

SEGUIMIENTO DE TRAZAS DE CONTAMINACIÓN MEDIANTE LA APLICACIÓN DE UN MODELO LAGRANGEANO EN MODO INVERSO

Pablo A. Tarela

Departamento de Computación, Facultad de Ingeniería
Paseo Colón 850 (C1063ACV) Buenos Aires, Argentina
e-mail: ptarela@fi.uba.ar

Palabras clave: Modelo Lagrangeano, Simulación estocástica, Transporte de contaminantes.

Resumen. *La comunicación presenta un modelo computacional para simular el transporte de contaminantes y material particulado en flujos turbulentos. Se describen brevemente los aspectos teóricos del modelo, basado en la técnica de simulación estocástica por seguimiento de partículas Lagrangeanas, los detalles del desarrollo del modelo matemático y su implementación computacional.*

El modelo permite simular el transporte de contaminantes en flujos impermanentes, a través de la superposición de los efectos de advección, difusión efectiva, empuje (flotación y sedimentación) y reacción. Es útil para representar el transporte tanto en el medio acuático como en el atmosférico. Se muestran algunas validaciones del modelo, comparando sus resultados con los de soluciones analíticas, y una breve comparación con otros métodos.

Se presenta una aplicación relacionada a la determinación del origen de emisiones de compuestos orgánicos volátiles en un Polo Industrial. Para ello se corre el modelo en modo inverso, con el objeto identificar la fuente que da lugar a la concentración de contaminantes medida en un punto de inmisión.

1 INTRODUCCIÓN

El problema de determinar el impacto de fuentes de emisión de contaminantes a partir de las tasas de emisión de masa es clásico, y para abordarlo existen numerosas técnicas numéricas. El problema inverso, consistente en determinar el origen e intensidad de la fuente que da lugar a la concentración de contaminantes medida en un punto de inmisión, es mucho menos frecuente, y no hay técnicas de cálculo estandarizadas en el campo de la ingeniería ambiental.

En este trabajo se presenta un modelo de advección y dispersión de cúmulos de partículas dentro de un fluido, basado en la técnica de modelación estocástica Lagrangeana (MEL), que resulta apto para abordar ambos problemas mencionados.

La MEL presenta como principal virtud la de entregar resultados con alta precisión en espacio y tiempo. Por ello, es especialmente apta para resolver problemas de transporte en capa límite de escala corta (problemas de campo cercano, descargas de contaminantes y transporte de sedimentos, etc.), en los cuales la precisión es importante y se pueden aceptar hipótesis simplificativas relacionadas a la dimensión (2D vs 3D) y donde la utilización de correlaciones turbulentas es justificable.

Para aquellos problemas en los cuales el transporte es de escala larga (transporte en grandes lagos, estuarios y el océano, flujo de contaminantes atmosféricos a escala regional), usualmente se requiere menor precisión pero una modelación completamente tridimensional. Entonces, se utiliza un tipo diferente de MEL: un modelo de desplazamiento aleatorio (MDA).

Una propiedad fundamental de la MEL es que mantiene una concentración inicial uniforme de partículas uniforme para todo tiempo, es decir, la denominada condición de buena mezcla (CBM). Dependiendo del tipo de flujo, se deben tener en cuenta ciertas precauciones en la modelación para obtener la CBM¹.

Una corrida de MEL provee un ensayo de un posible ensamble de ensayos. Además, resulta necesario conocer a priori las propiedades dispersivas promedio del ensamble de estados turbulentos del flujo. Esto lleva al problema clásico de la modelación estocástica: determinar cuántas realizaciones (o partículas) son necesarias para obtener un resultado estadísticamente confiable.

Hacia el final de este artículo se muestra la viabilidad del uso de un modelo de seguimiento de partículas en modo inverso, en la resolución del segundo problema originalmente mencionado. Se presenta una aplicación relacionada a la determinación del origen de emisiones de compuestos orgánicos volátiles en un Polo Industrial. En los puntos de inmisión se miden las concentraciones de benceno, tolueno y xilenos mediante el uso de un cromatógrafo portátil. Las mediciones se realizan con el apoyo de una estación meteorológica que registra las condiciones atmosféricas en forma continua, las cuales sirven para alimentar el modelo. El uso del modelo permite descartar fuentes potenciales e incluso visualizar otras inicialmente no consideradas, demostrando la potencialidad de la metodología propuesta.

2 BASES TEORICAS

2.1 Esquemas MEL y MDA

La teoría detrás de la MEL está bien descrita en la literatura², por lo que aquí sólo se presenta una breve reseña. El punto de partida para la MEL es la ecuación 3D de Langevin³, que contiene un término determinístico de deriva y un término estocástico de difusión. El acierto de la MEL consiste en determinar formas con sentido físico para ambos términos. La ecuación diferencial estocástica resultante tiene asociada una función de densidad de probabilidad cuya evolución es descrita por una ecuación de Fokker-Plank (FP).

A su vez, esta última es una forma diferencial de la ecuación de Chapman-Kolmogorov para un proceso Markoviano. En forma sencilla, tal proceso es uno en el cual la probabilidad de un dado estado futuro es independiente del pasado, dependiendo solamente del presente más una regla de transición (definida por la densidad de probabilidad) que transforma desde el presente hacia el futuro.

La ecuación de FP es la llave para hallar expresiones para las funciones de deriva y difusión, ya que provee un vínculo entre la densidad de probabilidad y las propiedades estadísticas del flujo que pueden ser derivadas de la ecuaciones de gobierno Eulerianas. Los métodos de solución tradicionales involucran la restricción fundamental de que la CBM sea verificada. Además, se requiere que la estadística del flujo representada por la MEL sea equivalente a la estadística derivada de la ecuaciones de gobierno Eulerianas. Thomson¹ demostró que, en realidad, ambos requerimientos son idénticos.

La MEL se considera válida para escalas de tiempo en el rango entre la escala de tiempo de Kolmogorov y la escala de tiempo Lagrangeana (T_L). Aunque existen soluciones para problemas 1D, en el caso de modelación estocástica 3D la complejidad de las mismas es tal que resulta preferible utilizar un MDA. Estos pueden considerarse como el límite de difusión de la MEL, y se puede mostrar que el MDA es equivalente a un modelo de advección-difusión⁴. De esta manera, el MDA constituye una alternativa simple, única y 3D a la MEL, válida para escalas de tiempo mucho mayores que la Lagrangeana.

Las principales ventajas de las soluciones obtenidas con un MDA sobre aquellas provenientes de las ecuaciones de advección-difusión son:

- No se sobrestima la dispersión para tiempos menores a T_L
- Son más precisas en la zona de campo cercano
- Son más precisas en flujos sobre terrenos (geometría) complicados

2.2 Alcance del presente modelo

El MDA presentado en este trabajo resuelve la siguiente generalización de la ecuación de advección-difusión, para el caso de un conjunto de especies reactivas:

$$\frac{\partial C_n}{\partial t} + U_i \frac{\partial C_n}{\partial r_i} = \frac{\partial}{\partial r_i} \left(K_{ij} \frac{\partial C_n}{\partial r_j} \right) + \phi_{nm} \quad n, m = 1, N \quad (1)$$

donde C_n es la concentración de la n-ésima especie representada, t el tiempo, U_i la i-ésima componente del vector velocidad del flujo, r_i la i-ésima componente del vector posición, K_{ij} la difusividad de torbellino, ϕ_{nm} un término de interacción entre las especies n y m , y N el número total de especies. El término especie aquí indica cierta propiedad distintiva de la partícula (diámetro de sedimento o burbuja, tipo de huevo o larva, componente químico, nivel de temperatura, etc.).

3 MODELO NUMERICO

3.1 Discretización fluidodinámica

El modelo computacional está planteado actualmente sobre una malla espacial tridimensional estructurada, de forma rectangular y con elementos horizontales rectangulares. La red espacial vertical puede ser irregular, y provenir tanto de una discretización en coordenadas cartesianas como coordenadas sigma. La figura 1 muestra el esquema de discretización de las variables fluidodinámicas necesarias para alimentar externamente el modelo. Se trata de una malla del tipo staggered. Se ha asociado la coordenada z con la vertical gravitatoria.

Esta elección de la primer versión operativa del modelo es restrictiva, pero admite el uso de múltiples modelos fluidodinámicos en forma directa. Para modelos basados en el método de los elementos finitos, el presente esquema puede ser utilizado directamente si los elementos son tetraédricos, especialmente para aquellos de interpolación mixta y 27 nodos.

3.2 Advección

La MEL, y en particular el MDA, son especialmente aptos para simular el transporte advectivo, ya que tales representaciones excluyen la aparición de errores de truncamiento provenientes de la discretización de la ecuación de advección-difusión. Para controlar el error asociado al movimiento advectivo en un MDA sólo es necesario limitar el paso temporal entre dos movimientos sucesivos de la misma partícula. Obviamente, una buena representación requiere de un campo de velocidades medias lo suficientemente denso en información espacial y temporal.

Para las discretizaciones útiles a este modelo (ver figura 1), la velocidad media advectiva $\mathbf{u}_{ap}=(u_{ap},v_{ap},w_{ap})^T$ de una partícula ubicada en el punto $\mathbf{r}_p=(x_p,y_p,z_p)^T$ de la celda (i,j,k) se determina mediante interpolación trilineal:

$$\begin{aligned} u_{ap} &= f_u u_{i,j,k} + (1-f_u)u_{i+1,j,k} \\ v_{ap} &= f_v v_{i,j,k} + (1-f_v)v_{i,j+1,k} \\ w_{ap} &= f_w w_{i,j,k} + (1-f_w)w_{i,j,k+1} \end{aligned} \quad (2)$$

$$f_u = \frac{1}{2} - \frac{x_p - x_{i,j,k}^c}{\Delta x} \quad f_v = \frac{1}{2} - \frac{y_p - y_{i,j,k}^c}{\Delta y} \quad f_w = \frac{1}{2} - \frac{z_p - z_{i,j,k}^c}{\Delta z} \quad (3)$$

siendo $\mathbf{r}^c = (x_{i,j,k}^c, y_{i,j,k}^c, z_{i,j,k}^c)^T$ el punto central del tetraedro que define la celda (i,j,k) y $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ sus dimensiones, de acuerdo a la definición de la figura 1.

El desplazamiento de cada partícula obedece a una suma de fenómenos, pero se puede determinar a partir de una velocidad efectiva. La primer componente de tal velocidad es la que se obtiene a partir de (2), presentándose a continuación las demás componentes representadas en este modelo.

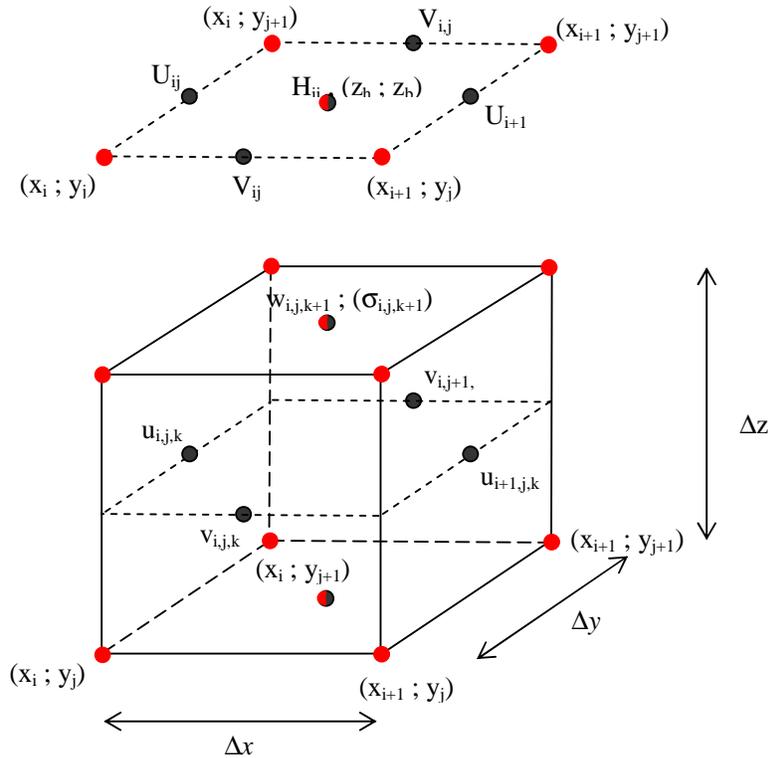


Figura 1 - Esquema de discretización de las variables fluidodinámicas 2D (arriba) y 3D (abajo). $H_{ij} = z_h - z_b =$ profundidad local, $z_h =$ cota de la superficie libre o capa de inversión, $z_b =$ cota del fondo o superficie del terreno, $U_{ij}, V_{ij} =$ componentes horizontales del campo 2D de velocidades, $u_{ij}, v_{ij}, w_{ij} =$ componentes del campo 3D de velocidades, $\sigma_{ij} =$ coordenadas sigma, $x_i, y_j =$ coordenadas cartesianas horizontales.

3.3 Difusión

Los efectos turbulentos que dan lugar al carácter difusivo del flujo, se simulan aplicando la técnica de Monte Carlo. La misma consiste en representar la magnitud del proceso difusivo a través de un coeficiente de difusividad K , de modo tal que la distancia media cuadrática recorrida por una partícula durante el intervalo de tiempo Δt es:

$$\delta_{dp} = \sqrt{2K\Delta t} \quad (4)$$

El coeficiente K depende de las condiciones locales de turbulencia, y es en realidad una simplificación del tensor K_{ij} de difusividad de torbellino definido en (1). En muchos casos de flujos ambientales se puede asumir que la dispersión turbulenta es proporcional a la velocidad local. Por ejemplo, resulta conveniente expresar el tensor de difusividad de torbellino localmente en la siguiente forma diagonal:

$$K_{ij} = K_j \delta_{ij} \quad (5)$$

donde las direcciones implícitas en (5) son la dirección principal de movimiento y las transversales.

Utilizando las últimas dos ecuaciones, se puede definir la velocidad “difusiva” de una partícula en la dirección j , a través de:

$$u_{dp,j} = \alpha_j \frac{\delta_{dp}}{\Delta t} = \alpha_j \sqrt{\frac{2K_j}{\Delta t}} \quad (6)$$

donde α_j representa el carácter aleatorio del flujo turbulento, y para turbulencia isotrópica tiene asociada una distribución de probabilidad Gaussiana. Dado un generador de números aleatorios uniformemente distribuidos entre 0 y 1, $U_{01,j}$, entonces la velocidad difusiva efectiva en cada paso de tiempo se computa como⁴:

$$u_{dp,j} = (2U_{01,j} - 1) \sqrt{\frac{6K_j}{\Delta t}} \quad (7)$$

Los coeficientes de difusividad de torbellino se pueden expresar en términos de las propiedades locales del flujo. En el caso de los flujos ambientales hídricos de mayor interés (en general, flujos de corte a superficie libre), los coeficientes de difusión son funciones de la velocidad local^{5,6,7}. Para el caso de flujos ambientales atmosféricos, una posible elección es utilizar las desviaciones estándar propuestas por Hanna et al.⁸. Si fuera necesario, resulta trivial incorporar el efecto de la difusión molecular⁴.

3.4 Partículas con empuje propio

La CBM está planteada para partículas con flotación neutra, es decir, aquellas que actúan como parcelas de fluido. Desafortunadamente, no existe una teoría de MEL satisfactoria para partículas no pasivas. Algunas soluciones pueden hallarse en la literatura^{9,10}, pero cuando las velocidades de deposición o flotación son importantes se debe tener especial atención.

Para partículas con densidad intrínseca superior a la del medio se considera una velocidad neta de caída actuando en la dirección vertical. El caso complementario corresponde a especies con densidad intrínseca inferior a la del medio, de modo tal que aparece un efecto neto de flotación. Para simular estas especies se consideran partículas sometidas a la acción de la gravedad efectiva. Considerando que el recorrido (únicamente vertical) de una de tales partículas durante el intervalo Δt es lo suficientemente pequeño como para que su aceleración pueda considerarse constante, entonces la velocidad media del recorrido se puede expresar como:

$$w_{ep,n} = -\Delta_n g \Delta t \quad (8)$$

donde $\Delta_n \equiv \rho_{sp,n} / \rho - 1$, siendo $\rho_{sp,n}$ la densidad intrínseca de las partículas de la especie n , ρ la densidad del medio fluido y g es la aceleración de la gravedad.

La expresión (8) se puede generalizar para casos donde la concentración es tal que modifica las propiedades de caída, la cual deja de ser libre¹¹.

3.5 Reacción

La implementación en el modelo de los términos de interacción depende del tipo de fenómeno a simular. Para el caso particular del término de autointeracción, si se considera una reacción de primer orden resulta:

$$\phi_{nn} = R_n = -K_n C_n \quad (9)$$

donde K_n es la tasa de reacción para la especie n . La ecuación (9) está planteada para el caso de un decaimiento neto de masa.

Se pueden aplicar dos tipos de simulación para este tipo de reacciones:

- *Simulación "Booleana"*: las partículas se crean o destruyen en cada paso de tiempo (cambia el número de partículas), pero conservan su masa mientras están en el fluido.
- *Simulación "Atenuada"*: se conserva el número de partículas simuladas, las cuales no conservan masa.

En el primer caso, se aplican leyes estocásticas de generación/destrucción de partículas, cuyas estadísticas responden a las respectivas tasas de reacción. Esta formulación es inherente al MDA, en el sentido de que las partículas conservan identidad, pero su implementación es algo más complicada.

En el segundo, la masa de cada partícula se modifica en función del tiempo y de la tasa de reacción. Aunque las partículas pierden identidad (especialmente cuando representan organismos) la implementación resulta directa.

En esta primera versión del modelo computacional se utiliza el concepto de *simulación atenuada*. Para determinar la evolución de la masa de cada partícula se resuelve la ecuación de movimiento de la respectiva especie, suponiendo ausencia de advección y difusión y despreciando la interacción con otras especies (la cual se modela aparte):

$$\frac{\partial C_n}{\partial t} = -K_n C_n \quad (10)$$

Aplicando una condición inicial apropiada, a partir de (10) se deduce que la masa de cada partícula sigue la ley:

$$m_n(t) = m_n(t_i) e^{-K_n(t-t_i)} \quad (11)$$

donde t_i es el instante a partir del cual comienza la reacción (usualmente el momento en el cual la partícula es inyectada en el fluido) y $m_n(t_i)$ la masa de la partícula al comienzo de la reacción.

3.6 Desplazamiento de las partículas

El desplazamiento de cada partícula durante el intervalo Δt se lleva a cabo aplicando la ecuación:

$$\Delta \mathbf{r}_p = \mathbf{u}_{ef} \Delta t \quad (12)$$

donde el desplazamiento y la velocidad efectiva de la partícula se calculan, respectivamente, como

$$\Delta \mathbf{r}_p = \mathbf{r}_p(t + \Delta t) - \mathbf{r}_p(t) \quad (13)$$

$$\mathbf{u}_{ef} = \mathbf{u}_{ap} + \mathbf{u}_{dp} + \mathbf{u}_{ep} \quad (14)$$

3.7 Condiciones de borde

Las condiciones de borde aplicadas dependen directamente del tipo de flujo simulado y, fundamentalmente, de la posible interacción entre los contaminantes y los bordes físicos del dominio bajo estudio. La interacción se traslada directamente a las partículas.

El modelo contempla una serie extensa de condiciones simulables, y aquí se presenta sólo un resumen de ellas, las cuales están desarrolladas en la Referencia 4.

Sobre bordes sólidos debe ser implementado un esquema de reflexión/absorción. El mismo debe satisfacer la CBM, para lo cual es en general suficiente forzar la turbulencia a la homogeneidad cuando las partículas se aproximan a un contorno. Como en general existe una capa límite sin resolver, esta condición se debe imponer artificialmente.

En el caso de contornos reflexivos, se dispone de tres condiciones (ver Figura 2):

- *Reflexión conservativa*: en este caso la interacción de la partícula con el borde sólido se realiza sin pérdida de energía cinética.
- *Reflexión no conservativa*: en este caso la interacción de la partícula con el borde sólido se realiza con pérdida parcial de energía cinética.
- *Reflexión mínima*: En este caso la interacción de la partícula con el borde sólido se realiza con pérdida total de energía cinética (es el caso límite inferior del anterior, pero se evita que la partícula quede sobre el borde sólido).

En segundo término, los contornos sólidos pueden ser absorbentes. Se dispone de dos esquemas:

- *Absorción total*: en este caso la interacción de la partícula con el borde sólido se realiza con pérdida total de energía cinética. Una vez absorbida, la partícula podrá ser eliminada del cálculo o reinyectada desde el punto **B**, dependiendo de las propiedades de la misma y las del borde sólido.
- *Absorción parcial*: En este caso, el proceso de absorción está gobernado por una función de probabilidad que depende tanto de las propiedades de la partícula como de las condiciones del flujo y las del borde sólido^{12,13}. Es de particular interés en la simulación de procesos de erosión y sedimentación.

Otro tipo de contornos son los semipermeables, para los cuales se define una función de probabilidad que establece qué chances tiene una partícula de atravesarlo.

También existe el contorno abierto, definido como toda cara de una celda de fluido que pertenece a la superficie del dominio de cálculo, y que implica la continuidad del fluido en la zona exterior al dominio mencionado. Entre los contornos abiertos se cuentan las superficies de entrada y salida de fluido, aberturas en paredes sólidas, esclusas de fondo, etc. Cuando el movimiento definido por (12) es tal que la partícula se desplaza más allá del dominio de cálculo, atravesando un borde abierto, entonces la misma es descartada, eliminándose del cálculo a partir de ese momento.

Finalmente, en la superficie libre generalmente se impone flujo nulo de partículas si se trata del medio acuático o reflexión si se trata de una capa de inversión atmosférica.

Existen algunos casos particulares de flujo en medio acuático en los cuales las partículas no vuelven a sumergirse:

- *Flotación permanente*: cuando las partículas tienen una densidad inferior a la del fluido para todo tiempo y la turbulencia no es lo suficientemente intensa como para producir su inmersión temporal, las mismas viajan permanentemente en superficie,
- *Inmiscibilidad*: para partículas que representan un fluido inmiscible con densidad inferior a la del medio, se impone como condición en la superficie libre la restricción a la inmersión, de modo que el movimiento resulta confinado a tal superficie.
- *Volatilidad*: para partículas volátiles que alcanzan la superficie libre, se impone una condición de liberación a la atmósfera en función de las propiedades locales de volatilidad.

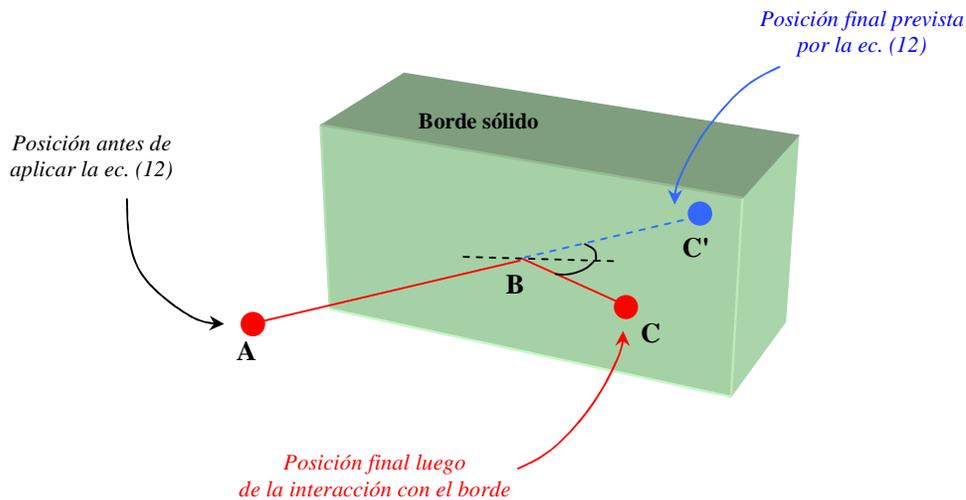


Figura 2 - Esquema de las condiciones de borde sobre contornos sólidos.
 Reflexión conservativa: $\overline{BC} = \overline{BC'}$. Reflexión no conservativa: $\overline{BC} < \overline{BC'}$.
 Reflexión mínima: $\overline{BC} \ll \overline{BC'}$. Absorción: $\overline{BC} = 0$.

3.8 Paso de tiempo

Típicamente, la MEL utiliza una discretización temporal explícita para la componente

estocástica. En turbulencia inhomogénea, donde T_L cambia con la posición, resulta tentador utilizar un esquema adaptivo donde el paso de tiempo cambia de acuerdo al valor local de T_L , en lugar de uno en el cual $\Delta t < \min(T_L)$. Sin embargo, tal esquema puede conducir a un sesgo en los desplazamientos, que entonces presentan una deriva sin realidad física¹⁴. Luego, resulta más seguro utilizar el clásico esquema de discretización con paso temporal constante.

En este último caso, el paso temporal entre desplazamientos consecutivos de las partículas está limitado, de modo de asegurar que las partículas sigan las líneas de corriente del flujo:

$$\Delta t \leq \Delta t_{max} \equiv \min \left(\frac{\Delta x}{\max |\mathbf{u}_{ef} \cdot \hat{x}|}, \frac{\Delta y}{\max |\mathbf{u}_{ef} \cdot \hat{y}|}, \frac{\min(\Delta z)}{\max |\mathbf{u}_{ef} \cdot \hat{z}|} \right) \quad (15)$$

Una forma alternativa a (15), más simple de evaluar, es:

$$\Delta t \leq \min(\Delta t_a, \Delta t_d, \Delta t_b) \quad (16)$$

donde se consideran por separado los efectos advectivos, difusivos y de empuje⁴.

En el caso de flujos impermanentes, en general el paso de tiempo del MDA resulta inferior al de la discretización fluidodinámica. En tales circunstancias, los campos se interpolan linealmente para obtener los valores temporales intermedios requeridos.

3.9 Campo de concentración

Para obtener los campos continuos de concentración se requiere de una transformación que actúe sobre la distribución discreta de partículas. El modelo trabaja por defecto con el esquema PIC (*Particle In Cell*), que consiste en subdividir en forma regular la grilla original y determinar la concentración (uniforme) de la especie j en cada subcelda s mediante:

$$C_{s,j} = \frac{\sum_{p \in s} m_{p,j}}{\nabla_s} \quad (17)$$

donde $m_{p,j}$ es la masa de la partícula p de la especie j y ∇_s es el volumen de la subcelda s

$$\nabla_s = \frac{\Delta x \Delta y \Delta z_k}{N_x N_y N_z} \quad (18)$$

siendo Δz_k la altura de la celda de la grilla original dentro de la cual se encuentra la subcelda s y N_i el número de subdivisiones de cada celda de la grilla original en la dirección i . Entre sus principales ventajas, el método PIC conserva la masa (por definición) y resulta de fácil implementación.

4 VALIDACION

Para validar la implementación computacional del modelo se realizaron una serie de ensayos, presentados brevemente aquí. En primer lugar se realizó un ensayo bajo condiciones

de difusión pura⁴. Este ensayo consiste en simular la inyección puntual e instantánea, en un fluido en reposo, de una masa de un contaminante pasivo cuya densidad específica es idéntica a la del fluido (de modo de inhibir procesos de flotación o sedimentación). Luego, el único mecanismo de transporte activo es la difusión molecular, de modo que este ensayo permite observar el comportamiento del módulo de caminante aleatorio del modelo. La figura 3 presenta la comparación de la concentración resultante del modelo, en función del tiempo, respecto de la solución analítica que es posible hallar en este caso simplificado. El acuerdo es muy bueno para todo tiempo.

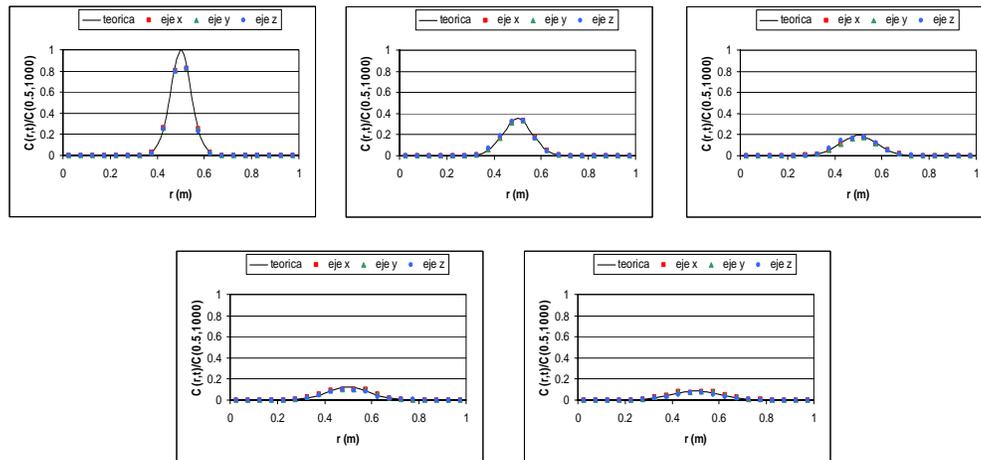


Figura 3 - Distribución de partículas sobre los ejes de la grilla de cálculo, para tiempos crecientes del proceso de difusión pura.

En el segundo ensayo se simuló el transporte de una mancha de contaminante pasivo inyectada en un flujo en rotación estacionaria y uniforme. Se considera que el flujo es laminar, y que no hay procesos de flotación o sedimentación. Luego, el único mecanismo de transporte activo es la advección, de modo que este ensayo permite observar el comportamiento del módulo advectivo del modelo. La figura 4 muestra la mancha resultante luego de una rotación completa, para distintos pasos de tiempo, poniendo de manifiesto la necesidad de controlar este parámetro, como era de esperar. Para los pasos de tiempo apropiados, el modelo responde correctamente.

Se comparó la performance del modelo con idéntico ensayo y el uso de un modelo que resuelve directamente la ecuación de advección-difusión¹⁵. Se utilizaron las técnicas de upwinding, Lax-Wendroff y TVD (*Total Variation Diminishing*). Como se observa en la figura 5, en todos los casos, bajo un esfuerzo de cálculo similar aparecen desviaciones respecto de la solución teórica (movimiento rígido de la mancha inicial, sin deformación) para todos los esquemas, indicando la presencia de difusión numérica, la cual puede controlarse adecuadamente con el uso del modelo Lagrangeano presentado aquí.

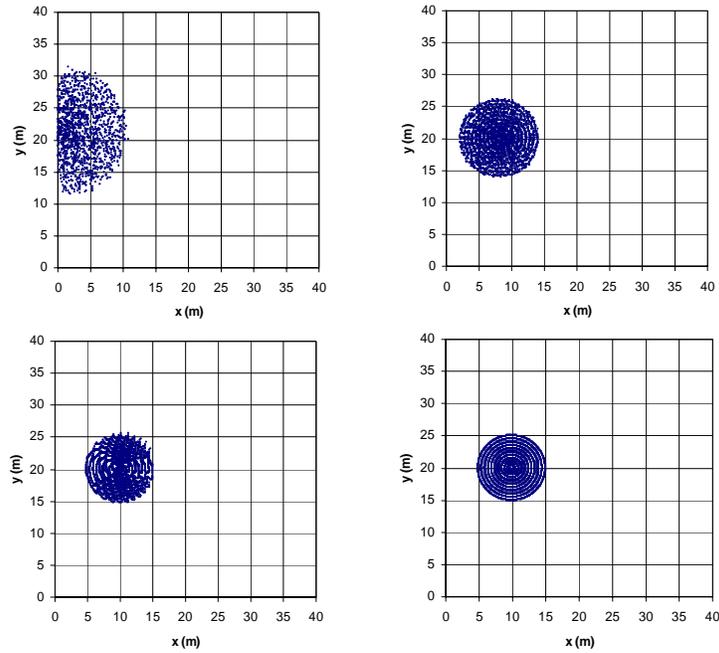


Figura 4 – Distribución de partículas luego de la primer rotación, para pasos de tiempo decrecientes en orden lexicográfico. La última solución es la única aceptable.

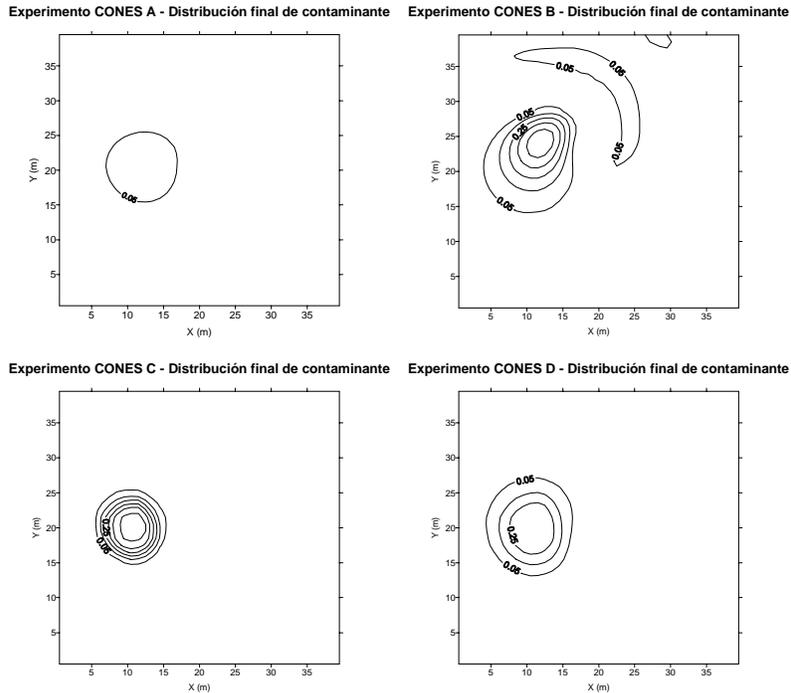


Figura 5 – Soluciones obtenidas aplicando distintas técnicas de discretización de la ecuación de advección-difusión. A=Upwind, B=Lax – Wendroff, C=TVD “superbee”, D=TVD monótona.

Finalmente, se simuló el caso del flujo estacionario de un contaminante pasivo derramado sobre un flujo uniforme, el cual también cuenta con solución analítica. La figura 6 muestra la nube de partículas resultante, y la figura 7 muestra el proceso de convergencia hacia la solución teórica con el aumento de la cantidad de partículas inyectadas. En el primer caso el resultado luce muy realista, y en el segundo se puede corroborar que, nuevamente, el modelo responde correctamente.

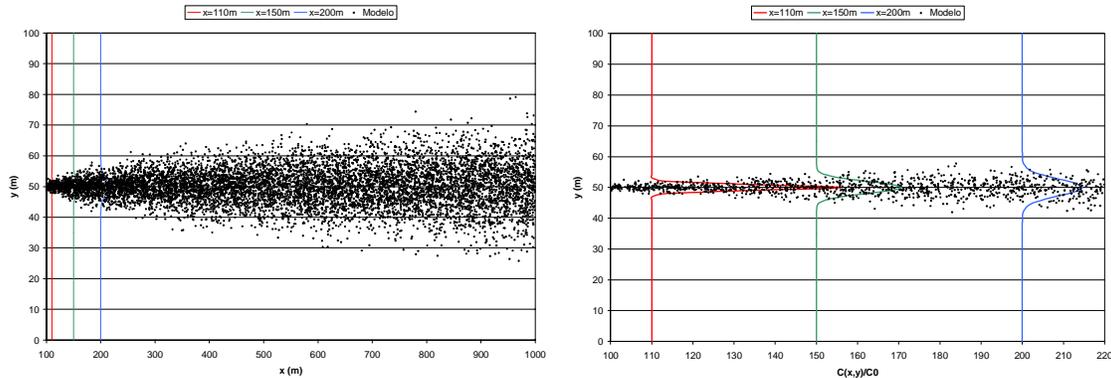


Figura 6 – Arriba: Campo lejano para un derrame estacionario en un flujo uniforme. Abajo: Campo cercano e intermedio. En ambos casos las líneas continuas representan la solución analítica.

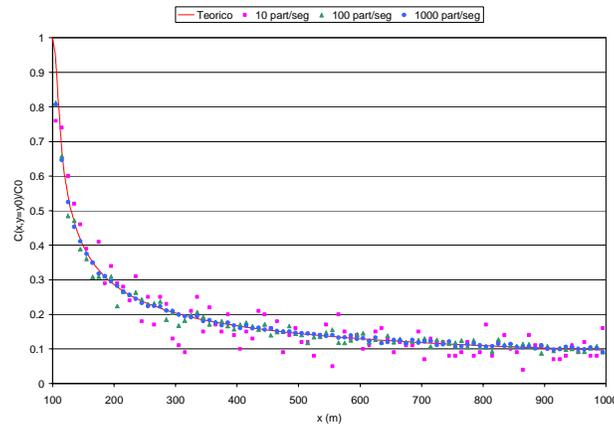


Figura 7 – Proceso de convergencia en la evolución de la concentración máxima aguas abajo.

5 APLICACION A UN PROBLEMA INVERSO

Con motivo de la evaluación de la calidad del aire en la zona del Polo Petroquímico de Dock Sud (Prov. de Buenos Aires), se realizaron campañas de monitoreo con equipos portátiles de cromatografía. Se determinó la concentración de compuestos orgánicos volátiles (VOC) como benceno, tolueno y p-xileno. Las mediciones se realizaron en forma instantánea y puntual, determinándose una grilla de puntos de inmisión.

Uno de los objetivos del estudio fue tener una primera aproximación sobre el origen de las liberaciones de estos compuestos. Se planteó, entonces, combinar los datos de las mediciones con el uso del modelo aquí presentado, de modo de determinar desde qué zonas podrían ocurrir las emisiones.

Para el uso del modelo de seguimiento de partículas, el campo de velocidad de viento fue estimado a partir de los registros de una estación meteorológica de monitoreo continuo. Los parámetros de dispersión se calcularon en cada momento utilizando la técnica indicada en la sección 3 y los datos meteorológicos registrados.

El modelo fue utilizado en modo inverso, es decir, corriendo el campo de velocidades y las condiciones de dispersión hacia atrás en el tiempo. Si bien el proceso de difusión efectiva en la atmósfera es termodinámicamente irreversible, no hay limitación en el uso del modelo computacional para la simulación en contra de la flecha del tiempo.

Aceptada esta metodología, en la figura 8 se muestran las trayectorias inversas de unos 10 puntos de inmisión medidos, indicando una amplia zona como de probable origen de los VOC liberados. En el análisis, no reproducido aquí por razones de extensión del trabajo, se determinó un índice de recurrencia por zonas, que involucra los resultados del modelo, la intensidad de las concentraciones medidas y el uso industrial o portuario de cada zona.

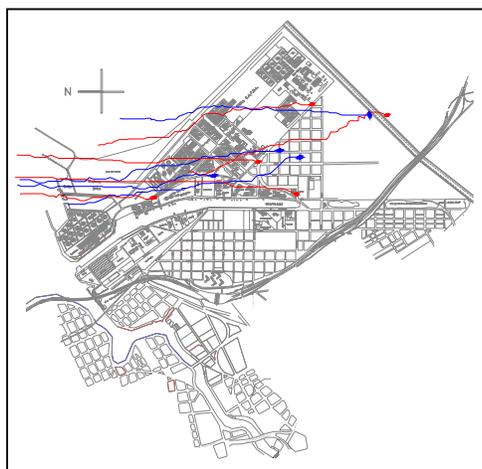


Figura 8 - Trayectorias inversas para distintos puntos de inmisión medidos.

Ahora bien, las trayectorias recién mostradas corresponden al camino más probable para una partícula fluida. Pero el origen de emisión podría no estar sobre esta trayectoria, si se tiene en cuenta el efecto de la dispersión atmosférica. Para ello, se realizaron ensayos para múltiples partículas y se determinó la zona de probable emisión, definida como aquella para la cual el 99% de las partículas caen en su interior. La figura 9 muestra un par de ejemplos, donde se indican la trayectoria inversa más probable (idem figura 8) y ambas envolventes conteniendo el 99% de las partículas. Nótese que, a medida que crece la distancia al punto de inmisión, aumenta el área de probable emisión.

En los casos en que se realizó un monitoreo continuo y se detectaron picos, su duración

permitió restringir la zona de probable emisión, hasta prácticamente identificar la fuente, como sucede en el caso del área portuaria indicada en la figura 10.

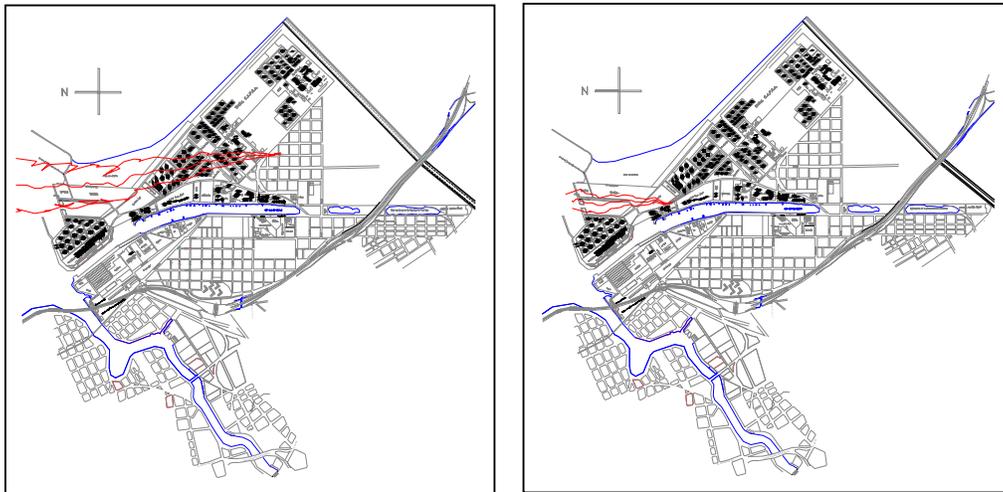


Figura 9 – Trayectorias inversas y envolventes para dos puntos de inmisión.

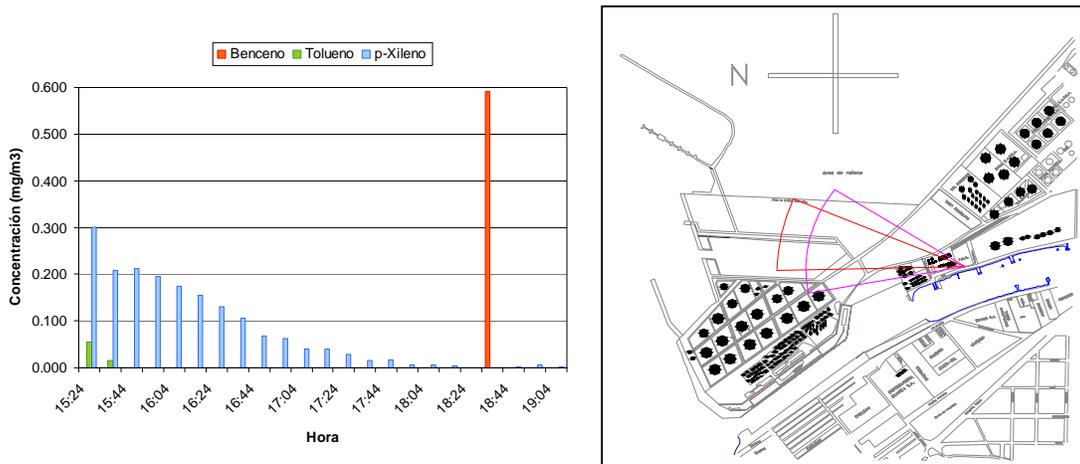


Figura 10 – Izq.: Concentración de VOC en monitoreo continuo. Der.: Área de probable emisión de Benceno. El área en rojo indica la zona definida por las condiciones medias de viento, mientras que el área en rosa incluye el efecto de la turbulencia.

6 CONCLUSIONES

El trabajo presentó un modelo computacional para el transporte de contaminantes y material particulado en flujos ambientales. La técnica de simulación se basa en el método de desplazamientos aleatorios por seguimiento de partículas Lagrangeanas.

Se presentaron los detalles teóricos del modelo y se mostró la validación de su

implementación computacional con ensayos bajo condiciones controladas. El modelo mostró una muy buena performance e incluso ciertas ventajas sobre esquemas numéricos basados en la solución directa de la ecuación de advección-difusión.

Se destaca la utilidad del modelo en su utilización para resolver un problema inverso, consistente en la identificación de fuentes a partir de mediciones en puntos de inmisión.

7 RECONOCIMIENTOS

La aplicación al Polo Petroquímico de Dock Sud fue realizada en el marco de un estudio llevado a cabo por JMB S.A. y financiado por la Japan International Cooperation Agency (JICA), Organismo al cual se reconoce su apoyo.

El autor desea agradecer a JICA por la posibilidad de utilizar los resultados de mediciones y modelación en la confección del presente trabajo.

8 REFERENCIAS

- [1] **Brickman, D. And Smith, P.C.**, *Lagrangian Stochastic Modelling in Coastal Oceanography*, accepted aith revision by JOAT (2001)
- [2] **Rodean, H.C.**, *Stochastic Lagrangian models for turbulent diffusion*, American Meteorological society, 45 Beacon St., Boston MA 02108 (1996)
- [3] **Gardiner, C.W.**, *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences*, Springer-Verlag, Berlin (1983)
- [4] **Tarela, P.A.**, *Modelo Lagrangeano para el transporte de contaminantes y material particulado en flujos turbulentos*, Informe INA – LHA 201-04-03 (2003).
- [5] **Fisher, H.B.**, *Longitudinal dispersion and turbulent mixing in open channel flow*, Annual Review of Fluid Mechanics, vol. 5, Annual Reviews Inc., Palo Alto (1973)
- [6] **Holley, E.R.**, *Unified view of diffusion and dispersion*, Journal of the Hydraulics Division, Proceedings of the ASCE, **95** HY2, pp. 621-631 (1969)
- [7] **Holly, F.M.**, *Accurate calculations of transport in two dimensions*, Journal of the Hydraulics Division, Proceedings of the ASCE, **103** HY11, pp. 1259-1277 (1977)
- [8] **Hanna, S.R., Briggs, G.A. and Hosker, R.P.**, *Handbook of Atmospheric Diffusion*, DOE/TIC-11223, Dept. of Energy, 102 pp. (1982).
- [9] **Swaford, B.L. and Guest, F.M.**, *Lagrangian statistical simulation of the turbulent motion of heavy particles*, Boundary Layer Meteorology, **54**, pp. 147-166 (1991).
- [10] **Zhuang, Y., Wilson, J.D. and Lozowski, E.P.**, *A trajectory-simulation model for heavy particles motion in turbulent flow*, Journal of Fluids Engineering, **111**, pp. 492-494 (1989).
- [11] **Tarela, P.A.**, *Sedimentación en reservorios: modelación matemática y simulación numérica*, Tesis de Doctorado en Ingeniería, Fac. de Ingeniería, Univ. de Buenos Aires (2000).
- [12] **Krone, R.B.**, *Flume studies of the transport of sediment in estuarial shoaling proceses*, Hydraulic Engineering Laboratory, University of California, Berkeley (1962)
- [13] **Partheniades, E.**, *A study of erosion and deposition of cohesive soils in salt water*, Ph.D. Thesis, University of California, Berkeley (1962)
- [14] **Wilson, J.D. and Flesh, T.K.**, *Flow boundaries in random flight dispersion models: Enforcing the well-mixed condition*, J. of Applied Meteorology **32**, pp. 1695-1707, (1993)
- [15] **MUMM**, Management Unit of the Mathematical Models of the North Sea, *Coherens* (1999).