

## MODELO ACOPLADO EULERO-LAGRANGIANO DE SIMULACIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE ESPECIES QUÍMICAMENTE REACTIVAS EN LA CAPA LÍMITE

César A. Aguirre<sup>a</sup>, Armando B. Brizuela<sup>a,b</sup>, Ivana Vinkovic<sup>c</sup> and Serge Simoëns<sup>c</sup>

<sup>a</sup>*Cátedra de Climatología Agrícola, FCA-UNER, Ruta 11 Km 10 Oro Verde,  
CC N° 24, 3100 Paraná, Entre Ríos, Argentina, cesar.aguirre.a@gmail.com,  
<http://www.cicyttp.org.ar/climatologiafca>*

<sup>b</sup>*Centro de Investigaciones Científicas, CICyTTP-CONICET,  
Materi y España, s/n, Diamante, Entre Ríos, Argentina, armando.brizuela@gmail.com,  
<http://www.cicyttp.org.ar>*

<sup>c</sup>*Laboratorio de Mecánica de Fluidos y Acústica, Ecole Centrale de Lyon, UMR-CNRS 5509,  
36 Avenue Guy de Collongue, BP 163 - 69134 Écully Cedex, Francia,  
ivana.vinkovic@ec-lyon.fr, <http://www.lmfa.ec-lyon.fr/recherche/fluco/melange>*

**Palabras Clave:** Dispersión atmosférica, Simulación de grandes escalas, modelos estocásticos.

**Resumen.** El estudio de impacto ambiental es un tema de gran interés actual que reagrupa varias disciplinas científicas. Las herramientas de predicción de los fenómenos de la dispersión y contaminación atmosférica han sido desarrolladas en los últimos años con el objeto de proteger a la población y predecir los efectos nocivos en el ambiente. Este trabajo tiene por objeto el estudio particular del transporte turbulento de partículas fluidas portadoras de especies químicas reactivas y no reactivas que pueden encontrarse en la atmósfera. Para la simulación de la turbulencia atmosférica hemos utilizado un código Euleriano global LES (Large Eddy Simulation) con el fin de obtener una descripción del comportamiento de las grandes escalas, acoplado a un modelo estocástico Lagrangiano para las pequeñas. En lo referente a fenómenos de difusión y reacción química, hemos utilizado un modelo de coalescencia/dispersión. La originalidad de este trabajo es el acople Eulerio-Lagrangiano que permite simular los fenómenos de transporte de partículas fluidas portadoras de especies, la difusión, la reacción química y su aplicación al estudio de la dispersión de polución atmosférica. En este trabajo se presentan aspectos teóricos referidos a la simulación y validación del modelo completo utilizando resultados de experiencias de medición en túneles de viento.

## 1 INTRODUCCIÓN

El incremento de la polución atmosférica en zonas urbanas y sub-urbanas cercanas a plantas industriales es cada vez más preocupante. Es notable y evidente el efecto nocivo que producen estas emanaciones en el ambiente y la salud de manera directa, por inhalación, o indirecta a una escala mayor, por reacción fotoquímica con otras especies para producir compuestos que alteran el equilibrio de energía en el sistema tierra-atmósfera y producen daños irreparables en los vegetales, animales y materiales. En las zonas urbanas se distinguen cerca de 150 especies químicas que coexisten en las tres fases, se mezclan, transforman e interactúan gracias a los fenómenos de la turbulencia. De esta forma, miles de reacciones químicas se producen en áreas densamente pobladas. En forma general, pueden agruparse estas especies en seis familias (Sienfeld, 1986): dióxido de azufre ( $\text{SO}_2$ ), óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x$ ), componentes orgánicos volátiles (COV), ozono ( $\text{O}_3$ ) óxidos de carbono ( $\text{CO}_x$ ) y partículas finas.

Una disminución de los niveles de la polución puede ser logrado a través del control de las fuentes de emisión de  $\text{NO}_x$  y COV. De todas formas, la eficiencia de este control depende de las relaciones entre las especies primarias (emitidas en forma directa a la atmósfera por la actividad antrópica:  $\text{NO}_x$ , COV,  $\text{SO}_2$ , CO y  $\text{CH}_4$ ) y secundarias (producto de las reacciones químicas de estas especies primarias con ayuda de la radiación solar:  $\text{O}_3$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ). Sillman et al. (1990) muestra que la producción fotoquímica de  $\text{O}_3$  troposférico en zonas rurales aumenta con las emisiones de  $\text{NO}_x$  pero es menos sensible a los niveles de emisión de COV. Por el contrario, en zonas urbanas, los niveles de  $\text{O}_3$  pueden ser limitados disminuyendo las emisiones de  $\text{NO}_x$  y de COV según la intensidad de radiación solar (Sillman, 1995). Estos diferentes comportamientos permiten definir dos regímenes fotoquímicos conocidos como los regímenes de bajo y alto  $\text{NO}_x$  (Kleinman, 1994). En la región de transición entre estos dos regímenes, la presencia de múltiples estados de comportamiento oscilatorio han sido estudiados por White and Dietz (1984); Stewart (1993); Poppe and Lustfeld (1996); Hess and Madronich (1997).

El impacto de la calidad del aire a escala regional puede ser evaluado considerando la distribución espacio/temporal de las fuentes de emisión de especies primarias, los datos de las variables meteorológicas necesarias para obtener una descripción de la termodinámica de la atmósfera y una representación correcta de los fenómenos de transporte, difusión y reacciones químicas en la troposfera.

Actualmente, están siendo utilizados modelos tri-dimensionales para evaluar la dinámica y la distribución espacial de las especies que contribuyen a la polución atmosférica. Sin embargo, la simulación de los fenómenos de transporte vertical (convección), horizontal (advección), de la difusión turbulenta de las reacciones químicas, de los niveles de concentración de los depósitos de estos compuestos y su distribución espacial es muy compleja. Estos modelos son particularmente costosos en tiempo de cálculo y espacio de memoria debido al hecho de la no-linealidad de los fenómenos de transporte turbulento y de la cantidad de especies y reacciones químicas que están involucradas. Un compromiso entre la necesidad de disponer de modelos más precisos, los problemas de tipo informático y la incertidumbre de los datos necesarios constituyen el mayor desafío para el modelado de la polución atmosférica. En la mayoría de los casos, ciertos modelos no tan ambiciosos permiten obtener una descripción espacial de los flujos de concentración de las especies más contaminantes a diferentes escalas a partir del acople entre modelos de transporte turbulento y modelos de simulación de los fenómenos de reacciones químicas. El objetivo principal en la utilización de estas herramientas es la de indicar geográficamente los niveles de concentración de las especies químicas nocivas a la altura del hombre (riesgo de inhalación) y a nivel del suelo (riesgo de ingestión). En este sentido, algunos trabajos han sido realizados con modelos

tri-dimensionales de tipo *no-hidrostáticos* acoplados a algoritmos que permiten simular las reacciones químicas. Tulet et al. (1998) utiliza el modelo MESO-NH-C propuesto por Lafore et al. (1998) para simular un episodio de polución de NO<sub>x</sub>, CO y O<sub>3</sub> para la ciudad de París en agosto de 1997. Calori et al. (1998) han realizado una simulación de un episodio de polución en la región de Lombardía (Italia) durante el verano de 1996 utilizando el modelo CALGRID para el transporte turbulento de especies químicas y el modelo STEM-II para las reacciones químicas. Los resultados de estos estudios han sido contrastados con mediciones in-situ recolectadas y consistidas en el marco de las actividades del programa CORINAIR. Estos modelos y otros de similares características necesitan de estudios experimentales en laboratorio para entender los diferentes mecanismos físicos y químicos de estos fenómenos y calibrar las diferentes constantes. Estos estudios realizados en túneles de viento permiten obtener valores de velocidad media y fluctuaciones del flujo de aire generado, flujos de masa y valores de la concentración de las especies químicas transportadas. Estas experiencias son realizadas teniendo en cuenta distintos tipos de relieve y diversas características de la superficie del suelo. Fackrell and Robins (1982); Gong and Ibbetson (1989); Gong (1990); Zegadi et al. (1994) realizaron experiencias de medición de concentración de gases pasivos emanados de fuentes de emisión puntuales a diferentes alturas sobre el suelo en condiciones de atmósfera neutra con relieve llano y colinas de débil pendiente. En este trabajo se presenta un modelo acoplado entre la técnica de resolución de las grandes escalas de la turbulencia utilizando las ecuaciones de Navier-Stokes (Euleriano) y un modelo de simulación de las pequeñas escalas que considera la hipótesis de isotropía de la turbulencia. Estas últimas son obtenidas según una ecuación de tipo estocástico (Lagrangiano) que permite simular la trayectoria de partículas fluidas portadoras de especies químicas. Modelos de difusión y reacción química son también acoplados. El modelo completo desarrollado por Aguirre (2005) ha sido utilizado por Aguirre et al. (2006) para el estudio de las mezclas turbulentas de gases pasivos y reactivos en la capa límite atmosférica, Vinkovic et al. (2006a) para la simulación de la dispersión turbulenta de partículas líquidas y Vinkovic et al. (2006b) para partículas sólidas. Se presentan los resultados de simulaciones numéricas de una experiencia en laboratorio realizada en túnel de viento para validar el modelo.

## 2 LA SIMULACIÓN DE LAS GRANDES ESCALAS

Para obtener una descripción del comportamiento de las grandes escalas de la turbulencia, adoptamos el modelo de meso-escala de tipo no-hidrostático quasi-compresible ARPS 4.5.2 (Advanced Regional Prediction System) desarrollado por el CAPS (Center of Analysis and Prediction Storm) de la Universidad de Oklahoma (USA) cuyos programas fuentes escritos en FORTRAN 77 se encuentran disponibles en la página <http://www.caps.ou.edu/ARPS>. Este modelo es utilizado para el seguimiento de tormentas, posee sub-modelos de flujo de calor y vapor de agua, formación de nubes y precipitación. Para ello tiene en cuenta la orografía y cobertura del terreno como así también las condiciones iniciales tanto del suelo como de la capa límite atmosférica. Si bien los modelos de sub-malla *Smagorinsky Standard* (Smagorinsky, 1963) modificado por Lilly (1967) y *1,5 TKE* (Turbulent Kinetic Energy) propuesto por Shumann (1975) que posee para el cálculo del tensor de *Reynolds de sub-malla* brindan resultados satisfactorios para las aplicaciones meteorológicas de meso-escalas, no son suficientes para describir con un grado de precisión aceptable los fenómenos de transporte turbulento, difusión y reacciones químicas que ocurren en los episodios de polución. Es por ello que este código ha sido modificado por Aguirre (2005) incluyendo la opción del cálculo del tensor *Reynolds de sub-malla* por el método *Smagorinsky dinámico* (Germano et al. 1991).

## 2.1 Esquema numérico de resolución

Desde el punto de vista de la resolución numérica, el cálculo se basa en el método de diferencias finitas centradas sobre una celda de tipo *Arakawa C-grid* y utiliza un sistema de coordenadas curvilíneo que sigue las ondulaciones de terreno. El modelo atmosférico tiene en cuenta la compresibilidad del flujo. La presencia de ondas acústicas debidas a las variaciones de densidad del aire limita el paso de tiempo de resolución numérica de tipo explícito. Es por esta razón que ARPS utiliza dos pasos de tiempo diferentes. En pasos de tiempo reducidos integra la ecuación de la presión y para las demás variables, utiliza pasos de tiempo más grandes. Esto permite mayor eficiencia en la resolución numérica general de las ecuaciones. El esquema numérico utilizado para obtener la solución de las ecuaciones diferenciales integradas en el *paso de tiempo grande* es de 4<sup>to</sup> orden centrado de tipo explícito mientras que el utilizado para integrar las ecuaciones de presión y componente vertical de la velocidad del aire es de tipo *Clark-Nicolson* de manera tal que se puede elegir el tamaño vertical de la malla de cálculo sin tener en cuenta el valor impuesto para el *paso de tiempo pequeño*.

## 2.2 Las ecuaciones del modelo

La descripción del flujo de aire en sus tres componentes  $u$ ,  $v$ ,  $w$  según los ejes principales  $x$ ,  $y$ ,  $z$  respectivamente, se obtiene a partir de la resolución de las ecuaciones de conservación de la masa y de la cantidad de movimiento. Las magnitudes termodinámicas que son calculadas en cada paso de tiempo de la simulación numérica son: La temperatura potencial  $\theta$ , la presión total  $p$ , la densidad del aire  $\rho$ , la relación de mezcla del vapor de agua  $q_v$  y del agua en sus estados sólido y líquido  $q_{li}$ . Inicialmente se establece una descomposición de tipo *Reynolds* según planos horizontales de manera tal que los mismos serán expresados como la suma de un valor medio según estos planos (estado base) y una fluctuación:

$$\begin{aligned}
 u(x, y, z, t) &= \bar{u}(z) + u'(x, y, z, t) \\
 v(x, y, z, t) &= \bar{v}(z) + v'(x, y, z, t) \\
 w(x, y, z, t) &= w'(x, y, z, t) \\
 \theta(x, y, z, t) &= \bar{\theta}(z) + \theta'(x, y, z, t) \\
 p(x, y, z, t) &= \bar{p}(z) + p'(x, y, z, t) \\
 \rho(x, y, z, t) &= \bar{\rho}(z) + \rho'(x, y, z, t) \\
 q_v(x, y, z, t) &= \bar{q}_v(z) + q'_v(x, y, z, t) \\
 q_{li}(x, y, z, t) &= q'_{li}(x, y, z, t)
 \end{aligned} \tag{1}$$

Las ecuaciones de conservación de las magnitudes calculadas son obtenidas considerando las hipótesis de invariancia temporal del estado base y la relación hidrostática sólo para el estado base de la presión. De esta forma las ecuaciones del modelo filtradas son las siguientes:

$$\frac{\partial \tilde{u}_j^\oplus}{\partial x_j} = 0 \tag{2}$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus)}{\partial x_j} = \bar{\rho} g_i B^\oplus - \left( \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^\oplus + 2 \epsilon_{ijk} \Omega_j \tilde{u}_k^\oplus - \frac{\partial \tilde{R}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( v \left( \frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j^\oplus}{\partial x_i} \right) \right) \tag{3}$$

donde  $B$  es la magnitud que considera los efectos de boyancia debido a fluctuaciones de la densidad del aire mientras que en los demás términos, se admite que las variaciones de la densidad del aire son despreciables frente al valor de su estado base (modelo quasi-

compresible).  $R_{ij}$  es el tensor de *Reynolds de sub-malla*,  $\Omega$  es el valor de la velocidad angular de la tierra y  $\nu$  es la viscosidad cinemática del aire a presión normal. En esta ecuación se ha considerado la descomposición de [Leonard \(1974\)](#) para expresar la correlación de velocidades filtrada teniendo en cuenta que la suma del tensor de *Leonard* y del tensor *Cruzado* es nula ([Deardorf, 1970](#)). De esta forma queda sólo el tensor de *Reynolds de sub-malla* como única magnitud a resolver.

La ecuación de la fluctuación de la presión es resuelta a partir de la ecuación de conservación de la masa (2) y de la ecuación de estado de los gases perfectos considerando la humedad del aire ([Klemp and Wilhelmson, 1978](#)):

$$\left(\frac{\partial p'}{\partial t}\right)^\oplus = -\left(u_i \frac{\partial p'}{\partial x_i}\right)^\oplus - g_i \tilde{u}_i^\oplus - V_s^2 \frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial x_i} + V_s^2 \bar{\rho} \left(\frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{1}{A} \frac{dA}{dt}\right)^\oplus \quad (4)$$

$V_s$  es la velocidad del sonido,  $A$  es la relación entre la constante de los gases perfectos para el aire seco y húmedo. El término de correlación velocidad-gradiente de la fluctuación de la presión es resuelto utilizando un modelo a gradiente ([Deardorff, 1980](#)).

En todas las ecuaciones precedentes se ha considerado la notación  $\bar{\rho} u_i = \tilde{u}_i$  y la operación de filtro espacial siguiente:

$$u_i^\oplus(x, t) = \int_V u_i(x-r, t) G(r) dr$$

En la cual  $G(r)$  es la función de convolución del filtro espacial:

$$G(\vec{r}) = \begin{cases} 1/\Delta, si, |\vec{x} - \vec{r}| < \Delta/2 \\ 0, si, |\vec{x} - \vec{r}| \geq \Delta/2 \end{cases}$$

$$\int_V G(\vec{r}) d\vec{r} = 1$$

$$\Delta = (\Delta x + \Delta y + \Delta z)^{1/3}$$

donde  $\Delta$  es el tamaño característico de las celdas que componen la malla de cálculo.

De la misma forma, pueden expresarse las ecuaciones de conservación de las magnitudes escalares ( $\theta$ ,  $q_v$ ,  $q_{ii}$ ):

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\theta^\oplus)}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_j^\oplus \bar{\theta})}{\partial x_j} \delta_{j3} + \frac{\partial(\tilde{u}_j^\oplus \theta'^\oplus)}{\partial x_j} = S_\theta - \frac{\partial h_{\theta j}}{\partial x_j} \quad (5)$$

donde  $S_\theta$  denota las fuentes y sumideros de energía y  $h_{\theta j}$  expresa los flujos turbulentos ([Xue et al. 2000](#)).

### 2.3 Modelo Smagorinsky dinámico para la resolución del tensor de Reynolds de sub-malla.

El tensor de *Reynolds de sub-malla* representa el aporte de la cantidad de movimiento desde las pequeñas escalas hacia las grandes. Este aporte está expresado en el término filtrado de la correlación de velocidades de la componente residual  $u_i^- = u_i - u_i^\oplus$

$$\tilde{R}_{ij} = (\tilde{u}_i^- u_j^-)^\oplus \quad (6)$$

Este término es modelado como una viscosidad ya que, en promedio, la energía contenida en las grandes escalas de la turbulencia es transmitida hacia las más pequeñas hasta ser disipada según la teoría de la cascada de energía de *Kolmogorov*. Es por esta razón que a este término se lo conoce como *viscosidad turbulenta de sub-malla* y puede ser modelado bajo la forma de la aproximación de *Boussinesq*:

$$\tilde{R}_{ij} = -2\bar{\rho}k_m S_{ij}^{a\oplus} + \frac{1}{3}\tilde{R}_{kk}\delta_{ij} \quad (7)$$

En la ecuación (7)  $k_m$  se denomina *coeficiente de difusión turbulenta* y  $S_{ij}^{a\oplus}$  es la parte asimétrica del *tensor de deformación filtrado*  $S_{ij}^{\oplus}$ :

$$S_{ij}^{\oplus} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i^{\oplus}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^{\oplus}}{\partial x_i}\right)$$

$$S_{ij}^{a\oplus} = S_{ij}^{\oplus} - \frac{1}{3}S_{kk}^{\oplus}\delta_{ij}$$

El modelo *Smagorinsky* propone el cálculo del *coeficiente de difusión turbulenta* como el producto de un parámetro que depende del tamaño característico de la celda de cálculo y un tensor equivalente de deformación:

$$k_m = (C_s \Delta)^2 |S_{ij}^{\oplus}|$$

donde  $C_s$  es llamado *coeficiente de Smagorinsky* y  $|S_{ij}^{\oplus}| = (2S_{ij}^{\oplus}S_{ij}^{\oplus})$ .

El coeficiente  $C_s$  es calculado de manera dinámica, es decir en cada paso de tiempo y para cada nodo de la malla de cálculo teniendo en cuenta las condiciones del flujo turbulento. Para ello se realiza un segundo filtrado (llamado filtro *test*) de tamaño mayor al primero de manera que sea posible realizar la corrección del *coeficiente de Smagorinsky* propuesto al iniciar el cálculo. De esta forma, el coeficiente es corregido en cada paso de tiempo y para cada nodo del dominio:

$$(C_s \Delta)^2 = \frac{1}{2\bar{\rho}} \frac{\tilde{L}_{ij}^{(M)a} M_{ij}}{M_{ij}^2} \quad (8)$$

donde  $\tilde{L}_{ij}^{(M)a}$  es la parte asimétrica del *tensor de Leonard modificado*:

$$\tilde{L}_{ij}^{(M)a} = (\tilde{u}_i^{\oplus} u_j^{\oplus})^T - \tilde{u}_i^{\oplus T} u_j^{\oplus T} - \frac{1}{3} \left[ (\tilde{u}_k^{\oplus} u_k^{\oplus})^T - \tilde{u}_k^{\oplus T} u_k^{\oplus T} \right] \delta_{ij} \quad (9)$$

y el tensor  $M_{ij}$  está dado por:

$$M_{ij} = \left( |S_{ij}^{\oplus}| S_{ij}^{a\oplus} \right)^T - \alpha^2 |S_{ij}^{\oplus}|^T S_{ij}^{a\oplus T} \quad (10)$$

En las ecuaciones (9) y (10) el superíndice  $(.)^T$  denota la operación de filtro *test* y el parámetro  $\alpha$  representa la relación de tamaño entre los dos tipos de filtro. Para las simulaciones realizadas en este trabajo se ha utilizado  $\alpha = 3$ .

Ha sido necesario incluir en la determinación dinámica del *coeficiente de Smagorinsky* expresado en (8) un factor de corrección que tiene en cuenta la variación vertical del tamaño de las celdas de cálculo en la zona próxima a la pared. Esta expresión es similar a la utilizada por *Van Driest (1956)*:

$$(C_s \Delta)^2 = \frac{1}{2\bar{\rho}} \frac{\tilde{L}_{ij}^{(M)a} M_{ij}}{M_{ij}^2} [1 - e^{-z^+/25}]^2 \quad (11)$$

donde  $z^+ = \frac{zu_*}{\nu}$  es la coordenada vertical  $z$  medida en unidades de pared y  $u_*$  la velocidad de fricción.

Para terminar de modelar el *tensor de Reynolds de sub-malla* (7) nos queda solamente el cálculo de la traza del mismo. Éste puede ser obtenido resolviendo la ecuación de transporte de la *energía cinética turbulenta de sub-malla* ( $E^-$ ):

$$\begin{aligned} \tilde{R}_{kk} &= 2\bar{\rho}E^- \\ E^- &= \frac{1}{2}(u_k^- u_k^-)^{\oplus} \\ \frac{d(\bar{\rho}E^-)}{dt} &= \underbrace{-(u_i^- u_k^-)^{\oplus}}_{\text{Producción}} \frac{\partial \tilde{u}_i^{\oplus}}{\partial x_k} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \tilde{u}_i^- \left( E^- + R_{ik} + \frac{p'^-}{\bar{\rho}} \right) \right]^{\oplus}}_{\text{Difusión}} - \underbrace{g \left[ \delta_{i3} \frac{\tilde{u}_i^-}{\bar{\rho}} B^- \right]^{\oplus}}_{\text{Gravedad}} - \underbrace{\frac{1}{2} \varepsilon_{ii}}_{\text{Disipación}} \end{aligned} \quad (12)$$

Los términos que componen esta ecuación de transporte son modelados de manera similar al tensor de *Reynolds de sub-malla*, es decir, utilizando modelos a gradiente (Deardorff, 1980). En particular para el término de disipación, Aguirre (2005) ha realizado una pequeña modificación a la propuesta original cambiando la constante de disipación viscosa para las celdas de cálculo adyacentes a la pared por una función de amortiguación de tipo *Van Driest*:

$$\frac{1}{2} \varepsilon_{ii} = \bar{\rho} \frac{C_\varepsilon}{l} (E^-)^{3/2} \quad (13)$$

$$l = \begin{cases} 0,76(E^-)^{1/2} \delta_{i3} \left( \frac{g}{\bar{\theta}} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \right)^{-1/2} & \text{si } l < \Delta \quad \text{y } \delta_{i3} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} > 0 \\ \Delta & \text{si no} \end{cases} \quad (14)$$

$$C_\varepsilon = \begin{cases} 3,9 & \text{si } z = \Delta z_{\min} \\ 0,19 + 0,51 \frac{l}{\Delta} & \text{si no} \end{cases} \quad \text{Deardorff (1980)} \quad (15)$$

$$C_\varepsilon = \left( 0,19 + 0,51 \frac{l}{\Delta} \left[ 4,57 e^{\left( \frac{z - \Delta z_{\min}}{30 z_0} \right)} + 1 \right] \right) \quad \text{Aguirre (2005)} \quad (16)$$

En las ecuaciones (15) y (16)  $\Delta z_{\min}$  es la altura de la primera celda de cálculo encima de la pared y  $z_0$  es la rugosidad característica.

### 3 MODELO ESTOCÁSTICO LAGRANGIANO

Con el fin de obtener un modelo de simulación de la dispersión atmosférica de especies químicas pasivas o reactivas, sus trayectorias, concentraciones, evolución temporal y espacial, es necesario acoplar a la Simulación de las Grandes Escalas atmosféricas (LES) un modelo de seguimiento de partículas fluidas dentro de la celda de cálculo, es decir, simular el comportamiento de las pequeñas escalas de la turbulencia no resueltas por LES que son las que rigen los movimientos fluctuantes dentro de la misma.

El *modelo Lagrangiano* permite obtener trayectorias de partículas fluidas hipotéticas moviéndose en el seno fluido considerando las características turbulentas del mismo como son la *energía cinética turbulenta de sub-malla* ( $E^-$ ), los valores de velocidad media en el seno fluido ( $\bar{u}_i$ ), el tensor de *Reynolds de sub-malla* ( $R_{ij}$ ) y la energía que se disipa por viscosidad molecular ( $\varepsilon_{ij}$ ), todas ellas magnitudes derivadas de los modelos utilizados en LES. Es decir que existe coherencia entre las magnitudes obtenidas por LES para la descripción de las grandes escalas de la turbulencia y las que son simuladas utilizando el *modelo Lagrangiano* para obtener las pequeñas escalas.

Se dice que el modelo es estocástico porque además de términos de tipo determinista, posee términos de carácter aleatorio en analogía a la hipótesis de desplazamiento microscópico de una molécula que sigue un movimiento *browniano*. Langevin (1908) ha concebido un modelo que tiene en cuenta los efectos de inercia de las partículas sometidas a la turbulencia en el seno de una masa fluida mientras que Wiener (1923) ha construido un proceso estocástico para representar la posición de una partícula hipotética sometida a este tipo de movimiento.

### 3.1 La ecuación de Langevin

La *ecuación de Langevin clásica* está compuesta de un término determinista y un término aleatorio:

$$d\hat{U}_i = \alpha_u \hat{U}_i dt + \beta_u \eta(t) dt \quad (17)$$

donde  $\hat{U}_i$  es la  $i$ -ésima componente de la *velocidad lagrangiana* de una partícula fluida y  $\eta(t)$  es una función que expresa un *ruido blanco gaussiano*, es decir que no presenta correlación alguna de un instante al otro y su media estadística es nula:

$$\begin{cases} \overline{\eta_i(t)} = 0 \\ \overline{\eta_i(t')\eta_j(t'')} = \delta_{ij}\delta(t'-t'') \end{cases} \quad (18)$$

Estos términos poseen coeficientes ( $\alpha_u$ ,  $\beta_u$ ) que deberán ser determinados a partir de las características de la turbulencia del fluido. Una forma de obtener estos coeficientes, es utilizar la ecuación de evolución de la densidad de probabilidad (ddP). Pope (1985) desarrolló los métodos ddP para obtener una descripción estadística de la dupla posición-velocidad de las partículas resolviendo la ecuación de evolución de la ddP o *ecuación de Fokker-Plank*. Esta función de distribución de probabilidad es de tipo condicionada al estado inicial a partir del cual se realiza el seguimiento de la partícula. Además, el término determinista posee una memoria de un paso de tiempo (*sistema Markoviano*). Con esta hipótesis, es posible encontrar los coeficientes de la ecuación de *Fokker-Plank* y asociarlos a los coeficientes de la dupla posición-velocidad del sistema de ecuaciones que rige el movimiento de las partículas.

### 3.2 La ecuación de Fokker-Plank

La *ecuación de Fokker-Plank* es la ecuación de evolución de la ddP que permite obtener los coeficientes del sistema de ecuaciones *Lagrangiano* para describir la evolución de una partícula libre en el seno de un fluido. Este procedimiento es válido siempre y cuando el sistema sea de tipo *Markoviano*.

Designamos con  $\hat{S}(t)$  la dupla posición-velocidad de una partícula en el seno de un fluido turbulento de manera tal que  $\hat{S}(t) = [\hat{X}_i(t), \hat{U}_i(t)]$ . La probabilidad de encontrar una partícula

en el estado  $\hat{S}(t)$  sabiendo que ella estaba en el estado  $\hat{S}(t_0)$  al instante  $t_0$  puede obtenerse si se resuelve la ecuación de evolución de la ddP o *ecuación de Fokker-Plank*:

$$\frac{\partial P}{\partial t}(\hat{S}(t), t) = -\frac{\partial}{\partial s_i} [h_i(\hat{S}(t), t)P] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial s_i \partial s_j} [g_{ik}(\hat{S}(t), t)g_{jk}(\hat{S}(t), t)P] \quad (19)$$

que está asociada al sistema de ecuaciones lagrangiano siguiente:

$$\begin{cases} \frac{d\hat{S}(t)}{dt} = h_i(\hat{S}(t), t) + g_{ij}(\hat{S}(t), t)\eta_j(t) \\ \overline{\eta_i(t')\eta_j(t'')} = \delta_{ij}\delta(t'-t'') \end{cases} \quad (20)$$

En la ecuación (19) la función ddP involucra el dominio entero de cálculo y está condicionada a los valores iniciales de la cupla posición-velocidad. Sin embargo, es necesario restringir la ddP al tamaño de una celda de cálculo ya que lo que se pretende es encontrar un sistema de ecuaciones que describa las variables de estado lagrangiano (posición-velocidad) en el seno de dicha celda para describir las trayectorias que tendrán las partículas fluidas en su interior. Esto es equivalente a encontrar una expresión para la ddP local ( $P_L$ ). Un segundo condicionante, derivado del que se acaba de exponer, es que la ddP debe estar condicionada a los valores iniciales de posición y velocidad que posean las partículas fluidas al ingresar a la celda de cálculo en vez de hacerlo al iniciar su recorrido en el dominio.

Para lograr expresar la ddP local es necesario filtrar la ecuación (19) obteniendo así la *Función de densidad de Probabilidad Filtrada* (FDF) que ha sido propuesta originalmente por [Gao and O'Brien \(1993\)](#) y detallada en profundidad por [Colucci et. al \(1998\)](#) para obtener una descripción de los fenómenos transitorios producidos a la escala sub-malla en un LES. Estos autores han desarrollado la ecuación de transporte de la FDF a densidad constante para un flujo reactivo en tanto que [Jaberi et al. \(1999\)](#) ha aplicado esta técnica en la simulación de una flama reactiva de especies no pre-mezcladas utilizando una aproximación LES. [Gicquel and Givi \(2002\)](#) han mostrado la utilización de la FDF aplicada al campo de velocidades de sub-malla, llamando a esta función en particular *Función de Densidad Filtrada del campo de Velocidad* (VFDF).

### 3.3 La Función de Densidad Filtrada del Campo de Velocidad (VFDF)

La Función de densidad de probabilidad del campo de velocidad restringida al seno de una celda de cálculo ( $m$ ) es una función local ( $P_L$ ) obtenida realizando una operación de filtro espacial a la ddP de velocidad. Esta función es llamada *Función de Densidad Filtrada del campo de Velocidad* (VFDF) propuesta por [Gicquel and Givi \(2002\)](#):

$$P_L(\vec{v}, \vec{x}_{(m)}, t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \vartheta[\vec{v}, \vec{u}(x', t)] G(\vec{x}' - \vec{x}_{(m)}) dx' \quad (21)$$

donde  $\vec{x}_{(m)}$  es el vector posición del centro de la celda ( $m$ ),  $x'$  es la posición relativa de un punto situado al interior de esta celda y  $\vec{v}$  es un valor particular del campo de velocidad  $\vec{u}(x, t)$ .  $\vartheta[\vec{v}, \vec{u}(x, t)]$  es la función de densidad de probabilidad de *grano fino* según es definida por [Pope \(1985\)](#):

$$\vartheta[\vec{v}, \vec{u}(x, t)] = \delta[\vec{v} - \vec{u}(x, t)] \equiv \prod_{i=1}^3 \delta[v_i - u_i(x, t)] \quad (22)$$

como  $v$  es un valor particular del campo de velocidad, entonces esta función representa una función de probabilidad condicionada.

### 3.4 El sistema de ecuaciones estocástico lagrangiano

Consideramos ahora la ecuación de transporte de  $P_L$  con el fin de obtener los coeficientes del sistema de ecuaciones lagrangiano al seno de la celda  $m$ . Los detalles de este procedimiento se encuentran en Aguirre (2005). Si la turbulencia puede ser supuesta inhomogénea, isotrópica y no-estacionaria en el seno de una celda de cálculo, como en la mayoría de los flujos en capa límite atmosférica, el sistema de ecuaciones resultante es el siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{l} d\hat{X}_{i(m,t)} = \hat{U}_{i(m,t)} dt \\ d\hat{U}_{i(m,t)} = \frac{du_{i(m,t)}^{\oplus}}{dt} dt + \frac{\partial R_{ij(m,t)}}{\partial x_j} dt + \left[ \frac{3}{2E_{(m,t)}^-} \left( \frac{1}{3} \frac{dE_{(m,t)}^-}{dt} - \frac{C_0 \varepsilon_{(m,t)}}{2} \right) (\hat{U}_{j(m,t)} - u_{j(m,t)}^{\oplus}) \delta_{ij} \right] dt \\ \quad + \sqrt{C_0 \varepsilon_{(m,t)}} \delta_{ij} \eta_j(t) dt \end{array} \right. \quad (23)$$

donde  $C_0$  es la *constante de Kolmogorov*. Puede observarse en este sistema de ecuaciones que las magnitudes  $u_{i(m,t)}^{\oplus}$ ,  $R_{ij(m,t)}$ ,  $E_{(m,t)}^-$ ,  $\varepsilon_{(m,t)}$  calculadas al centro de la celda  $m$  por LES pueden ser interpoladas a la posición que tenga la partícula fluida al instante  $t$  considerando no sólo los valores propios de la celda  $m$  sino además los valores de las celdas vecinas. Aguirre (2005) encontró que el método de interpolación de tipo *baricéntrico* brinda resultados muy próximos respecto al de tipo de *Polinomios de Lagrange* y requiere mucho menor tiempo de cálculo y es más fácil de implementar en una simulación numérica. Es por ello que en este trabajo serán presentados los resultados de la validación de este modelo acopado LES-estocástico (LES-STO) de simulación de las trayectorias de partículas fluidas para el caso de las experiencias de Fackrell and Robins (1982) considerando el método de interpolación de tipo *baricéntrico*.

## 4 MODELO DE DIFUSIÓN Y REACCIONES QUÍMICAS

Las ventajas de utilizar el modelo estocástico lagrangiano para el seguimiento de partículas fluidas en la simulación de la dispersión atmosférica de la polución es la posibilidad de introducir de manera sencilla modelos de difusión y reacción química por contacto (coalescencia/dispersión) entre partículas fluidas portadoras de especies que intercambien entre ellas parte de su concentración. Este tipo de modelos, propuesto originalmente por Curl (1963), ha sido utilizado inicialmente para la resolución de problemas de combustión y en la ingeniería de procesos industriales (Dopazo, 1975; Pope, 1976; Janicka et al., 1978 y Dopazo, 1979).

### 4.1 La difusión por contacto

El modelo original de difusión por contacto entre partículas (Curl, 1963) ha sido reformulado por Pope (1985) y mejorado por Michelot (1996) para el caso de la simulación de una mezcla reactiva de NO y O<sub>3</sub> en régimen de flujo turbulento generado por una grilla en túnel de viento.

Para su implementación, es necesario dividir el dominio de cálculo en celdas de mezcla dentro de las cuales las partículas fluidas portadoras de especies químicas serán seleccionadas de manera aleatoria por pares ( $p, n$ ). Para cada par de partículas y por cada especie que portan las mismas, se resuelve el sistema de ecuaciones siguiente:

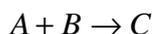
$$\begin{cases} \frac{dc_p(t)}{dt} = \frac{C_{dif}}{2T_t} (c_n(t) - c_p(t)) \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \frac{C_{dif}}{2T_t} (c_p(t) - c_n(t)) \end{cases} \quad (24)$$

donde  $c_p(t)$  y  $c_n(t)$  representan los niveles de concentración de una especie química que poseen las partículas  $p$  y  $n$  respectivamente,  $C_{dif}$  es la relación entre el tiempo característico de la turbulencia  $T_t$  y el tiempo característico de la difusión molecular. [Michélot \(1996\)](#) propone un valor para este coeficiente de  $C_{dif} = 2,25$ .

## 4.2 Modelo de reacciones químicas

Acoplado al modelo de difusión, las concentraciones de las especies evolucionan en el seno de cada partícula fluida según las reacciones químicas que puedan producirse.

Si se considera la siguiente reacción química reversible de segundo orden supuesta isotérmica:



las variaciones de los niveles de concentración de las especies  $A$ ,  $B$  y  $C$  al seno de la partícula fluida  $p$  será simulada por el siguiente sistema:

$$\begin{cases} \frac{dc_{pA}}{dt} = -K_d c_{pA} c_{pB} + K_i c_{pC} \\ \frac{dc_{pB}}{dt} = -K_d c_{pA} c_{pB} + K_i c_{pC} \\ \frac{dc_{pC}}{dt} = K_d c_{pA} c_{pB} - K_i c_{pC} \end{cases} \quad (25)$$

donde  $K_d$  es la constante cinética de la reacción directa y  $K_i$  es la de reacción inversa.

Los modelos acoplados de difusión y reacciones químicas han sido introducidos en el código de simulación LES-STO para obtener un modelo completo (MC) que permita considerar ambos procesos para cada paso de tiempo. Gracias a ello, pueden obtenerse los valores instantáneos de los niveles de concentración de especies químicas y su distribución espacial en un episodio de polución.

## 5 APLICACIÓN DEL MODELO COMPLETO

El modelo completo (MC) fue utilizado para simular el caso de la dispersión de una pluma reactiva de óxido nitroso (NO) emitida desde una chimenea, en presencia de una atmósfera que posee ozono ( $O_3$ ) distribuido de manera homogénea en la capa límite turbulenta de la experiencia de [Fackrell and Robins \(1982\)](#). Los resultados de la simulación de la evolución de las concentraciones de estas especies químicas reactivas pueden ser comparados con las mediciones experimentales de los niveles de concentración de un escalar pasivo realizadas por los autores de esta experiencia de manera indirecta a través de la *fracción de mezcla* (FM) definida como:

$$FM = \frac{c_{NO} - c_{O_3} + c_{O_3}^0}{c_{NO}^0 + c_{O_3}^0} \quad (26)$$

La FM puede tomar en los casos extremos el valor 1 en la región donde se encuentre NO puro y 0 donde él está ausente. El superíndice  $(.)_0$  indica el valor de concentración inicial.

La reacción química a simular es la siguiente:



con constantes de reacción  $K_d = K_i = 3,7 \cdot 10^{-1} \text{ ppm}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .

Los valores de concentración inicial de las especies reactivas son  $c_{NO}^0 = 515 \text{ ppm}$  en la boca de la chimenea y  $c_{O_3}^0 = 1 \text{ ppm}$  distribuido de forma homogénea en el ambiente.

### 5.1 Descripción de la experiencia de Fackrell and Robins (1982)

Fackrell and Robins (1982) realizaron mediciones de los valores de velocidad media y fluctuación del flujo de aire en capa límite neutra turbulenta producido en el túnel de viento del laboratorio de *Marchwood Engineering* (US). Este túnel funciona en circuito abierto y los autores utilizaron la metodología de generación de la capa límite propuesta por Counihan (1969). Los experimentadores obtuvieron además mediciones de la concentración de un gas pasivo (mezcla de propano y helio) emanado de una fuente puntual elevada del suelo en varias posiciones corriente abajo.

Los datos característicos de la capa límite generada en laboratorio y el diámetro y posición de la fuente de emisión del gas son los siguientes:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \delta = 1,2m & \text{espesor de la capa límite.} \\ U_e = 4m/s & \text{velocidad media del aire exterior a la capa límite.} \\ u_* = 0,047U_e & \text{velocidad de frotamiento.} \\ z_0 = 2,4 \cdot 10^{-4} \delta & \text{rugosidad del suelo.} \\ z_s = 0,19\delta & \text{altura de la fuente de emisión de gas.} \\ d_s = 7,08 \cdot 10^{-3} \delta & \text{diámetro de la fuente de emisión de gas.} \end{array} \right.$$

Las mediciones de concentración de gas fueron hechas en el plano de simetría axial que contiene a la fuente obteniéndose perfiles de los valores medios y desvíos estándar de la misma en las siguientes abscisas corriente debajo de la fuente:  $x - x_s = 0,96 \delta$ ;  $1,92 \delta$ ;  $2,88 \delta$ ;  $3,83 \delta$  y  $4,79 \delta$ .

### 5.2 Parámetros escogidos para la simulación

El dominio de cálculo para la simulación numérica de la experiencia ha sido de  $72 \times 32 \times 32$  celdas en las direcciones  $x$ ,  $y$ ,  $z$  respectivamente donde la dirección  $x$  es coincidente con la dirección del flujo en la vena fluida. Los tamaños de las celdas fueron obtenidos siguiendo la metodología de Mason and Challen (1986) que para este tipo de régimen turbulento arrojó valores cercanos a  $0,1 \text{ m}$  en las direcciones horizontales  $x$  e  $y$ . En la dirección vertical se propuso un variación del tamaño de las celdas siguiendo una función tangente hiperbólica de manera tal que cerca del suelo su valor es de  $3 \text{ mm}$ , aumentando a medida que se asciende hasta llegar a  $79 \text{ mm}$  con un valor medio que ronda en  $0,04 \text{ m}$ . El tamaño vertical de la celda cercana al suelo  $\Delta z_{min}$  es función de la rugosidad característica del mismo  $z_0$  según la relación  $\Delta z_{min} = 10 z_0$  (Garratt, 1992).

Las condiciones iniciales impuestas en todo el dominio de cálculo para el campo de velocidades fueron obtenidas considerando el perfil de velocidad media y los perfiles de las fluctuaciones en las tres direcciones tomados de los resultados de las mediciones

experimentales. Como estos perfiles son bidimensionales ( $x, z$ ), se adoptó un método de aleatorización de las fluctuaciones tri-dimensional para generar el campo de velocidades cuyas propiedades estadísticas respondan a los perfiles de velocidad media y fluctuación mencionados (Aguirre, 2005). Se ha tenido en cuenta además la ley de aumento del espesor de la capa límite turbulenta corriente abajo (Schlichting, 1979).

Las condiciones límites han sido de tipo forzado corriente arriba, convección corriente abajo, periódicas para los límites laterales y *Newmann* para los límites superior e inferior del dominio. Se ha utilizado un amortiguador de ondas de presión *Rayleigh* que evita la reflexión de las mismas en el límite superior.

El paso de tiempo utilizado para la integración de los términos de la ecuación donde no interviene la presión ha sido adoptado en  $\Delta t_G = 2,0 \cdot 10^{-4}$  s mientras que para la integración de la ecuación de la presión ha sido de  $\Delta t_p = 2,0 \cdot 10^{-5}$  s.

Se han realizado tres simulaciones de la experiencia considerando los tres tipos de modelos de sub-malla con el fin de comparar su comportamiento. El modelo *Smagorinsky Standard* que utiliza un *coeficiente de Smagorinsky* constante en todo instante y lugar del dominio de cálculo igual a  $C_s = 2,1$  (Smagorinsky, 1963). El modelo *1,5 TKE* que calcula el coeficiente de difusión turbulenta  $k_m$  considerando que el mismo es proporcional a una escala de longitud de mezcla y a la energía cinética turbulenta (Schumann, 1975) y el modelo *Smagorinsky dinámico* que es calculado según (11) y propuesto por Germano et al. (1991). En esta última alternativa se consideran a su vez dos variantes para el cálculo del coeficiente de disipación viscosa  $C_\varepsilon$  según las expresiones (15) y (16).

El ritmo de eyección de las partículas fluidas a sido fijado en 50.000 partículas por segundo repartidas de manera equiprobable entre las que fueron emitidas por la fuente y las que corresponden al ambiente donde se desarrolla la pluma. El método de interpolación de tipo *baricéntrico* para obtener las magnitudes calculadas por LES en la posición de la partícula ha dado resultados satisfactorios y posee la ventaja de disminuir el tiempo de cálculo de la simulación respecto al método de *polinomios de Lagrange*.

### 5.3 Resultados de la simulación de la dinámica del flujo

Se presentarán a continuación los resultados obtenidos de la simulación de la dinámica del flujo correspondiente a la experiencia de Fackrell and Robins (1982) en comparación con las mediciones experimentales ( $\blacktriangle$ ). Los perfiles de la velocidad media de las grandes escalas simulados utilizando los tres tipos de modelo para el tensor *Reynolds de sub-malla* se presentan en escala semi-logarítmica (Figura 1). Estos son *Smagorinsky Standard* (—); *1,5 TKE* (— —) y *Smagorinsky dinámico* (— • —).

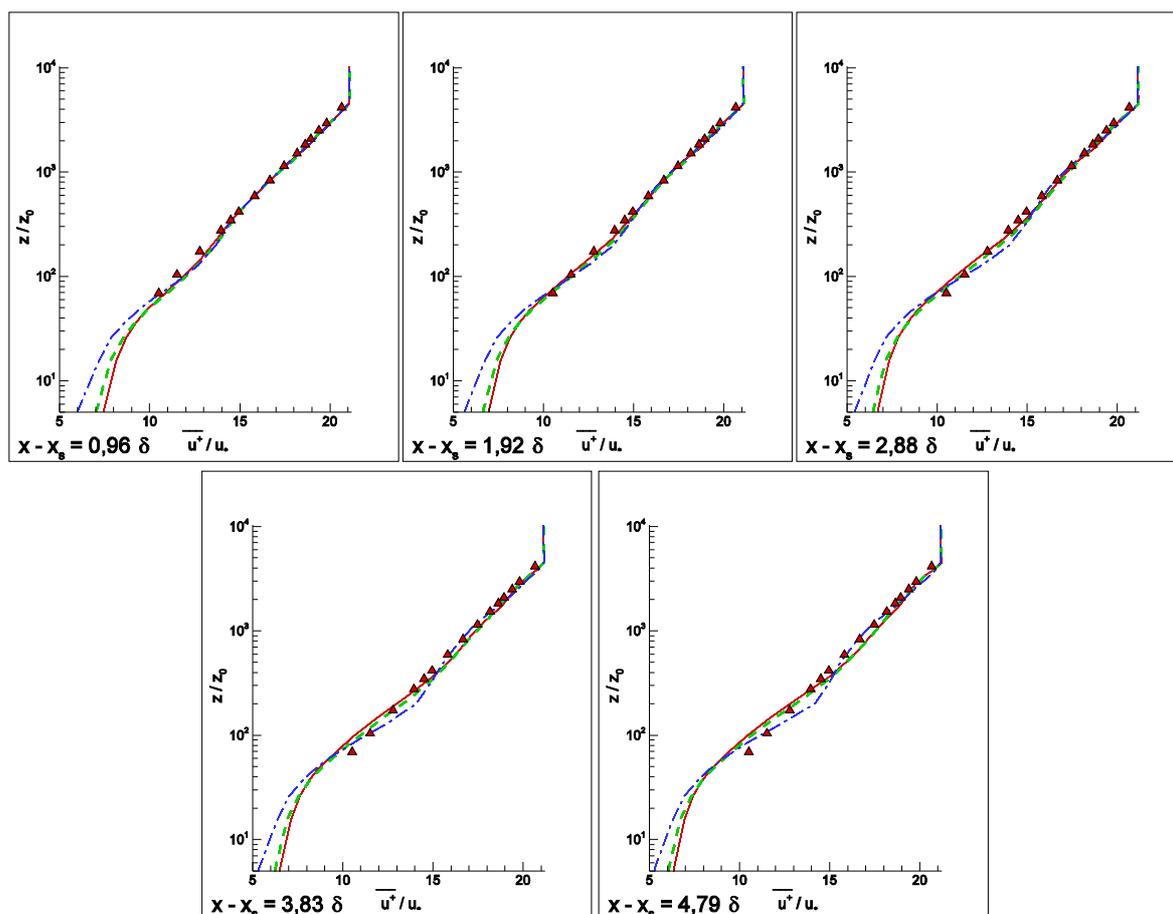


Figura 1: Perfiles de la velocidad media axial

Los perfiles de las fluctuaciones de las tres componentes de la velocidad obtenidos para la posición  $x - x_s = 2,88 \delta$  son mostrados en la [Figura 2](#). Los símbolos denotan las mediciones experimentales para las componentes  $u$  ( $\blacktriangle$ ),  $v$  ( $\bullet$ ),  $w$  ( $\blacksquare$ ) y la energía cinética turbulenta  $E$  ( $\circ$ ) mientras que la resuelta por las grandes escalas se muestra en línea discontinua (---), la total que considera el aporte de las pequeñas escalas utilizando el modelo de pared de [Deardorff \(1980\)](#) en línea y punto (—•—) y la total utilizando el modelo de pared de [Aguirre \(2005\)](#) en línea llena (—). En la parte superior se observan las componentes transversal ( $v'^2$ ) y longitudinal ( $u'^2$ ) mientras que en la parte inferior se muestran la vertical ( $w'^2$ ) y la energía cinética turbulenta ( $E$ ), todas expresadas en relación al cuadrado de la velocidad de frotamiento ( $u_*^2$ ). En la columna de la derecha se observan los resultados de la simulación utilizando el modelo *Smagorinsky Standard*, al centro *1,5 TKE* y a la izquierda el modelo *Smagorinsky dinámico*.

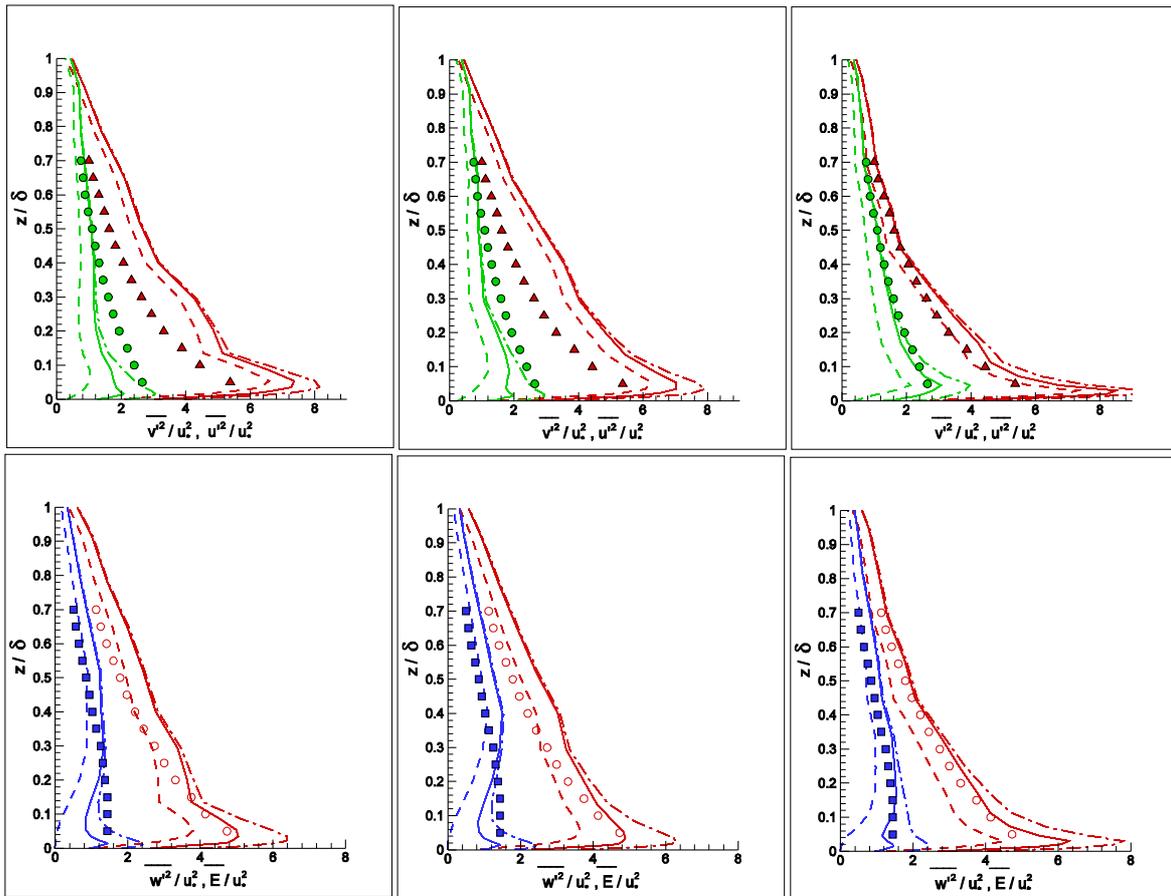


Figura 2: Perfiles de las fluctuaciones de velocidad y de la energía cinética turbulenta obtenidos a  $x-x_s = 2,88 \delta$

#### 5.4 Resultados de la simulación de la dispersión de especies reactivas

Los perfiles de concentración media (derecha) y desvío estándar (izquierda) de la FM calculada según la ecuación (26) utilizando el modelo MC (— FM) son comparados los obtenidos utilizando el modelo LES-STO (— —  $C_2$ ) y con las mediciones realizadas en la experiencia (■ exp) para diferentes abscisas de medición como se muestra en la Figura 3. La Figura 4 muestra los perfiles de concentración media para cada una de las especies químicas: NO en línea llena (—),  $O_3$  en línea y punto (— • —) y del producto de la reacción  $NO_2 + O_2$  en línea discontinua (— —).

Puede observarse en la Figura 5 la evolución espacial de la concentración media de NO y  $O_3$  en relación a sus valores iniciales obtenidos sobre el eje de la pluma corriente debajo de la fuente (izquierda) y la evolución espacial de la altura del centro de la pluma de NO y los límites inferior y superior de concentración de NO < 2 ppm (derecha).

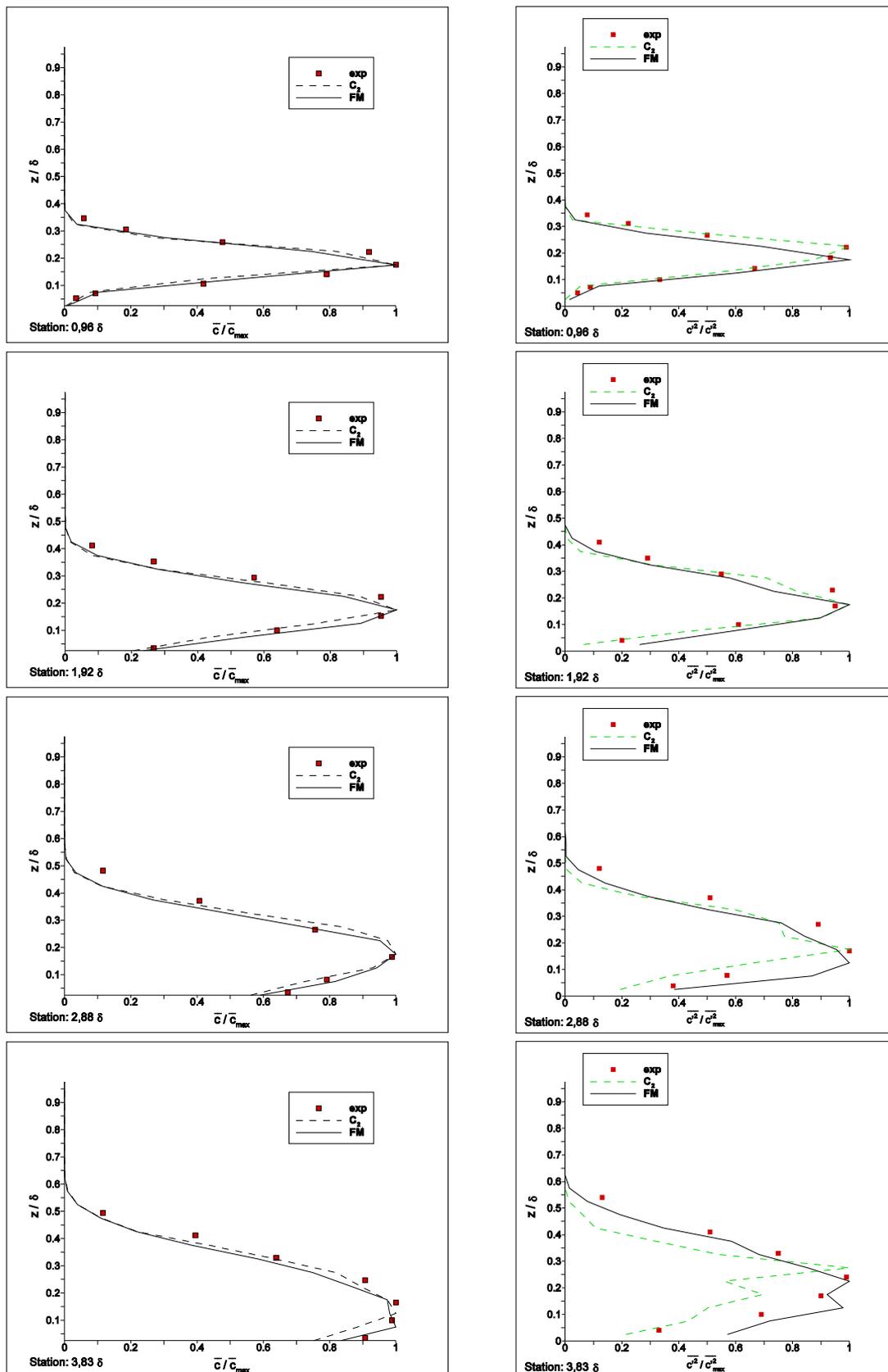


Figura 3: Perfiles de concentración media (izquierda) y desvío estándar (derecha) de la dispersión de la fracción de mezcla (FM) comparada con la dispersión de gas propano ( $C_2$ ). Las líneas indican los resultados calculados y los símbolos representan las mediciones experimentales.

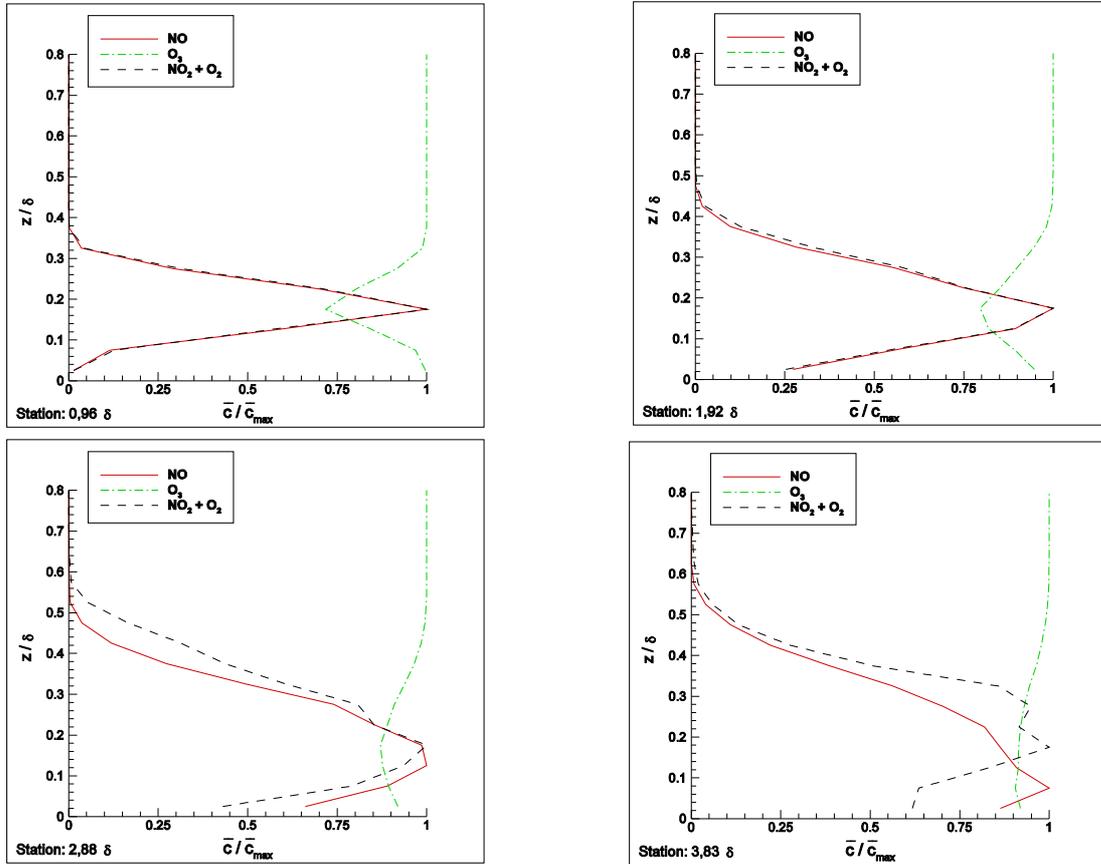


Figura 4: Perfiles de concentración media de la dispersión de NO, O<sub>3</sub> y NO<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> calculadas con el modelo MC.

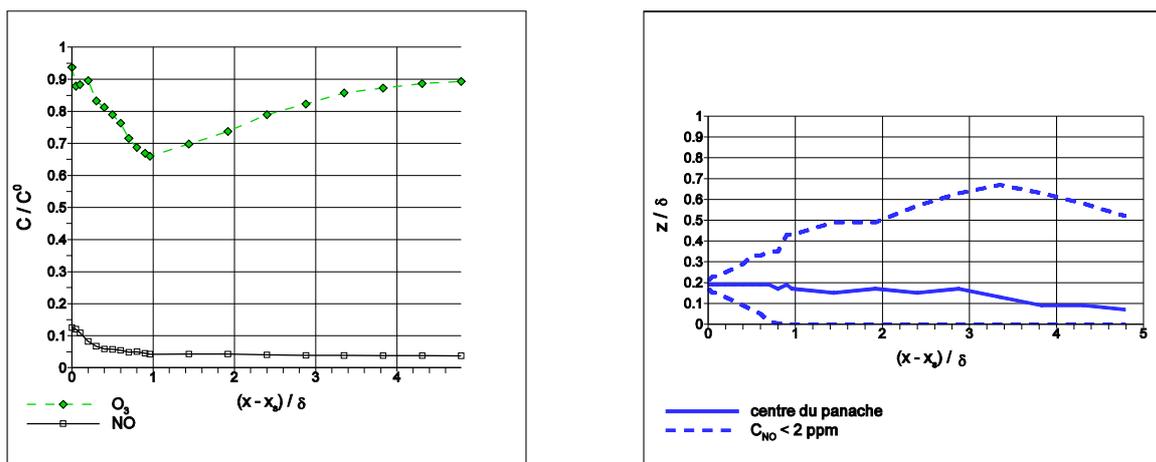


Figura 5: Evolución espacial sobre el eje de la pluma de la concentración media de NO y O<sub>3</sub> (izquierda) y de la altura del centro de la pluma y valores de concentración de NO < 2 ppm (derecha).

## 6 DISCUSIÓN

Con relación a los perfiles de la velocidad media obtenidos a partir de la simulación LES (Figura 1), se observa que los valores más bajos en la zona cercana a la pared fueron los obtenidos a partir del modelo *Smagorinsky dinámico* mientras que un poco más arriba la situación es inversa. De todos modos estas diferencias no son significativas respecto de las mediciones experimentales. Sin embargo, para los perfiles que muestran las fluctuaciones de la velocidad y la energía cinética turbulenta (Figura 2) podemos afirmar que los resultados obtenidos con el modelo *Smagorinsky dinámico* proporcionan los valores más cercanos a las mediciones experimentales. Además, el modelo de pared propuesto por Aguirre (2005) para el coeficiente de disipación viscosa permite obtener valores aún más próximos a los observados por los experimentadores comparándolo con el modelo propuesto por Deardorff (1980) ya que se observa una reducción del pico de energía cerca de la pared para todas las componentes de la velocidad.

Los perfiles de la concentración media de FM de las especies químicas reactivas (Figura 3) están muy próximos a las mediciones experimentales de la dispersión del gas y a los resultados del modelo LES-STO. Sin embargo, para los perfiles del desvío estándar se observa un mejor comportamiento del perfil de la FM frente al modelo LES-STO. Se constata entonces una mayor sensibilidad en las fluctuaciones de la concentración a los fenómenos de difusión molecular.

Los perfiles de la concentración media de las especies químicas reactivas (Figura 4) muestran claramente que existen dos regímenes del campo de la concentración. Para la zona próxima a la fuente de emisión (hasta  $x-x_s \approx 2 \delta$ ) la posición vertical de la concentración máxima de la especie producto de la reacción ( $\text{NO}_2 + \text{O}_2$ ) es coincidente con la posición vertical de la máxima concentración de NO. A la posición  $x-x_s=2,88 \delta$  se percibe una pequeña separación de estos picos mientras que a partir de la posición  $x-x_s=3,83 \delta$  se observa que el pico de máxima concentración para la especie  $\text{NO}_2 + \text{O}_2$  se ubica en el borde superior de la pluma de NO indicando que la reacción química es más intensa en esta zona que en el centro de la pluma.

La evolución espacial de los valores de la concentración media de las especies químicas primarias obtenidos al centro de la pluma (Figura 5) muestran que la concentración de NO disminuye rápidamente a la salida de la chimenea hasta un valor de  $C_{\text{NO}} = 0,12 C_{\text{NO}}^0$ . Luego, la concentración de ambas especies disminuye progresivamente hasta la abscisa  $x - x_s = \delta$ . La concentración de  $\text{O}_3$  crece luego de manera gradual hacia el valor de su concentración inicial mientras que la concentración de NO continúa disminuyendo muy lentamente. Este cambio de comportamiento puede estar ligado al hecho de que a  $x - x_s = \delta$  la reacción química es más lenta que cerca de la fuente de emisión y los fenómenos de la turbulencia introducen  $\text{O}_3$  al interior de la pluma mucho más rápido que la transformación de esta especie producto de la reacción química. Es decir que la reacción química es rápida comparada con el tiempo característico de la turbulencia cerca de la fuente de emisión pero se vuelve lenta a partir de esta abscisa corriente abajo.

## 7 CONCLUSIONES

El modelo *Smagorinsky dinámico* utilizado para el cálculo del tensor de Reynolds de sub-malla de la Simulación de las Grandes Escalas de la turbulencia es el que representa mejor el efecto de la absorción de la energía.

Un modelo de pared de tipo exponencial para simular el efecto de la disipación viscosa de energía es más apropiado que un modelo que presenta una discontinuidad en la región cercana a la pared donde este fenómeno es más intenso.

En relación con la simulación de la dispersión atmosférica de especies se observa que si

bien el modelo LES-STO representa bien los valores medios de la concentración de las mismas para el caso de la experiencia analizada, es importante destacar que si se incluye el modelo de difusión molecular (modelo MC) los perfiles del desvío estándar de la concentración ajustan mejor a las mediciones experimentales.

Si bien no se han comparado en este trabajo los perfiles de cada especie reactiva con mediciones experimentales ya que la experiencia simulada se trata del caso de dispersión de un gas pasivo, los perfiles individuales de la concentración media de las especies y su evolución espacial permiten evaluar el rol de la turbulencia en la velocidad de la reacción. En este caso hipotético de simulación, la reacción puede ser caracterizada como rápida respecto a los tiempos característicos de la turbulencia en la zona próxima a la fuente de emisión mientras que a una distancia de una vez el espesor de la capa límite corriente debajo de la fuente, la reacción comienza a volverse lenta ya que la especie primaria emanada de la misma comienza a agotarse.

## REFERENCIAS

- Aguirre C. A. Dispersión et Mélange Atmosphérique Euléro-Lagrangien de Particules Fluides Réactives. Application à des cas simples et complexes. *Thèse de doctorat. Université Claude Bernard Lyon 1*. **115-2005**, pp 1-323, 2005.
- Aguirre C. A., A. B. Brizuela, I. Vinkovic and S. Simoëns. A subgrid Lagrangian stochastic model for turbulent passive and reactive scalar dispersion. *International Journal of Heat and Fluid Flow*. **27 (4)**, pp 627-635, 2006. URL: [www.elsevier.com/locate/ijhff](http://www.elsevier.com/locate/ijhff)
- Calori G., C. Silibello, M. L. Volta, G. Brusasca and G. R. Carmichael. Application of a Photochemical Modelling System to an Intense Ozone Episode over Northern Italy. *International Conference on Air Pollution Modelling and Simulation. Proceeding APMS'98. Part 1*, pp 1-12, 1998.
- Colucci P., F. Jaber, P. Givi and S. Pope. Filtered Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent Reacting Flow. *Journal of Physics Fluids*. **10**, pp 499, 1998.
- Counihan J. An Improved Method of Simulating an Atmospheric Boundary Layers in a Wind Tunnel. *Atmos. Environment*. **3**, pp 197-214, 1969.
- Curl R. Dispersed Phase Mixing: I. Theory and effects in Simple Reactors. *A. I. Ch. E. Journal*. **9 (2)**, pp 157-181, 1963.
- Deardorff J. W. A Numerical Study of three-dimensional Turbulent Channel Flow. *Journal of Fluid Mechanics*. **41**, 453-480, 1970.
- Deardorff J. W. Stratocumulus-capped mixed layer derived from a three dimensional model. *Journal of Boundary Layer Meteorology*. **18**, pp 495-527, 1980.
- Dopazo C. Probability Density Function Approach for a Turbulent Axisymmetric Heated Jet Centerline Evolution. *Journal of Physics Fluids*. **18 (4)**, pp 397-404, 1975.
- Dopazo C. Relaxation of Initial Probability Density Function in the Turbulent Convection of Scalar Field. *Journal of Physics Fluids*. **22**, pp 20-30, 1979.
- Fackrell J. E. and A. G. Robins. Concentration Fluctuation and Fluxes in Plumes from Point Sources in a Turbulent Boundary Layers. *Journal of Fluid Mechanics*. **117**, pp 1-26, 1982.
- Gao F. and E. O'Briend. A Large-Eddy Simulation schema for Trubulent reacting flow. *Journal of Physics Fluids*. **A5**, pp 1282, 1993.
- Garratt J. R. The Atmospheric Boundary Layers. *Cambridge University Press*. ISBN:0-521-38052-9, 1992.
- Germano M., U. Piomelli, P. Moin and W. H. Cabot. A Dynamic Subgrid-Scale Eddy Viscosity Model. *Journal of Physics Fluids*. **A 3**, pp 1760-1765, 1991.
- Gicquel L. and P. Givi. Velocity filtered Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent flow. *Journal of Physics Fluids*. **14 (3)**, pp 1196-1213, 2002.

- Gong W. A Wind Tunnel Study of Turbulent Dispersion over two – and three- dimensional Gentle Hills from Upwind Point Sources in Neutral Flow. *Boundary Layers Meteorology*, **54**, pp 211-230, 1990.
- Gong W. and A. Ibbetson. A wind tunnel study of turbulent flow over models hill. *Boundary Layers Meteorology*, **49**, pp 113-148, 1989.
- Hess P. G. and S. Madronich. On Tropospheric Chemical Oscillation. *Journal of Geophysical Research*. **102 (15)**, pp 949-965, 1997.
- Jaberi F., P. Colucci, S. James, P. Givi and S. Pope. Filtered Mass Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent Reacting Flow. *Journal of Fluid Mechanics*. **401**, pp 85, 1999.
- Janicka J., W. Kolbe and W. Kollemann. Closure of the Transport Equation for the Probability Density Function of Scalar Fields. *Journal of Non-equilib. Thermodyn.* **4**, pp 47-66, 1978.
- Kleinman L. I. Low and high NO<sub>x</sub> tropospheric chemistry. *Journal of Geographical Research*. **99 (16)**, pp 831-838, 1994.
- Klemp J. B. and R. B. Wilhelmson. The Simulation of three-dimensional convective storm dynamics. *Journal Atmospheric Sciences*. **35**, pp 78-107, 1978.
- Lafore J. P., J. Stein and N. Asencio. The Meso-NH Atmospheric Simulation System. Part 1: Adiabatic Formulation and Control Simulations. *Ann. Geophysical*. **16**, pp 90-109, 1998.
- Langevin P. On the Theory of Brownian Motion. *C. R. Academie des Sciences de Paris*. **146**, pp 530-533, 1908.
- Leonard A. Energy Cascade in Large Eddy Simulation of Turbulent Fluid Flow. *Adv. Geophysics*. **18 A**, pp 237-248, 1974.
- Lilly D. K. The Representation of Small-Scale Turbulence in Numerical Simulation Experiments. *In Proc. IBM Scientific Computing Symposium on Environmental Sciences, IBM Form. N 320-1951*, pp 195-210, 1967.
- Mason P. and N. Challen. On the Magnitude of the Subgrid-Scale Eddy Coefficient in a Large-Eddy Simulation of Turbulent Channel Flow. *Journal of Fluid Mechanics*. **162**, pp 439-462, 1986.
- Michelot C. Développement d'un Modèle Stochastique Lagrangien. Application à la Dispersion et à la Chimie de l'Atmosphère. *Thèse de Doctorat. Ecole Centrale de Lyon. France*, pp 1-180, 1996.
- Pope S. B. The Probability Approach to the Modelling of Turbulent Reacting Flow. *Combust Flame*. **27**, pp 299, 1976.
- Pope S. B. PDF Methods for Turbulent Reactive Flow. *Prog. Energy Combustion Science*. **11**, pp 119-192, 1985.
- Poppe D. and H. Lustfeld. Nonlinearities in the Gas Phase Chemistry of the Troposphere: Oscillating Concentrations in a Simplified Mechanism. *Journal of Geophysical Research*. **101 (14)**, pp 373-380, 1996.
- Schlichting H. Boundary-Layer Theory. *Seven edition Mc GRAW-HILL*. ISBN: 0-07-055334-3, 1979.
- Schumann U. Subgrid Scale Model for Finite Difference Simulation of Turbulent Flow in Plane Channels and Annuli. *Journal of Computational Physics*. **18**, pp 376-404, 1975.
- Seinfeld J. H. Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution. *John Wiley and Sons. Editions*, 1986.
- Sillman S. New Developpement in Understanding the Relation Between Ozone, NO<sub>x</sub> and Hydrocarbons in Urban Atmospheres. *Advanced series in physical chemistry*, pp 145-171, 1995.

- Sillman S., J. A. Logan and S. C. Wosfy. The Sensitivity of Ozone to Nitrogen Oxides and Hydrocarbons in Regional Ozone Episodes. *Journal of Geophysical Research*. **95**, pp 1837-1851, 1990.
- Smagorinsky J. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I. The Basic Experiments. *Mon. Weather Rev.* **91**, pp 99-164, 1963.
- Stewart R. W. Multiple Steady States in Atmospheric Chemistry. *Journal of Geophysical Research*. **98 (20)**, pp 601-611, 1993.
- Tulet P., V. Crassier and R. Rosset. Air Pollution Modeling at a Regional Scale. *International Conference on Air Pollution Modelling and Simulation. Proceeding APMS'98. Part 1*, pp 13-18, 1998.
- Van Driest E. R. On Turbulent Flow Near Wall. *Journal of Aero Science*. **23**, pp 1007-1011, 1956.
- Vinkovic I., C. Aguirre, S. Simoëns and M. Gorokhovski. Large-Eddy Simulation of Droplet Dispersion for Inhomogeneous turbulent Wall flow. *International Journal of Multiphase Flow*. **32**, pp 344-364, 2006a. URL: [www.elsevier.com/locate/ijmulflow](http://www.elsevier.com/locate/ijmulflow)
- Vinkovic I., C. Aguirre, M. Ayrault and S. Simoëns. Large-Eddy Simulation of the Dispersion of Solid Particles in a Turbulent Boundary Layers. *In press to Boundary-Layer Meteorology*, 2006b. URL: [www.springerlink.com](http://www.springerlink.com)
- White W. H. and D. Dietz. Does the Photochemistry of the Troposphere admit more than one Steady State ?. *Nature*. **309**, pp 242-244, 1984.
- Wiener N. Differential Space. *Journal of Math. Phys.* **58**, pp 131-174, 1923.
- Xue M., K. Droegemeier and V. Wong. The Advanced Regional Prediction System (ARPS). A Multi-Scale Nonhydrostatic Atmospheric Simulation and Prediction Model. Part I: Model Dynamics and Verification. *Meteorology Atmospheric Physics*. **75**, pp 161-193, 2000.
- Zegadi R., M. Ayrault and P. Mejean. Effects of a two-dimensional Low Hill in a Thermally neutral and Stably Stratified Turbulent Boundary Layers. *Atmospheric Environment*, **28**, pp 1871 – 1878, 1994.