerdo a los resultados mostrados en las figuras 5.30 y 5.32, puede decirse que el modelo "puff-partícula" (ver sección 3.2.3) es capaz de predecir una concentración de radionúclidos suavizada (sin ruido estadístico) en las zonas costeras con topografía compleja.

Para calcular las dosis radiológicas, se debe tomar en cuenta la radioactividad que representa cada partícula lagrangiana (Bq) y utilizar la ecuación 3.10 (ver sección 3.3) o bien utilizar el modelo simple de concentración uniforme (ver sección 2.1), en el cual la tasa de dosis se calcula a partir de la concentración local. En este trabajo no se presenta el cálculo de las dosis radiológicas en la zona de montañas, debido a que no se cuenta con información relacionada con el término fuente de la liberación.

Capítulo 6

Conclusiones

6.1 Recapitulación

Se presenta un modelo de partículas para predecir la trayectoria, la concentración en aire y la tasa de la dosis radiológica de una nube de radionúclidos que se libera a la atmósfera, en el caso de un accidente en una central nuclear.

Se estudiaron los fenómenos físicos que se presentan en un flujo atmosférico, así como el transporte y la dispersión turbulenta de los efluentes liberados.

Debido a que los datos experimentales de las dosis directas de γ recibidas por la población, en caso de una liberación accidental de radionúclidos, es difícil de conseguir, el modelo lagrangiano propuesto, se validó únicamente con los datos del experimento de "Green Glow" y de "Prairie Grass". Las dosis radiológicas obtenidas con el modelo lagrangiano propuesto se compararon con modelos propuestos por otros autores.

Los datos de las dosis radiológicas no están disponibles debido a la naturaleza secreta (confidencial) de las liberaciones (ya sean accidentales o programadas) de radionúclidos a la atmósfera. Además la generación de datos experimentales es imposible debido a que a partir de 1959 fueron prohibidos los experimentos con liberaciones de radionúclidos a la atmósfera [81], debido al deterioro del medio ambiente debido y aumento en el riesgo de cáncer. Adicionalmente a las razones antes mencionadas, se puede comentar que llevar a cabo un experimento de esta naturaleza en una región de meso-escala, requiere de participación conjunta de diversas áreas de investigación (tales como: ingeniería nuclear, protección radiológica, meteorológica, física y química de la atmósfera, etc.) y requiere de inversiones económicas considerables.

En este trabajo, se presentan los fundamentos teóricos y computacionales, en los cuales se basan los métodos de cálculo de dosis radiológica, los modelos lagrangianos de dispersión y concentración de partículas y algunos de los modelos meteorológicos que se usan actualmente para predecir campos de vientos. El modelo euleriano-lagrangiano propuesto en este trabajo, tiene características que lo hacen único tales como: (i) acoplamiento directo entre el modelo de partículas y el modelo de campo de viento y (ii) se hace uso de un modelo lagrangiano para el cálculo de la dosis radiológica. Un modelo con características semejantes no es utilizado en los códigos comerciales actualmente en uso en la industria nuclear.

Se concluye que los métodos lagrangianos son capaces de calcular la dosis ra-

diológicas, concentración y la dispersión atmosférica en una región de meso-escala. Estos modelos pueden tomar en cuenta el cortante vertical de viento, el cual es difícil de incorporar en los modelos gaussianos anteriormente publicados por otros autores. Los modelos gaussianos y los simples de concentración uniforme, sólo se pueden usar para calcular las dosis radiológicas a lo largo del eje central de la nube hasta distancias del orden de 10-20 km. Las curvas de coeficientes de dispersión de Pasquill-Gifford son válidas únicamente para liberaciones a nivel de superficie y para terrenos lisos. La corrección en σ_y , por Pasquill (1977), se puede usar para calcular la dispersión usando el modelo gaussiano para tomar en cuenta el efecto del cortante vertical de viento, únicamente para liberaciones a nivel de superficie.

La simulación numérica de la dispersión de partículas, en un flujo con turbulencia uniforme no se resuelve la ecuación de la velocidad vertical. La ecuación de la trayectoria de partícula se modifica para tomar en cuenta el gradiente vertical de la turbulencia por un término extra lo cual garantiza el cumplimiento de la condición de mezcla ("well mixed"). Con esta modificación el modelo lagrangiano reproduce satisfactoriamente las curvas empíricas de la dispersión de Pasquill (1977), donde, toma en cuenta el cortante vertical de viento.

Debido a que los modelos de predicción de campo de vientos requieren de condiciones iniciales y de frontera para resolver las ecuaciones del movimiento de fluido, se utilizó el base de datos de NCEP de US-NOAA.

Para calcular la trayectoria y dispersión de una nube de radionúclidos en una zona con topografía compleja, los campos de vientos fueron calculados utilizando una versión modificada de RAMS, la cual se desarrolló durante la presente investigación. Esta versión de RAMS está acoplada de manera directa con el modelo lagrangiano de dispersión de partículas. Esto último permite dispersar las partículas con un campo de viento con resolución temporal muy fina (del orden de 10 s). Este tipo de acoplamiento ("on-line") entre un modelo euleriano de campo de viento y un modelo lagrangiano de partículas, no se ha reportado anteriormente. El acoplamiento "off-line" que originalmente tiene el código RAMS con el modulo HYPACT, usa los campos de vientos almacenados con una resolución temporal del orden de una hora.

Es conveniente mencionar que el tiempo de cómputo que se consumió durante el desarrollo de esta tesis, hizo uso de las (estaciones de trabajo) de procesamiento rápido como: Cray-YMP y Onix-Silicon Graphics 8 procesadores R-10,000 DGSCA-UNAM, Origin-Silicon Graphics 8 procesadores R-10,000, ININ, 1 Estación de trabajo IBM, 2 procesador, ININ).

6.2 Trabajo de investigación a futuro

Algunos de los temas que se sugiere desarrollar son los siguientes:

En la simulación de la capa límite atmosférica, se usaron formulaciones empíricas y el modelo $E - c$ para calcular las características turbulentas de la atmósfera tales como: fluctuaciones de la velocidad del viento, vida media de los remolinos turbulentos, etc., sin embargo sería muy conveniente usar un modelo de esfuerzos de Reynolds.

Para calcular la concentración se usó la técnica puff-partículas, para obtener mejores resultados estadísticamente, se propone usar una técnica similar para calcular las dosis radiológicas, considerando a las partículas lagrangianas como fuentes de volúmenes y no puntuales.

El modelo de dispersión de partículas que se presentó en este trabajo, genera las fluctuaciones de velocidad (remolinos turbulentos), como números aleatorios independientes, se propone que se incorpore un modelo de cadenas de Markov para que las fluctuaciones de velocidad se generen, al menos con un paso de "memoria".

En el modelo de dispersión, la vida media de los remolinos turbulentos únicamente era función de la posición, sin embargo se han propuesto otros modelos que lo generan como un número aleatorio desde una distribución exponencial o gaussiana con la media conocida.

En el modelo únicamente se obtienen promedios estadísticos de grupo, los cuales se llevan a cabo en un volumen de control. Esto conduce a obtener propiedades promedio de la fase dispersa desde un punto de vista Euleriano. Se propone realizar promedios estadísticos a lo largo de la trayectoria de las partículas, de tal manera que se logre recuperar información estadística que sirva para determinar, tanto el coeficiente de correlación lagrangiano de las partículas, como el coeficiente de correlación lagrangiano de los elementos de fluido que interactúan con la fase dispersa.

El modelo de la dispersión, considera que los remolinos turbulentos tienen la misma escala de tiempo en las direcciones x , y y z . Debido que en la atmósfera la turbulencia es anisótropa, se propone que en el modelo se incluyan escalas características de los remolinos sean diferentes en las tres direcciones.

Se propone probar el modelo de partículas para calcular las dosis radiológicas de una superficie contaminada por radionúclidos. La concentración de superficie se puede comparar con los datos de Europa del este que fue contaminada por el accidente de Chernobyl.

Finalmente, se considera conveniente que el modelo de dispersión, concentración y dosis radiológicas sea tomado en cuenta para formar parte del núcleo computacional de los sistemas de alerta y aviso oportuno que existen debido a la operación de las plantas nucleares de potencia en el mundo.

Apéndice A

A.1 Determinación de la estabilidad atmosférica

El uso del modelo gaussiano para calcular la concentración (ver ecuación 2.3) requiere de los coeficientes de dispersión σ_y y σ_z y en consecuencia del conocimiento de la estabilidad atmosférica. La estabilidad atmosférica se estima entre otros parámetros, a partir de la velocidad del viento, del gradiente vertical de la temperatura, de la insolación solar y de la cobertura del cielo por las nubes durante la noche. Pasquill (1974) presenta el siguiente método (ver Tabla A.1) para determinar la estabilidad atmosférica, basada en la velocidad del viento a 10 m de altura, insolación solar (fuerte, moderada y ligera) y cobertura del cielo por las nubes (condiciones nocturnas):

Otro método para determinar la estabilidad atmosférica el cual se basa en la información de la radiación solar diurna y en la radiación nocturna total, se presenta en la tabla A.2 [14]:

Un método sencillo para determinar la estabilidad atmosférica el cual se basa en el gradiente vertical de la temperatura usa la tabla A.3:

El Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA) [14] ha publicado una gráfica en la cual se relaciona el flujo de calor en la superficie y la velocidad del viento con la estabilidad atmosférica, a partir de la definición de un parámetro p el cual es una función continua (ver figura A.1). También el OIEA ha presentado otra gráfica la cual relaciona la estabilidad atmosférica con la longitud de Monin-Obukhov (ver figura A.2).

Tabla A.1: Categorías de estabilidad según Pasquill.

A=Extremadamente inestable			D=Neutra		
B=Moderadamente inestable			E=Ligeramente estable		
C=Ligeramente inestable			F=Moderadamente estable		
<i>viento (m/s)</i>	<i>fuerte</i>	<i>moderada</i> ^a	<i>ligera</i>	<i>cobertura de nubes</i>	<i>cobertura de nubes</i>
2 - 3	A - B	B	C	E	F
3 - 5	B	B - C	C	D	E
5 - 6	C	C - D	D	D	D
> 6	D - B	D	D	D	D

^a“Insolación ”moderada” significa la cantidad de radiación solar incidente cuando el cielo está despejado y la altura del sol está comprendida entre 35°y 60°.

Tabla A.2: Categorías de estabilidad atmosférica utilizando la radiación solar y la radiación total nocturna.

Velocidad del viento (m/s)	Radiación solar ^a (ly hr ⁻¹)				Radiación nocturna (ly hr ⁻¹)		
	≥ 50	50 - 25	25 - 12.5	< 12.5	> -1.8	-1.8 - -3.6	≤ -3.6
< 2	A	A - B	B	D	D	-	-
2 - 3	A - B	B	C	D	D	E	F
3 - 4	B	B - C	C	D	D	D	E
4 - 6	C	C - D	D	D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D	D	D

^a1 ly = 1 langley = 1 cal cm⁻¹ = 4.187 J cm⁻¹.

Tabla A.3: Categorías de estabilidad utilizando el gradiente de la temperatura.

Velocidad del viento (m/s)	Gradiente de la temperatura (°C/100 m)						
	≤ -1.5	-1.4 - -1.2	-1.1 - -0.9	-0.8 - -0.7	-0.6 - 0.0	0.1 - 2	> 2
< 1	A	A	B	C	D	F	F
1-1.9	A	A	B	C	D	F	F
2-2.9	A	A	B	C	D	F	F
3-4.9	A	A	B	C	D	F	F
5-6.9	A	A	B	C	D	F	F
>7	D	D	D	D	D	D	D

Sin embargo utilizar las gráficas anteriores requiere información de parámetros físicos (flujo de calor y longitud de Monin-Obukhov) los cuales son difíciles de medir. Por lo tanto, el uso de las tablas A.1-A.3, las cuales utilizan la información de la insolación solar, la velocidad del viento y el gradiente vertical de temperatura, es muy común.

Una vez que la estabilidad atmosférica es conocida, los coeficientes de dispersión $\sigma - y$ y $\sigma - z$ se obtienen a partir de las curvas de Pasquill-Gifford (P-G) [8] (ver figuras A.3(a)-A.3(b)).

Se han publicado relaciones analíticas de los parámetros de dispersión que aparecen en la figura A.3, haciendo un ajuste de mínimos cuadrados, lo que resulta en las siguientes relaciones:

$$\sigma_{yi} = a_i x^{b_i}$$

$$\sigma_{zi} = c_i x^{d_i}$$

donde, i corresponde a la categoría de estabilidad de Pasquill-Gifford (A-F), a, b, c y d son constantes empíricas que se presentan en la tabla A.4) y x es la distancia desde la fuente de liberación, en metros.

Los valores de σ_y y σ_z obtenidos a partir de las relaciones analíticas deben ser modificados considerando el tiempo de muestreo y la rugosidad de la superficie, es decir:

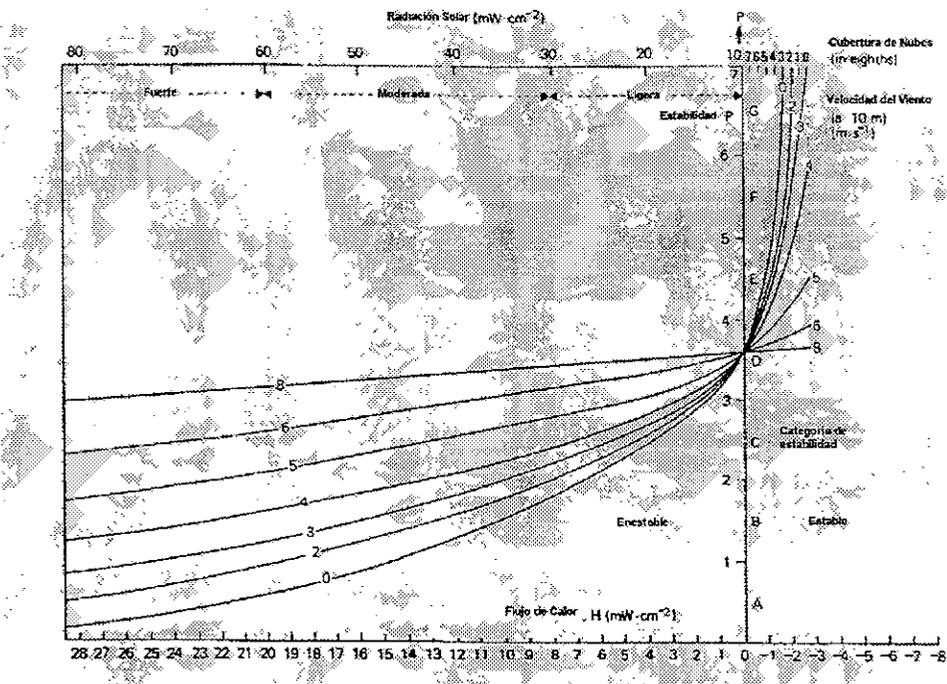


Fig. A.1: Determinación del parámetro p de la estabilidad atmosférica basado en el flujo de calor y la velocidad del viento

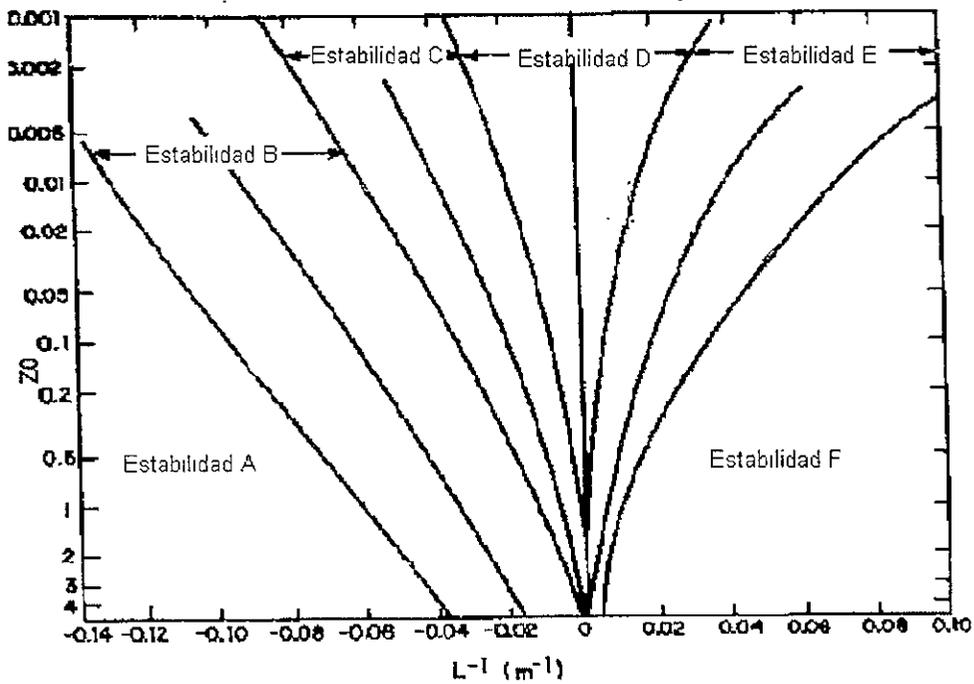
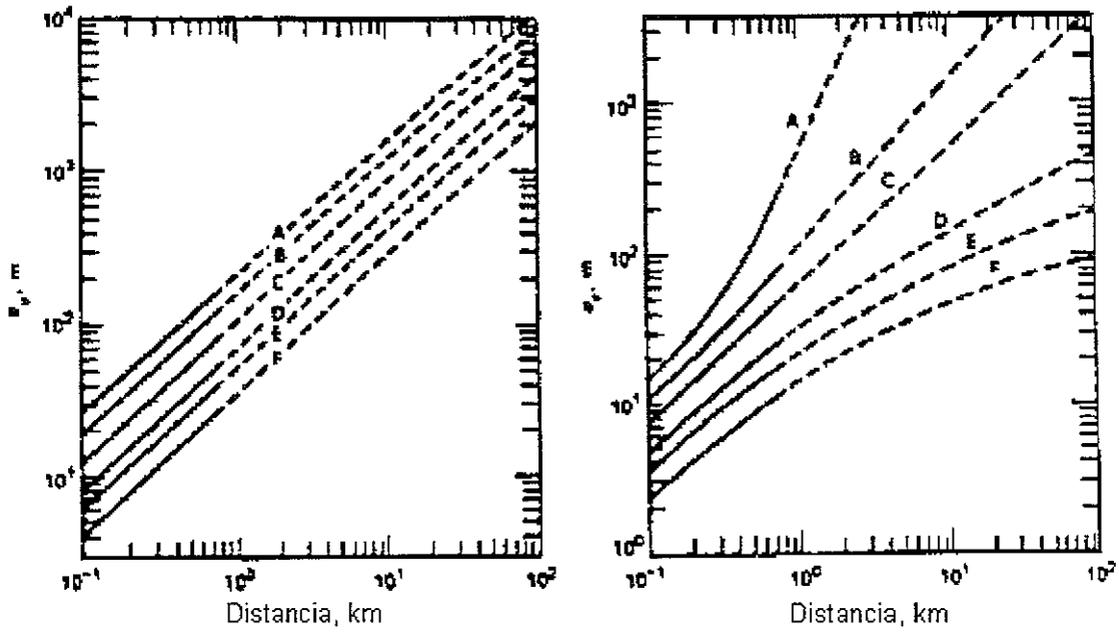


Fig. A.2: Relación de la estabilidad atmosférica con la longitud de Monin-Obukhov



Figs. A.3(a)-(b): Curvas de Pasquill-Gifford (P-G) para las direcciones horizontal y vertical, editada de la de Gifford (1961).

Tabla A.4: Valores de las constantes para determinar los parámetros de dispersión σ .

<i>Estabilidad</i>		<i>Valores de las constantes</i>			
P - G	i	a_i	b_i	c_i	d_i
A	1	0.3658	0.9031	0.00025	2.125
B	2	0.2751	0.9031	0.0019	1.6021
C	3	0.2089	0.9031	0.2	0.8543
D	4	0.1474	0.9031	0.3	0.6532
E	5	0.1046	0.9031	0.4	0.6021
F	6	0.0722	0.9031	0.2	0.6020

Tabla A.5: Valores aproximados del parámetro n de rugosidad para varios tipos de superficie.

<i>Tipo de superficie</i>	z_0 (cm)
césped	1
hierba alta	10 - 15
campo	30
suburbios	100
bosques	20 - 200
ciudades	100 - 300

$$\sigma_y = \sigma_{y(P-G)}(T/3)^n$$

$$\sigma_z = \sigma_{z(P-G)}(z_0/3)^n$$

donde, T es el tiempo de muestreo (min), z_0 es la altura de la rugosidad (cm), y n es igual a 0.2 cuando el valor de T se encuentra entre 3 y 60 minutos y n es igual a 0.25 cuando T es mayor que 60 min. El parámetro de rugosidad n para diferentes tipos de superficie se presenta en la tabla A.5:

Las curvas de σ_z como función de la estabilidad atmosférica para un terreno con rugosidad de 30 cm, han sido también publicadas en la literatura [27], (ver figura A.4).

Los coeficientes de dispersión σ_y y σ_z de P-G deben ser utilizados únicamente para calcular la concentración de una nube que se libera cerca de la superficie terrestre, para liberaciones que tienen lugar a una altura de 50, 100 o 180 m se han generado las siguientes relaciones empíricas [14]:

$$\sigma_y = p_y(x)^{q_y}$$

$$\sigma_z = p_z(x)^{q_z}$$

donde, x es la distancia (metros), desde el punto de liberación, y p_y, q_y, p_z, q_z son constantes empíricas cuyos valores se presentan en la tabla A.6.

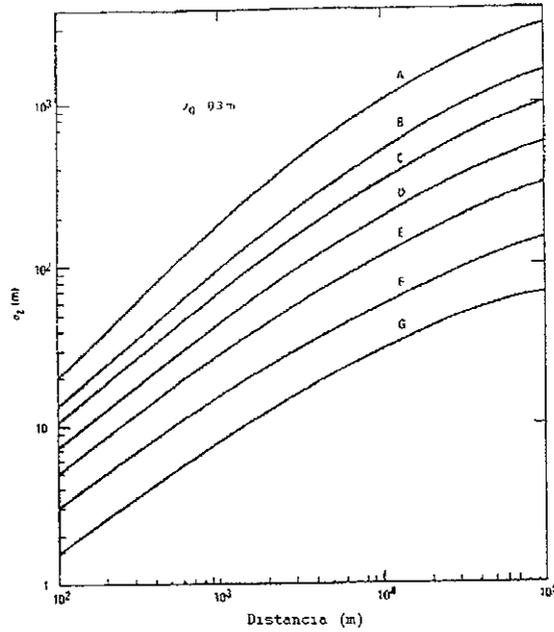


Fig. A.4: Curvas de σ_z para un terreno con rugosidad de 30 cm [27]

Tabla A.6: Coeficientes empíricos usados para determinar los parámetros σ_y y σ_z basados en mediciones en las ciudades de Julich y Karlsruhe [14].

Altura de liberación ^a	Categoría de difusión						
	Coeficiente	A	B	C	D	E	F
50 m	p_y	1.503	0.876	0.659	0.640	0.801	1.294
	q_y	0.833	0.823	0.807	0.784	0.754	0.718
	p_z	0.151	0.127	0.165	0.215	0.264	0.241
	q_z	1.219	1.108	0.996	0.885	0.774	0.662
100 m	p_y	0.170	0.324	0.466	0.504	0.441	0.253
	q_y	1.296	1.025	0.866	0.818	0.882	1.057
	p_z	0.051	0.070	0.137	0.265	0.487	0.717
	q_z	1.317	1.151	0.985	0.818	0.652	0.486
180 m	p_y	0.671	0.415	0.232	0.208	0.345	0.671
	q_y	0.903	0.903	0.903	0.903	0.903	0.903
	p_z	0.025	0.033	0.104	0.307	0.546	0.484
	q_z	1.500	1.320	0.997	0.734	0.557	0.500

^apueden ser interpoladas para otras alturas de la liberación

A.2 Ecuación de convección-difusión en coordenadas generalizadas

Únicamente se transforma la coordenada vertical para la simulación de los flujos atmosféricos según Pielke [82].

La forma funcional de la transformación de las coordenadas se puede escribir como:

$$\begin{aligned} x^1 &= z^1 & z^1 &= x^1 \\ x^2 &= z^2 & z^2 &= x^2 \\ x^3 &= \sigma(z^1, z^2, z^3) & z^3 &= h(x^1, x^2, x^3), \end{aligned}$$

donde las x^i son coordenadas generalizadas y las z^i son las cartesianas.

La forma funcional de σ se representa:

$$\sigma = \frac{s(z^3 - z_g)}{s - z_g},$$

donde s es la altura del tope y z_g es la altura del terreno como función de z^1 y z^2 . Este tipo de transformación conforme el terreno se llama σ representación [83].

Por lo tanto la forma de h se ve como:

$$h = \left(\frac{\sigma}{s}\right) [s - z_g(x^1, x^2)] + z_g(x^1, x^2),$$

Con el uso de este tipo de transformación de coordenadas se simplifica mucho la aplicación de las condiciones de frontera [84].

La forma contravariante y covariante del tensor métrico está dada por [85]:

$$\mathbf{g}^{ij} = \frac{\partial x^i}{\partial z^l} \frac{\partial x^j}{\partial z^l} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \frac{\partial \sigma}{\partial z^1} \\ 0 & 1 & \frac{\partial \sigma}{\partial z^2} \\ \frac{\partial \sigma}{\partial z^1} & \frac{\partial \sigma}{\partial z^2} & \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z^1}\right)^2 + \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z^2}\right)^2 + \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z^3}\right)^2 \end{bmatrix} \quad (\text{A.1})$$

$$\mathbf{g}_{ij} = \frac{\partial z^l}{\partial x^i} \frac{\partial z^l}{\partial x^j} = \begin{bmatrix} 1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x^1}\right)^2 & \frac{\partial h}{\partial x^1} \frac{\partial h}{\partial x^2} & \frac{\partial h}{\partial x^1} \frac{\partial h}{\partial x^3} \\ \frac{\partial h}{\partial x^1} \frac{\partial h}{\partial x^2} & 1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x^2}\right)^2 & \frac{\partial h}{\partial x^2} \frac{\partial h}{\partial x^3} \\ \frac{\partial h}{\partial x^1} \frac{\partial h}{\partial x^3} & \frac{\partial h}{\partial x^2} \frac{\partial h}{\partial x^3} & \left(\frac{\partial h}{\partial x^3}\right)^2 \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$

Donde los términos de diferenciales parciales se calculan a partir de las siguientes:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial z^1} = \frac{\partial z_g}{\partial z^1} \left(\frac{\sigma-s}{s-z_g} \right), \quad \frac{\partial \sigma}{\partial z^2} = \frac{\partial z_g}{\partial z^2} \left(\frac{\sigma-s}{s-z_g} \right), \quad \frac{\partial \sigma}{\partial z^3} = \frac{s}{s-z_g};$$

$$\frac{\partial h}{\partial x^1} = \frac{\partial z_g}{\partial x^1} \left(\frac{s-\sigma}{s} \right), \quad \frac{\partial h}{\partial x^2} = \frac{\partial z_g}{\partial x^2} \left(\frac{s-\sigma}{s} \right), \quad \frac{\partial h}{\partial \sigma} = \frac{s-z_g}{s};$$

El determinante del jacobiano de transformación $\left(\frac{\partial x^i}{\partial z^l} \right)$ está dada por:

$$\left| \frac{\partial x^i}{\partial z^l} \right| = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{\partial \sigma}{\partial z^1} & \frac{\partial \sigma}{\partial z^2} & \frac{\partial \sigma}{\partial z^3} \end{vmatrix} \quad (\text{A.3})$$

El determinante del jacobiano inverso de la transformación $\left(\left| \frac{\partial z^l}{\partial x^i} \right| = \sqrt{g} \right)$ está dada por:

$$\left| \frac{\partial z^l}{\partial x^i} \right| = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{\partial h}{\partial x^1} & \frac{\partial h}{\partial x^2} & \frac{\partial h}{\partial x^3} \end{vmatrix} \quad (\text{A.4})$$

Por lo tanto

$$\sqrt{g} = \frac{\partial h}{\partial x^3} \equiv \frac{\partial h}{\partial \sigma}$$

Los vectores de base tangente y normales para este sistema de coordenadas generalizadas en términos de la representación rectangular son las siguientes:

$$g_1 = \mathbf{i} + \mathbf{k} \frac{\partial h}{\partial x^1}, \quad g_2 = \mathbf{j} + \mathbf{k} \frac{\partial h}{\partial x^2}, \quad g_3 = \mathbf{k} \frac{\partial h}{\partial x^3},$$

y los normales

$$g^1 = \mathbf{i}, \quad g^2 = \mathbf{j} \quad y \quad g^3 = \mathbf{i} \frac{\partial \sigma}{\partial z^1} + \mathbf{j} \frac{\partial \sigma}{\partial z^2} + \mathbf{k} \frac{\partial \sigma}{\partial z^3}$$

Se nota que este sistema de coordenadas no es ortogonal, porque el producto punto de los vectores tangentes $(g_i \cdot g_j)$ no es cero, cuando $i \neq j$.

Las componentes individuales contravariantes y covariantes de la velocidad se calcula de $u^i = \mathbf{g}^i \cdot \mathbf{u}$, y $u_i = \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{u}$, respectivamente, donde $\mathbf{u} = u\mathbf{i} + v\mathbf{j} + w\mathbf{k}$, por lo tanto:

$$\begin{aligned} u^1 &= u, & u_1 &= u + \frac{\partial h}{\partial x^1} w \\ u^2 &= v, & u_2 &= v + \frac{\partial h}{\partial x^2} w \\ u^3 &= u \frac{\partial \sigma}{\partial x} + v \frac{\partial \sigma}{\partial y} + w \frac{\partial \sigma}{\partial z}, & u_3 &= \frac{\partial h}{\partial x^2} w \end{aligned}$$

Donde los valores de las derivadas parciales se deben de sustituir de las relaciones antes mencionadas.

Ahora usando la transformación anterior los términos convectivos y difusivos de las ecuaciones de flujos atmosféricos se cambian por las siguientes:

En forma conservativa la divergencia de un campo vectorial \mathbf{T} :

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{T} = \frac{1}{|J^{-1}|} \sum_{i=1}^3 \left[\frac{\partial}{\partial x^i} \{ \mathbf{T} \cdot (g_i \times g_k) \} \right], \quad (\text{A.5})$$

y en forma no-conservativa:

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{T} = \frac{1}{|J^{-1}|} \sum_{i=1}^3 \left[\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial x^i} \cdot (g_i \times g_k) \right], \quad (\text{A.6})$$

El gradiente de \mathbf{T} está dado (en forma conservativa) por:

$$\vec{\nabla} \mathbf{T} = \frac{1}{|J^{-1}|} \sum_{i=1}^3 \left[\frac{\partial}{\partial x^i} \left((g_i \times g_k) \mathbf{T} \right) \right], \quad (\text{A.7})$$

y en forma no-conservativa:

$$\vec{\nabla} \mathbf{T} = \frac{1}{|J^{-1}|} \sum_{i=1}^3 \left[(g_i \times g_k) \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial x^i} \right], \quad (\text{A.8})$$

El laplaciano del \mathbf{T} en forma conservativa se ve:

$$\vec{\nabla}^2 \mathbf{T} = \frac{1}{|J^{-1}|} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^i} \left[\sum_{l=1}^3 \frac{1}{|J^{-1}|} \left((g_i \times g_k) \cdot \frac{\partial}{\partial x^l} (g_m \times g_n) \mathbf{T} \right) \right], \quad (\text{A.9})$$

donde i,j,k y l,m,n son cíclicos.

y en forma no-conservativa:

$$\vec{\nabla}^2 \mathbf{T} = \frac{1}{|J^{-1}|} \sum_{i=1}^3 \sum_{l=1}^3 (g_i \times g_k) \frac{\partial}{\partial x^i} \left[\frac{1}{|J^{-1}|} (g_m \times g_n) \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial x^l} \right], \quad (\text{A.10})$$

donde i,j,k y l,m,n son cíclicos.

Utilizando la propiedad

$$\vec{g}^i = \frac{\vec{g}^i \times \vec{g}^i}{|J^{-1}|},$$

el producto vectorial de los vectores base covariante g_i , en las ecuaciones anteriores se puede reemplazar por el vector base contravariante g^i por el determinante $|J^{-1}|$:

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{T} = \frac{1}{|J^{-1}|} \frac{\partial}{\partial x^i} \left[\mathbf{T} \cdot |J^{-1}| \vec{g}^i \right], \quad (\text{A.11})$$

$$\vec{\nabla} \mathbf{T} = \frac{1}{|J^{-1}|} \frac{\partial}{\partial x^i} \left[|J^{-1}| \vec{g}_i^t \mathbf{T} \right], \quad (\text{A.12})$$

$$\vec{\nabla}^2 \mathbf{T} = \frac{1}{|J^{-1}|} \frac{\partial}{\partial x^i} \left[\vec{g}^i \cdot \frac{\partial}{\partial x^l} \left(|J^{-1}| \vec{g}^l \mathbf{T} \right) \right], \quad (\text{A.13})$$

y en forma no-conservativa:

$$\vec{\nabla}^2 \mathbf{T} = \frac{1}{|J^{-1}|} \frac{\partial}{\partial x^i} \left[|J^{-1}| g^{il} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial x^l} \right], \quad (\text{A.14})$$

Utilizando las relaciones desarrolladas anteriormente la ecuación de convección difusión como:

$$\mathbf{A}_t + \vec{\nabla} \cdot (\vec{u} \mathbf{A}) + \vec{\nabla} \cdot (\nu \vec{\nabla} \mathbf{A}) + \mathbf{S} = 0 \quad (\text{A.15})$$

se ve como lo siguiente:

$$\left(|J^{-1}| \mathbf{A} \right)_t + \frac{\partial}{\partial x^i} \left[|J^{-1}| \mathbf{A} U^i + \nu \vec{g}^i \cdot \frac{\partial}{\partial x^l} \left(|J^{-1}| \vec{g}^l \mathbf{A} \right) \right] + |J^{-1}| \mathbf{S} = 0 \quad (\text{A.16})$$

donde $U^i = \vec{g}^i \cdot \left(\vec{u} \cdot \vec{Z} \right) \mathbf{A}$

Si se expande la derivada con respecto a x^l y usando que:

$$\mathbf{A} \frac{\partial}{\partial x^l} \left[|J^{-1}| \vec{g}^l \right] = 0$$

La ecuación de convección difusión se ve como:

$$\left(|J^{-1}| \mathbf{A} \right)_t + \frac{\partial}{\partial x^i} \left[|J^{-1}| \left(\mathbf{A} U^i + \nu \vec{g}^i \cdot \vec{g}^l \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x^l} \right) \right] + |J^{-1}| \mathbf{S} = 0 \quad (\text{A.17})$$

Si $\mathbf{A} = \rho\phi$, la ecuación anterior se desarrolla:

$$\begin{aligned} & \left(|J^{-1}| \rho\phi \right)_t + \frac{\partial}{\partial x^1} \left[|J^{-1}| \left(\rho\phi U^1 + \mu \left(g^{11} \frac{\partial \phi}{\partial x^1} + g^{12} \frac{\partial \phi}{\partial x^2} + g^{13} \frac{\partial \phi}{\partial x^3} \right) \right) \right] + \\ & \quad + \frac{\partial}{\partial x^2} \left[|J^{-1}| \left(\rho\phi U^2 + \mu \left(g^{21} \frac{\partial \phi}{\partial x^1} + g^{22} \frac{\partial \phi}{\partial x^2} + g^{23} \frac{\partial \phi}{\partial x^3} \right) \right) \right] + \\ & \quad + \frac{\partial}{\partial x^3} \left[|J^{-1}| \left(\rho\phi U^3 + \mu \left(g^{31} \frac{\partial \phi}{\partial x^1} + g^{32} \frac{\partial \phi}{\partial x^2} + g^{33} \frac{\partial \phi}{\partial x^3} \right) \right) \right] + |J^{-1}| \mathbf{S} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

En forma de los vectores de área \vec{A}^i , donde $\vec{A}^i = \vec{g}^i |J^{-1}| dx^j dx^k$, la ecuación anterior se escribe como:

$$\begin{aligned} & \left(|J^{-1}| \rho\phi \right)_t + \quad (\text{A.19}) \\ & \frac{\partial}{\partial x^1} \left[\frac{\rho\phi \vec{A}^1 \cdot \vec{u}}{dx^2 dx^3} + \frac{\mu}{|J^{-1}|} \left(\frac{\vec{A}^1 \cdot \vec{A}^1}{(dx^2 dx^3)^2} \frac{\partial \phi}{\partial x^1} + \frac{\vec{A}^1 \cdot \vec{A}^2}{dx^2 dx^3 dx^3 dx^1} \frac{\partial \phi}{\partial x^2} + \frac{\vec{A}^1 \cdot \vec{A}^3}{dx^2 dx^3 dx^1 dx^2} \frac{\partial \phi}{\partial x^3} \right) \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial x^2} \left[\frac{\rho\phi \vec{A}^2 \cdot \vec{u}}{dx^3 dx^1} + \frac{\mu}{|J^{-1}|} \left(\frac{\vec{A}^2 \cdot \vec{A}^1}{dx^3 dx^1 dx^2 dx^3} \frac{\partial \phi}{\partial x^1} + \frac{\vec{A}^2 \cdot \vec{A}^2}{(dx^3 dx^1)^2} \frac{\partial \phi}{\partial x^2} + \frac{\vec{A}^2 \cdot \vec{A}^3}{dx^3 dx^1 dx^1 dx^2} \frac{\partial \phi}{\partial x^3} \right) \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial x^3} \left[\frac{\rho\phi \vec{A}^3 \cdot \vec{u}}{dx^1 dx^2} + \frac{\mu}{|J^{-1}|} \left(\frac{\vec{A}^3 \cdot \vec{A}^1}{dx^1 dx^2 dx^2 dx^3} \frac{\partial \phi}{\partial x^1} + \frac{\vec{A}^3 \cdot \vec{A}^2}{dx^1 dx^2 dx^3 dx^1} \frac{\partial \phi}{\partial x^2} + \frac{\vec{A}^3 \cdot \vec{A}^3}{(dx^3 dx^3)^2} \frac{\partial \phi}{\partial x^3} \right) \right] + \\ & |J^{-1}| \mathbf{S} = 0 \end{aligned}$$

A.3 Programa para evaluar la triple integral del modelo gaussiano

* Program to calculate tripple dose rate integral for a gaussian plume.

D01FBF Example Program Text

Mark 14 Revised. NAG Copyright 1989.

common x0, rht, Y0, Z0

.. Parameters ..

INTEGER NDIM, LWAMAX

PARAMETER (NDIM=3,LWAMAX=24)

INTEGER NOUT

PARAMETER (NOUT=6)

.. Local Scalars ..

DOUBLE PRECISION A, ANS, B, X0, rht

INTEGER I, IFAIL, ITYPE, IW, LWA

.. Local Arrays ..

DOUBLE PRECISION ABSCIS(LWAMAX), WEIGHT(LWAMAX)

INTEGER NPTVEC(NDIM)

.. External Functions ..

DOUBLE PRECISION D01FBF, FUN, SIGY, SIGZ, DX

EXTERNAL D01FBF, FUN, SIGY, SIGZ

.. External Subroutines ..

EXTERNAL D01BAW, D01BAX, D01BAY, D01BAZ, D01BBF

.. Data statements ..

DATA NPTVEC/24, 24, 24/

.. Executable Statements ..

WRITE (NOUT,*) 'D01FBF Test Program Results'

ANSF=0.0

X0=0.0

32 continue

if(X0.ge.2000)then

X0=X0+2000.0

else

X0=X0+400.0

endif.

if(x0.gt.98000)stop

LWA = 0

DO 20 I = 1, NDIM

LWA = LWA + NPTVEC(I)

20 CONTINUE

DX=1.0D3

A1 = -DX

B1 = 0.0D0

```

ansf=0.0
n=0
do 10 I=1,100

    IF (LWAMAX.GE.LWA) THEN
ITYPE = 1
IW = 1
A1 = A1+DX
B1 = B1+DX
if(n.ne.1.and.x0.gt.10000.0)then
n=1
A1 = A1+x0-5000.0
B1 = B1+x0-5000.0
endif
IFAIL = 0
CALL D01BBF(D01BAz,A1,B1,ITYPE,NPTVEC(1),WEIGHT(IW),ABSCIS(IW),
+ IFAIL)
c write(*,*)WEIGHT
c write(*,*)IW
c write(*,*)ABSCIS

IW = IW + NPTVEC(1)
A = -1.0D3
B = 1.0D3
CALL D01BBF(D01BAz,A,B,ITYPE,NPTVEC(2),WEIGHT(IW),ABSCIS(IW),
+ IFAIL)
c write(*,*)WEIGHT,IW
IW = IW + NPTVEC(2)
A = 0.0D3
B = 1.0D3
c B = 0.5*(0.06*B1*(1+0.0015*B1)**(-0.5))

CALL D01BBF(D01BAz,A,B,ITYPE,NPTVEC(3),WEIGHT(IW),ABSCIS(IW),
+ IFAIL)

c write(*,*)WEIGHT,ABSCIS,IW
IFAIL = 0
ANS = D01FBF(NDIM,NPTVEC,LWA,WEIGHT,ABSCIS,FUN,IFAIL)
ANS =ANS*0.0404*0.0036*1.0*1.0 !for 1 MeV
if(ANSf.ne.ANS.and.ANS/ANSf.lt.1e-20)goto 31
Ans=ansf+ans
WRITE (NOUT,*)
WRITE (NOUT,99999) 'Answer = ', ANS
WRITE (NOUT,*)X0,A1,B1,Y0,Z0,ansf
END IF

```

```

10 continue
31 continue
WRITE (8,*)X0,Y0,Z0,ansf
goto 32
STOP
99999 FORMAT (1X,A,1pE10.3)
END
DOUBLE PRECISION FUNCTION FUN(NDIM,X)
common x0, rht, Y0, Z0
.. Scalar Arguments ..
INTEGER NDIM
.. Array Arguments ..
DOUBLE PRECISION X(NDIM),X0, rht
.. Intrinsic Functions ..
INTRINSIC EXP
PI=3.14159
Uvel=11.0
rht=0.0
Y0=0.0
Z0=0.0
call sigmy(X(1),sigy)
call sigmz(X(1),sigz)
c write(*,*)X(1),sigy,sigz
ak=(0.0091-0.0037)/0.0037 !(MU-MUA)/MUA
ak=1.277 ! for 1 MeV
amu=0.0091 !mass attenuation coefficient (1/meters)
amu=0.0082 ! for 1MeV
rr1=(X(1)-X0)**2+(X(2)-Y0)**2+(X(3)-Z0)**2
rr=sqrt(rr1)
a=-0.103
b=2.207
c=1.532
d=0.0425
e=14.12
AKu=c*(amu*rr)**a + d*(tanh(amu*rr/e - 2.) - tanh(-2.))/
. (1 - tanh(-2.))
if(AKu.eq.1.0)then
Bup3=1 + (b - 1)*amu*rr
else
Bup3=1 + ((b - 1)*(AKu**(amu*rr) - 1))/(AKu - 1)
endif
.. Executable Statements ..
FUN = (1.+ak*amu*rr)*EXP(-amu*rr)* !linear build-up
. EXP(-0.5*(X(2)/sigy)**2)*
. (EXP(-0.5*((X(3)-rht)/sigz)**2)+

```

```

. EXP(-0.5*((X(3)+rht)/sigz)**2))/
. (2.0*PI*sigy*sigz*rr1)
c write(*,*)x0,y0,z0,X(1),X(2),X(3),FUN
c write(*,*)rr,Bup3
RETURN
END
subroutine sigmy(XX,SIGY)
c***** Neutral stability D class*****
c*****horizontal*****
XDH=XX
T=8.3333-0.72382*log(XDH/1000.) !Degrees
T=T*3.14159/180. !radians
SIGY=XDH*tan(T)/2.15 !horizontal
RETURN
END
subroutine sigmz(XX,SIGZ)
c***** Neutral stability D class*****
c*****vertical*****
xis=XX/1000.
if(xis.gt.30.)zisd=44.053*xis**0.51179
if(xis.gt.10.and.xis.le.30)zisd=36.650*xis**0.56589
if(xis.gt.3.and.xis.le.10.)zisd=33.504*xis**0.60486
if(xis.gt.1.and.xis.le.3.)zisd=32.093*xis**0.64403 !constant a is equal
if(xis.gt.0.3.and.xis.le.1.)zisd=32.093*xis**0.81066
if(xis.le.0.3) zisd=34.459*xis**0.86974
SIGZ=zisd ! vertical
RETURN
END

```

A.4 Relación de publicaciones generadas en esta investigación doctoral

1. S. Raza, R. Avila, J. Cervantes, A 3-D Lagrangian (Monte carlo) Method for direct plume gamma dose rate calculations, Nuclear Science and Technology, Tokyo, Japan, Vol. 38(4), pp.254-260, 2001.
2. S. Raza, R. Avila, J. Cervantes, A 3-D Lagrangian Stochastic Model for the Meso-Scale Atmospheric Dispersion Applications, Nuclear Engineering and Design, North Holland, Vol 208(1), pp.15-28, July, 2001.
3. S. Raza, R. Avila, A 3-D Lagrangian Particle Model for direct plume gamma dose rate calculations, J. Radiological Protection, UK, Vol. 21(2), pp.145-154, June, 2001.
4. S. Raza, R. Avila, A 3-D Lagrangian Particle Model for the atmospheric dispersion of toxic pollutants, Int. J. of Energy Research, UK, Scheduled publication, Vol. 26(1), Jan., 2002.
5. Numerical simulation of the Radionuclide transport and diffusion in the atmosphere (a Lagrangian approach). revista Mexico Nuclear, Vol. 1(2), pp.62-69, 2000.
6. R. Avila, S. RAZA, Dispersion and concentration of lagrangian particles in a neutral atmosphere, using a Markov chain-Monte carlo method, Proceedings "First MIT conference on Computational Fluid and Solid Mechanics", June 12-14, 2001, Cambridge, MA., Ed. K.J.Bathe, Vol. 2, pp. 1065-1067, Elsevier, Amsterdam.
7. S. Raza, A. Quintanar, R. Avila, Transport and Dispersion of Particles in a Coastal Environment, Compilation of abstracts "First MIT conference on Computational Fluid and Solid Mechanics", June 12-14, 2001, Cambridge, MA., p. 118.
8. S. Raza, R. Avila, A. Quintanar, Transporte y dispersion de gases y particulas en la zona costera del sureste de Mexico, presentado en XLIV conferencia anual de la SMF, Oct. 15-19, 2001, Morelia, Michoacan.

Bibliografía

- [1] ICRP. Recommendations of the International Commission on Radiation Protection. Technical Report ICRP Publication 60, 1990.
- [2] D. J. Western. Radiation hazards following a nuclear emergency. *Nucl. Energy*, 30:53–61, 1991.
- [3] OECD/NEA. INEX1: An International Nuclear Emergency Exercise. Technical report, Nuclear Energy Agency, Paris, 1995.
- [4] OECD/NEA. Chernobyl Ten Years on: Radiological and Health Impact. Technical report, Nuclear Energy Agency, Paris, 1996.
- [5] D. B. Turner. The Long Lifetime of the Dispersion Methods of Pasquill in US Regulatory Air Modeling. *J. of Applied Meteorology*, 36:1016–1020, 1997.
- [6] S. R. Hanna and J. C. Chang. Hybrid plume dispersion model (HPDM) improvements and testing at three field sites. *Atmospheric Environment*, 27A(9):1491–1508, 1993.
- [7] F. Pasquill. The estimation of dispersion of windborn material. *Meteorological Magazine*, 90:33–49, 1961.
- [8] F. A. Gifford. Use of routine meteorological observations for estimating atmospheric dispersion. *Nuclear Safety*, 2:47–51, 1961.
- [9] D. A. Haugen. Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion, Geophysical Research Papers, No. 59, Vol. III. Technical Report AFCRC-TR-58-235, Air Force Cambridge Research Center, Cambridge, 1959.
- [10] G. A. Briggs. Diffusion estimation for small emissions. Technical Report ATDL-79, Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory, U.S.A., 1973.
- [11] S. B. Carpenter, T. L. Montgomery, and J. M. Leavitt. Principal Plume Dispersion Models, TVA Power Plants. *J. Air Pollut. Control Assoc.*, 21:491–495, 1971.
- [12] M. E. Smith. *Recommended Guide for the Prediction of the Dispersion of Airborn Effluents*. ASME, 1968.
- [13] J. L. McElroy and F. Pooler. St. louis dispersion study. Technical Report AP-53, US Public Health Service, National Air Pollution Control Admn., 1968.

- [14] IAEA. Generic Models and Parameters for Assessing the Environmental Transfer of Radionuclides from Routine Releases. Technical Report Safety Series No. 57, International Atomic Energy Agency, Austria, Vienna, 1982.
- [15] S. R. Hanna. *Applications in Air Pollution Modeling*, In: *F.T.M. Nieuwstadt and H. van Dop (Eds.), Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling*. D. Reidel, Dordrecht, Holland, 1984.
- [16] F. Pasquill. *Atmospheric diffusion*. John Wiley, N.Y., 1974.
- [17] RG-1.23. Onsite Meteorological programs. Technical Report Safety Guide 1.23, Nuclear Regulatory Commission, U.S.A., 1972.
- [18] L. Sedefian and E. Bennett. A comparison of turbulence classification schemes. *Atmospheric Environment*, 14:741-750, 1980.
- [19] F. B. Smith. A scheme for estimating the vertical dispersion of a plume from a source near ground level. In *3rd Meeting of an Expert Panel on Air Pollution Modeling, Brussels*. NATO/CCMS, 1972.
- [20] R. H. Clarke. A Model for Short and Medium Range Dispersion of Radionuclides Released to the Atmosphere. Technical Report NRPB-R91, National Radiological Protection Board, UK, 1979.
- [21] S. R. Hanna, G. A. Briggs, J. Deardorff, B. A. Egan, F. A. Gifford, and F. Pasquill. AMS workshop on stability classification schemes and sigma curves - Summary of Recommendations. *Bulletin American Meteorological Society*, 58(12):1305-1309, 1977.
- [22] O. G. Sutton. A theory of eddy diffusion in the atmosphere. *Proc. R. Soc. (London), Ser. A*, pages 135-143, 1932.
- [23] D. H. Slade. Meteorology and Atomic Energy. Technical Report TID-24190, US Atomic Energy Commission, U.S.A., 1968.
- [24] RG-1.145. Atmospheric Dispersion Models for Potential Accident Consequence Assessment at Nuclear Power Plants. Technical Report USNRC-Regulatory Guide-1.145, Revision 1, Nuclear Regulatory Commission, U.S.A., 1982.
- [25] J. W. Healy. Radioactive Cloud Dose Calculations, in: D. Randerson (Ed.) *Atmospheric Science and Power Production*. Technical Report DOE/TIC-27601, US Department of Energy, U.S.A., 1984.
- [26] C. W. Miller and L. M. Hively. A review of validation studies for the Gaussian plume atmospheric dispersion model. *Nuclear Safety*, 28(4):522-531, 1987.
- [27] IAEA. Atmospheric Dispersion in Nuclear Power Plant Siting, A Safety Guide. Technical Report Safety Series No. 50-SG-S3, International Atomic Energy Agency, Austria, Vienna, 1980.

- [28] IAEA. Techniques and Decision Making in the Assessment of Off-Site Consequences of an Accident in a Nuclear Facility. Technical Report Safety Series No. 86, International Atomic Energy Agency, Austria, Vienna, 1987.
- [29] L. P. Wang and D. E. Stock. Stochastic trajectory models for turbulent diffusion: Monte Carlo process versus Markov chains. *Atmospheric Environment*, 26A(9):1599–1607, 1992.
- [30] H. C. Rodean. *Stochastic Lagrangian Methods of Turbulent Diffusion*. American Meteorological Society, 45 Beacon St., Boston, MA 02108, 1996.
- [31] P. Zannetti. *Air pollution modeling: theories, computational methods, and available software*. Computational Mechanics Publications, 1990.
- [32] M. Uliasz. Subgrid-scale parameterizations. In *Mesoscale modeling of the Atmosphere: Meteorological monographs*, pages 13–19. edited by R. A. Pielke and R. P. Pearce, American Meteorological Society, vol. 25, No. 47, chapter 2, 1994.
- [33] H. Ishikawa. Evaluation of the effect of horizontal diffusion on the long-range atmospheric transport simulation with Chernobyl data. *J. of Applied Meteorology*, 34:1653–1665, 1995.
- [34] R. L. Walko, C. J. Treback, and M. J. Bell. Hybrid particle and concentration transport model, user's guide. Technical report, *ASTER Division, MRC., Mission Research Corporation, P.O.Box 466 Fort Collins, CO 80525-0466, 2001.
- [35] R. Turner and T. Hurst. Numerical simulations of volcanic ash dispersal from the ruapehu eruptions. *J. Appl. Meteorology*, pages –, 1996.
- [36] A. Stohl, M. Hittenberger, and G. Wotawa. Validation of the Lagrangian particle dispersion model FLEXPART against large scale tracer experiment data. *Atmospheric Environment*, 32:4245–4264, 1998.
- [37] Rubén Avila. *Simulación Numérica de la Dispersión de una Nube de Partículas Sólidas Liberada a la Atmósfera*. Tesis de Doctorado, División de Estudios de Posgrado Facultad de Ingeniería, U.N.A.M., 1997.
- [38] H. W. Detering and D. Etling. Application of the E- ϵ turbulence model to the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 33:113–133, 1985.
- [39] Thomas J. Overcamp and Robert A. Fjeld. A Simple Approximation for Estimating Centerline γ Absorbed Dose Rates due to a Continuous Gaussian Plume. *Health Physics*, 53(2):143–146, 1987.
- [40] RASCAL. Radiological Assessment System for Consequence Analysis RASCAL-2.1. Technical Report NUREG/CR-5247, Nuclear Regulatory Commission, U.S.A., 1995.
- [41] IRDAM. Interactive Rapid Dose Assessment Model. Technical Report NUREG/CR-3012, Pacific Northwest Lab., R.W.Poeton et al., U.S.A., 1983.

- [42] J. R. Lamarsh. *Introduction to Nuclear Engineering, 2nd ed., p.567*. Addison-Wesley, Massachusetts, 1983.
- [43] D. B. Turner. *Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates: An Introduction to Dispersion Modeling*. Lewis Publishers, Boca Raton, Florida, 1994.
- [44] Richard E. Faw and J. Kenneth Shultis. *Radiological Assessment: Sources and Doses*. American Nuclear Society, Illinois, USA, 1999.
- [45] G. P. Lahti, R. S. Hubner, and J. C. Golden. Assessment of γ -Ray Exposures Near Finite Gaussian Plume. *Health Physics*, 43(4):583-587, 1982.
- [46] M. R. Yeung and E. K. Ching. RADIS - A regional nuclear accident consequence analysis model for Hong Kong. *Nuclear Technology*, 101:123-139, 1993.
- [47] S. R. Hanna. Review of Atmospheric Diffusion Models for Regulatory Applications. Technical Report 581, World Meteorological Organization, WMO, Geneva, 1982.
- [48] G. A. Briggs. *Plume Rise Predictions, in Lectures on Air Pollution and Environment Impact Analysis*. American Meteorological Society, Boston, MA 02108, 1975.
- [49] F. A. Gifford. Turbulent diffusion-typing schemes: A review. *Nuclear Safety*, 17(1):68-86, 1976.
- [50] S. R. Hanna, G. A. Briggs, and R. P. Hosker. Handbook on atmospheric Diffusion. Technical Report DOE/TIC-11223, U.S.Department of Energy, U.S.A., 1982.
- [51] Y. F. Nie, T. J. Overcamp, and R. A. Fjeld. An approximate method for estimating the short-term centerline γ absorbed dose due to a continuous, ground level release. *Health Physics*, 49:100-105, 1985.
- [52] O. Reynolds. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of criterion. *Phil. Trans. Roy. Soc. London, Ser. A*, 186(1):123-164, 1895.
- [53] J. H. Seinfeld. *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. John Wiley, 1986.
- [54] P. A. Davis. Markov chain simulation of vertical dispersion from elevated sources into the neutral planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 26:355-376, 1983.
- [55] R. R. Draxler. Determination of atmospheric diffusion parameters. *Atmospheric Environment*, 10:99-105, 1976.
- [56] T. Yamada and S. Bunker. Development of a Nested Grid, Second Moment Turbulence Closure Model and Application to the 1982 ASCOT Brush Creek Data Simulation. *J. of Applied Meteorology*, 27:562-578, 1988.

- [57] M. Chino and H. Ishikawa. Experimental verification study for system for prediction of environmental emergency dose information: Speedi, (ii), simulation of field tracer experiments at isolated mountain. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 25(10):805–815, 1988.
- [58] D. J. Thomson. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *J. of Fluid Mechanics*, 180:529–556, 1987.
- [59] B. J. Legg and F. M. Raupach. Markov-chain simulation of particle dispersion in inhomogeneous flows: The mean drift velocity induced by a gradient in Eulerian velocity variance. *Boundary-Layer Meteorology*, 24:3–13, 1982.
- [60] R. Avila. Particle dispersion in a turbulent flow using Markov-Chain Monte Carlo model. In *Proceedings of the 8th International Symposium on Gas-Particle flows*. ASME-JSME Fluids Engineering Conference, July 18-23, 1999. San Francisco, California, USA, 1999.
- [61] J. D. Reid. Markov chain simulation of vertical dispersion in the neutral surface layer for surface and elevated releases. *Boundary-Layer Meteorology*, 16:3–22, 1979.
- [62] Peter Hurley and William Physick. A Lagrangian Particle Model of Fumigation by Breakdown of the Nocturnal Inversion. *Atmospheric Environment*, 25A(7):1313–1325, 1991.
- [63] A. K. Luhar and K. S. Rao. Random-walk model studies of the transport and diffusion of pollutants in Katabatic flows. *Boundary-Layer Meteorology*, 66:395–412, 1993.
- [64] P. de Haan and M. W. Rotach. A puff particle dispersion model. *Int.J.Environment and Pollution*, 5:350–359, 1995.
- [65] P. de Haan and M. W. Rotach. A novel approach to atmospheric dispersion modeling: The puff particle model. *Q.J.R.Meteorol. Soc.*, 124:2771–2792, 1998.
- [66] Peter Hurley. PARTPUFF—A Lagrangian Particle-Puff Approach for Plume Dispersion Modeling Applications. *J. of Applied Meteorology*, 33:285–294, 1994.
- [67] R. G. Jaeger. *Engineering Compendium on Radiation Shielding*, volume I. Springer-Verlag, 1968.
- [68] A. S. Monin and A. M. Yaglom. *Statistical Fluid Mechanics*, volume 1. M.I.T, 1971.
- [69] S. R. Hanna. Turbulent Energy and the Lagrangian Time Scales in the Planetary Boundary Layer. In *Preprints of the Fifth Symposium on Turbulence, Diffusion and Air Pollution*. American Meteorological Society, Boston, USA, 1981.

- [70] D. Milojevic. Lagrangian Stochastic Deterministic model (LSD) for the prediction of turbulent fluid-particle flows. In *Second Workshop on Two-Phase Flow Prediction*. Lehrstuhl für Strömungs Technik, Universität Erlangen-Nürnberg, Rep. of Germany, 1985.
- [71] R. A. Pielke, W. R. Cotton, C. J. Tremback, M. E. Nicholls, M. D. Moran, D. A. Wesely, T. J. Lee, and J. H. Copeland. A comprehensive meteorological modelling system - rams. *Meteorol. Atmos. Phys.*, 49:69–91, 1992.
- [72] S. Raza and R. Avila. A 3-D Lagrangian particle model for direct plume gamma dose rate calculations. *J. Radiol. Prot.*, 21(2):145–154, 2001.
- [73] H. H. Lettau. Theoretical wind spirals in the boundary layer of a barotropic atmosphere. *Beitr. Phys. Atm.*, 35:195–212, 1962.
- [74] F. A. Gifford. Horizontal Diffusion in the Atmosphere: A Lagrangian-Dynamical Theory. *Atmospheric Environment*, 16(3):505–512, 1982.
- [75] F. T. M. Nieuwstadt and H. van Dop. *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling*. D. Reidel, Dordrecht, Holland, 1984.
- [76] F. Pasquill and F. B. Smith. *Atmospheric diffusion, 3rd ed.* John Wiley, N.Y., 1983.
- [77] Z. Sorbjan. *Structure of the Atmospheric Boundary Layer*. Prentice Hall, 1989.
- [78] R. Stull. *An Introduction to the Boundary Layer Meteorology*. Kluwer, Boston, 1988.
- [79] F. Pasquill. Dispersion Parameters in Gaussian Plume Modeling. Technical Report EPA-600/4-76-030b, Environmental Protection Agency, Washington D.C., 1976.
- [80] J. J. Fuquay, C. L. Simpson, and W. T. Hinds. Prediction of Environmental Exposures from Sources near the Ground Based on Hanford Experimental Data. *J. of Applied Meteorology*, 3:761–770, 1964.
- [81] B. A. Boughton and J. M. DeLaurentis. Description and validation of ERAD: an atmospheric dispersion model for high explosive detonations. Technical Report SAND92-2069, SANDIA National Laboratories, U.S.A., 1992.
- [82] R. A. Pielke. *Mesoscale meteorological modeling*. Academic Press, Orlando, 1984.
- [83] R. A. Pielke. Mesoscale meteorological modeling. *Advances in Geophysics*, 18, 1981.
- [84] C. A. J. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, volume II. Springer-Verlag, 1991.
- [85] J. F. Thompson, Z. U. Warsi, and C. W. Mastin. *Numerical Grid Generation, Foundations and Applications*. Springer-Verlag, 1985.