

UNIVERSIDAD FEDERICO SANTA MARÍA



3 5609 00033 3358

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA

DEPARTAMENTO DE MECÁNICA

**MODELACIÓN NUMÉRICA DE LA DISPERSIÓN DE
CONTAMINANTES EN CALLES Y TERRENOS DE
GEOMETRÍA COMPLEJA**

Tesis de Grado presentada por

Carlos Eduardo Rosales Huerta

como requisito parcial para optar al grado de

Magister en Ingeniería Mecánica

Profesor Guía
Dr. Fernando Carvajal G.

Agosto de 1997



TÍTULO DE LA TESIS:

**MODELACIÓN NUMÉRICA DE LA DISPERSIÓN DE
CONTAMINANTES EN CALLES Y TERRENOS DE
GEOMETRÍA COMPLEJA**

AUTOR:

CARLOS EDUARDO ROSALES HUERTA

TRABAJO DE TESIS, presentado en cumplimiento parcial de los requisitos para el Grado de Magister en Ingeniería Mecánica de la Universidad Técnica Federico Santa María.

Dr. Fernando Carvajal G.

Dr. Fernando Labbé Z.

Dr. Nelson Moraga B.

Valparaíso, Chile, Agosto de 1997

Resumen

En este trabajo se desarrolla una modelación numérica de la dispersión de substancias contaminantes emitidas a la atmósfera en zonas de dimensiones reducidas caracterizadas por una configuración geométrica compleja del terreno. En situaciones de este tipo el campo de velocidades del viento adquiere una distribución complicada y altamente dependiente de la geometría del terreno. La modelación se basa en obtener este campo de flujo resolviendo las ecuaciones de conservación eulerianas que lo determinan. Las concentraciones de polutantes se calculan por medio de sus ecuaciones de transporte convectivo y difusivo. El proceso de difusión está dominado por el estado turbulento del flujo. Se describen los principales métodos para la modelación de la turbulencia, la cual se incluye mediante el promedio temporal de las ecuaciones, empleando el concepto de viscosidad turbulenta para los esfuerzos de Reynolds, calculada por medio del modelo $k - \varepsilon$. Para la difusión turbulenta de calor y masa se analizan las teorías al respecto y se adopta la teoría K, que supone los flujos turbulentos horizontales y verticales proporcionales a los gradientes de las propiedades intensivas medias en las direcciones respectivas, introduciendo coeficientes de difusión turbulentos. Estas difusividades son obtenidas de la viscosidad turbulenta y a ellas se aplican además factores de anisotropía dependientes de la estabilidad atmosférica.

Para la resolución numérica de las ecuaciones se utiliza el método de diferencias finitas, según el esquema de volúmenes de control. Los coeficientes de discretización se calculan mediante el esquema de ley de potencia de Patankar, y se utilizan mallas de discretización desplazadas para las componentes de velocidad a fin de obtener una mejor representación numérica de las derivadas de velocidades y presión. La conexión entre las ecuaciones de momentum y de continuidad se establece mediante el método SIMPLE.

Se presentan aplicaciones del modelo al cálculo de concentración de polutante en algunos casos hipotéticos de calles rodeadas por edificios, y en una zona de topografía irregular expuesta a las emisiones de una fuente industrial. Los resultados muestran que este tipo de modelación ofrece posibilidades concretas de estimar el grado de contaminación atmosférica en situaciones donde la complejidad del terreno hace dudosa la aplicación de los métodos convencionales para estos fines.

Temas relacionados: Dispersión de contaminantes, difusión en la atmósfera, modelos de turbulencia, dinámica de fluidos computacional.

Summary

In this study, a numerical model is developed for the dispersion of pollutant substances released into the atmosphere at zones of small dimensions characterized by terrain with a complex geometrical configuration. In this kind of situations the wind velocity field acquires a complicated distribution, highly dependent on the terrain geometry. The model is based on the determination of this flow field by solving the governing Eulerian conservation equations. Pollutant concentrations are calculated with their convective-diffusive transport equations. The diffusion process is dominated by the turbulent state of the flow. The main methods for turbulence modeling are described. Turbulence is included by time averaging the equations, employing the turbulent viscosity concept for the Reynolds stresses, calculated with the $k-\varepsilon$ model. For the turbulent diffusion of heat and mass, theories about the subject are reviewed, and the K theory is adopted, which assumes that horizontal and vertical turbulent fluxes are proportional to the gradients of the intensive properties in the corresponding directions introducing turbulent diffusion coefficients. These diffusivities are obtained from the turbulent viscosity, and additionally anisotropy factors depending on the atmospheric stability are applied to them.

For the numerical solution of the equations the finite difference method is used, in the form of the control-volume scheme. The discretization coefficients are calculated by the Patankar power-law scheme, and staggered discretization grids are employed for the velocity components in order to obtain a better numerical representation of the velocity and pressure derivatives. The connection between the momentum and continuity equations is achieved by use of the SIMPLE method.

Applications of the model to the calculation of pollutant concentration are presented for some hypothetical cases of streets surrounded by buildings and in a zone of rough topography exposed to the emissions of an industrial source. The results show that this class of modeling offers real possibilities for the estimation of the atmospheric contamination level in cases where the terrain roughness makes the application of conventional methods for these purposes dubious.

Key Word Index: Pollutant dispersion, atmospheric diffusion, turbulence models, computational fluid dynamics.

Índice

1 Introducción	1
2 Ecuaciones Fundamentales	3
2.1 Conservación de Masa	3
2.2 Conservación de Momentum	4
2.2.1 Fuerzas de Cuerpo	7
2.3 Conservación de Energía	10
2.4 Conservación de Especies Químicas	14
3 Ecuaciones de Conservación Turbulentas	17
3.1 Simulación de Flujos Turbulentos	17
3.2 Ecuaciones de Reynolds Promediadas	20
3.3 Modelos de Clausura de Segundo Orden	26
3.4 Modelo $k - \varepsilon$	31
3.4.1 Ecuación de Transporte para k	32
3.4.2 Ecuación de Transporte para ε	35
4 Difusión Turbulenta de Escalares	37
4.1 Ecuaciones Promediadas de Temperatura y Concentración	37
4.2 Teoría Estadística	39
4.3 Teoría de Similaridad	46
4.4 Teoría de Transporte–Gradiente (Teoría K)	52
4.5 Modelos Gaussianos	60
4.5.1 Descripción General	60
4.5.2 Coeficientes de Dispersión	66
4.5.3 Difusión Sobre Terreno Irregular	69
4.5.4 Modelación de Fuentes Lineales	73
4.6 Conclusión	74
5 Formulación Numérica	78
5.1 Ecuaciones de la Modelación	78
5.2 Discretización de las Ecuaciones	79
5.3 Modificaciones a la Ecuación de Discretización	92
5.3.1 Linealización del Término Fuente	92

5.3.2 Corrección por Fuente de Masa Aparente	93
5.3.3 Coeficientes de Relajación	96
5.4 Interpolación de los Coeficientes de Difusión	96
5.5 Solución de las Ecuaciones Discretizadas	98
5.6 Determinación del Campo de Flujo	100
5.6.1 Mallas Desplazadas	102
5.6.2 Método SIMPLE	104
5.7 Condiciones de Contorno	108
5.7.1 Funciones de Pared	109
6 Programa Computacional	113
6.1 Descripción General	113
6.2 Programa SKER3D	115
6.3 Subrutina USER	118
6.4 Biblioteca de Subrutinas SKER3D.LIB	119
7 Aplicaciones	121
7.1 Caso 1: Cruce de Calles Rodeado de Edificios	121
7.2 Caso 2: Calles en un Centro Urbano	151
7.3 Caso 3: Chimenea en Terreno Irregular	164
8 Conclusiones	192
Nomenclatura	197
Referencias	200

1 Introducción

Es bien conocida la necesidad creciente de estimar el grado de contaminación del aire en zonas urbanas o rurales. Los métodos convencionalmente empleados para calcular las concentraciones de sustancias nocivas liberadas a la atmósfera utilizan ecuaciones de difusión basadas en suposiciones simples para el campo de flujo de aire imperante en la región de interés. Se suponen distribuciones de velocidades y características de la turbulencia constantes sobre grandes distancias. De este modo el transporte de polutantes se calcula en base a información meteorológica sobre la dirección y velocidad medias del viento en la zona en cuestión, y la dispersión turbulenta se incluye mediante relaciones empíricas disponibles, las cuales en muchos casos han sido deducidas en condiciones diferentes a las que se presentan en un problema en particular. Estos procedimientos han dado resultados aceptables cuando la topografía del terreno en la que se aplican es esencialmente plana, pero el error en el que incurren es considerablemente mayor y difícil de estimar en situaciones de geometría complicada.

Las extensiones de estos modelos para abarcar casos geoméricamente complejos sólo logran describir parcialmente la influencia del terreno, y resultan inaplicables en condiciones donde los obstáculos que el viento encuentra a su paso modifican completamente el patrón de flujo. Tal es el caso de la dispersión de contaminantes en calles rodeadas por edificios, donde la circulación de aire es determinada por la configuración geométrica particular del conjunto de edificaciones. De igual forma, en regiones montañosas, las concentraciones de contaminantes provenientes de fuentes industriales pueden depender en algunos sectores de las condiciones locales de viento impuestas por las características de la superficie, para los cuales la dirección y velocidad del viento dadas por informes meteorológicos no son representativas.

Por lo tanto, en estas circunstancias se hace necesario adoptar un tratamiento más fundamental, y determinar los campos locales de flujo resolviendo las ecuaciones fluido-dinámicas que los rigen. De este modo, la concentración de contaminantes puede obtenerse luego resolviendo sus ecuaciones de transporte por convección y difusión. Puesto que esta difusión, así como la difusión de momentum y energía, está dominada en estos casos por mecanismos turbulentos, es necesario incluir además la modelación adecuada de la turbulencia. Dada la complejidad analítica de estas ecuaciones su resolución debe efectuarse mediante técnicas numéricas. El objetivo de

este trabajo es, por lo tanto, modelar numéricamente la dispersión de contaminantes en situaciones tridimensionales de geometría complicada como las descritas, empleando los métodos de la dinámica de flujos turbulentos. Con esto se persigue explorar el potencial de aplicación de dichos métodos a problemas de evaluación de contaminación ambiental, para los que no se disponga de procedimientos de cálculo confiables.

Son escasos los trabajos reportados en la literatura que adoptan este enfoque, y hasta ahora se han utilizado modelos simplificados de turbulencia, los cuales determinan las difusividades turbulentas de las propiedades transportadas mediante relaciones algebraicas, las que consideran sólo la variación vertical de estos parámetros. Esta práctica es usual en meteorología, en donde debido a la gran diferencia entre las escalas horizontal y vertical a las que se describe el flujo, la dirección vertical es desacoplada del resto, y sólo en ella se considera la difusión. Para los problemas de microescala (en términos meteorológicos) que aquí interesan, la estructura de los campos de flujo y turbulencia es completamente tridimensional, y se requiere un modelo matemático de la turbulencia que junto con proporcionar una descripción más precisa del fenómeno, permita hacerlo a un costo computacional razonable.

2 Ecuaciones Fundamentales

Cualquier modelación del tipo abordado en este trabajo se basa en ciertos principios fundamentales de conservación. Entre éstos se tienen:

- conservación de masa
- conservación de momentum
- conservación de energía
- conservación de especies químicas

Estas leyes fundamentales de conservación pueden formularse matemáticamente aplicándolas a un elemento diferencial de volumen, de lo cual se obtiene una ecuación diferencial para cada una. Dichas ecuaciones son las que se exponen a continuación.

2.1 Conservación de Masa

En un campo de flujo donde u_i es la componente del vector de velocidad y ρ la densidad, la conservación de masa es expresada por la ecuación de continuidad,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (2.1)$$

Desde el punto de vista de la modelación computacional, la ecuación anterior debe reemplazarse, en estricto sentido, por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = S_m \quad (2.2)$$

donde S_m corresponde a la fuente de masa (por unidad de volumen) existente en el punto en cuestión. Estas fuentes de masa pueden representar sustancias liberadas dentro del campo, cuyo ingreso no se especifica a través de un flujo másico que las transporte (por ejemplo, fuentes distribuidas de contaminantes). S_m es por lo tanto, la masa que entra a un volumen de control (sobre los que se integra la ecuación de continuidad) no asociada a las velocidades en las fronteras del mismo.

2.2 Conservación de Momentum

La conservación de momentum está dada por la segunda ley de Newton, la cual aplicada a un elemento de masa en el campo de flujo conduce a

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + F_i \quad (2.3)$$

siendo σ_{ij} el tensor de esfuerzo, que incluye las fuerzas de superficie, y F_i la fuerza de cuerpo sobre el elemento de masa. El tensor σ_{ij} es usualmente separado como la suma de una parte isotrópica, $-p\delta_{ij}$, que tiene la misma forma que el tensor de esfuerzo en un fluido en reposo, y una parte restante no isotrópica, τ_{ij} (esfuerzo desviatorio), que representa la fricción interna, y por lo tanto, la difusión de momentum por acción molecular. Es decir,

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \quad (2.4)$$

p es aquí la presión mecánica, definida como

$$p = -\frac{1}{3} \sigma_{ii} \quad (2.5)$$

que es el primer invariante del tensor σ_{ij} y que físicamente se puede interpretar como el valor del esfuerzo normal promediado sobre todas las direcciones. En un fluido en reposo esta presión coincide con la presión de equilibrio termodinámico, dada por la ecuación de estado. Para un fluido en movimiento, podría haber, teóricamente, diferencia entre ambas, cuando la presión mecánica depende de aspectos moleculares diferentes de aquellos que determinan la energía interna (como por ejemplo, en un gas ideal con moléculas poliatómicas, donde el esfuerzo normal medio es proporcional a la energía traslacional de las moléculas, mientras que la energía interna involucra además la energía rotacional – y eventualmente vibracional – de las moléculas). Sin embargo, se ha observado que fenómenos de esta naturaleza sólo tienen efectos significativos en circunstancias muy particulares, tales como el amortiguamiento de ondas acústicas de alta frecuencia y la estructura de ondas de choque^[2]. Para flujos de baja velocidad, que pueden tratarse como incompresibles, el término p en la ecuación (2.4) puede considerarse equivalente a la presión termodinámica. Esta equivalencia se adopta en forma implícita en todo lo que sigue.

El esfuerzo desviatorio no contribuye al esfuerzo normal medio, y la traza τ_{ii} del tensor es nula, como se deduce de (2.4) y (2.5). El enfoque clásico para τ_{ij} ha sido postular que es una función lineal de las diferentes componentes del gradiente de velocidad. En forma general, esto se expresa como

$$\tau_{ij} = A_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \quad (2.6) \checkmark$$

donde el tensor A_{ijkl} es simétrico en los índices i y j ya que τ_{ij} lo es. Adicionalmente se supone que A_{ijkl} es isotrópico, un hecho sugerido por la estructura molecular estadísticamente isotrópica de los gases, y líquidos simples, a los que se aplica la ecuación (2.6). De este modo, A_{ijkl} se puede expandir como una suma de productos de deltas de Kronecker, multiplicados por coeficientes escalares μ, μ_1, μ_2 :

$$A_{ijkl} = \mu \delta_{ik} \delta_{jl} + \mu_1 \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu_2 \delta_{il} \delta_{jk} \quad (2.7) \checkmark$$

donde, en virtud de la simetría de A_{ijkl} en los índices i y j , se debe cumplir que $\mu_2 = \mu$.

Por su parte, el tensor $\partial u_i / \partial x_j$ es descompuesto en una parte simétrica, D_{ij} , y una antisimétrica, ξ_{ij} , definidas como

$$D_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (2.8)$$

$$\xi_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.9)$$

de manera que

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{1}{2} D_{ij} + \xi_{ij} \quad (2.10) \checkmark$$

D_{ij} es el denominado tensor de deformación, mientras que ξ_{ij} puede escribirse en términos del vector de vorticidad $\omega = \nabla \times \mathbf{u}$ como

$$\xi_{ij} = -\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \omega_k \quad (2.11)$$

(ε_{ijk} es el tensor de Levi-Civita). Por consiguiente, al substituir estas expresiones junto con (2.7) en la ecuación (2.6), se tiene

$$\tau_{ij} = [\mu(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + \mu_1 \delta_{ij} \delta_{kl}] \frac{1}{2} (D_{kl} - \varepsilon_{klm} \omega_m) \quad (2.12)$$

de donde resulta

$$\tau_{ij} = \mu D_{ij} + \mu_1 \Delta \delta_{ij} \quad (2.13)$$

con $\Delta = \frac{1}{2} D_{kk} = \nabla \cdot \mathbf{u}$ (llamada razón de expansión).

Al aplicar la condición de traza nula para τ_{ij} se obtiene $\tau_{ii} = 2\mu \Delta + 3\mu_1 \Delta = 0$, de modo que $\mu_1 = -2/3\mu$, y así

$$\tau_{ij} = \mu \left(D_{ij} - \frac{2}{3} \Delta \delta_{ij} \right) \quad (2.14)$$

La utilización de esta forma para el esfuerzo desviatorio en la ecuación (2.3) resulta en

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\mu D_{ij}) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} (\mu \Delta) + F_i \quad (2.15)$$

que es una forma general de la ecuación de Navier-Stokes.

Los flujos que aquí interesan pueden tratarse como incompresibles, en el sentido de que, si bien se admiten variaciones de densidad, ellas están asociadas a variaciones de temperatura, más que a variaciones de presión (en la sección 3.2 se analiza este punto con más detalle). Esto implica que el término que contiene a la razón de expansión se puede omitir. Por otra parte, puede darse a esta ecuación una forma más conveniente para su integración numérica sumándole la ecuación de continuidad (2.1) multiplicada por u_i . Con esto, la ecuación de conservación de momentum que se resuelve es

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + F_i \quad (2.16)$$

(si se emplea la forma (2.2) de la ecuación de continuidad en lugar de (2.1) el resultado

es el mismo, pues en dicho caso la ecuación de Newton para el elemento diferencial contendrá, sumado a la fuerza, el término $-u_i S_m$ originado por la variación de masa del elemento).

2.2.1 Fuerzas de Cuerpo

F_i incluye todas las fuerzas de cuerpo por unidad de volumen que actúen sobre el elemento diferencial. Para un flujo en la atmósfera de la tierra, el principal agente externo de fuerzas de cuerpo es la gravedad. Adicionalmente, debido a que un sistema de coordenadas fijo a la superficie de la tierra no es inercial, es necesario, en rigor, considerar las fuerzas aparentes producto de la rotación del planeta. Así, para un caso general se tendrá

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_{cor} + \mathbf{F}_{cen} \quad (2.17)$$

donde los términos del lado derecho corresponden a fuerzas gravitacionales, de Coriolis y centrífuga respectivamente.

• Fuerza de Gravedad:

Siguiendo la notación usual en este campo, se utilizará la coordenada z (o x_3 en la notación tensorial) para la dirección vertical, y las coordenadas x e y (es decir, x_1 y x_2) para las direcciones horizontales ortogonales. La fuerza de gravedad, por unidad de volumen, queda dada entonces por

$$(F_g)_x = 0 \quad ; \quad (F_g)_y = 0 \quad ; \quad (F_g)_z = -\rho g$$

o bien

$$(F_g)_i = -\rho g \delta_{i3} \quad (2.18)$$

donde g es la aceleración de gravedad. Fuerzas de flotación producidas por diferencias de densidad quedan incluidas a través de (2.18), debido a la acción diferencial de la gravedad sobre puntos con distinta densidad en la dirección vertical. No es necesario, por lo tanto, incorporar un término explícito para la fuerza de flotación.

• **Fuerzas Aparentes:**

La aceleración referida a un sistema de coordenadas que rota con velocidad angular Ω se relaciona con la aceleración en el espacio inercial, \mathbf{a} , mediante

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} + 2\Omega \times \mathbf{v} + \Omega \times (\Omega \times \mathbf{R}) \quad (2.19)$$

siendo $d\mathbf{v}/dt$ la aceleración vista desde el sistema en rotación. Los dos términos que le siguen son la aceleración de Coriolis, y la aceleración centrípeta respectivamente. En este caso se adopta como sistema inercial uno con origen en el centro de la tierra, de manera que para un sistema de coordenadas con origen en la superficie, y fijo a ésta, la magnitud de \mathbf{R} es el radio de la tierra y Ω su velocidad angular ($\Omega \approx 7,27 \times 10^{-5} [\text{s}^{-1}]$). Si para este sistema se escoge z como dirección vertical, y como la dirección tangente a la superficie apuntando hacia el norte (y por lo tanto, x es la dirección hacia el este para un sistema dextrógiro), las componentes de Ω serán:

$$\Omega_x = 0 \quad ; \quad \Omega_y = \Omega \cos\varphi \quad ; \quad \Omega_z = \Omega \sin\varphi \quad (2.20)$$

siendo φ la latitud del lugar, la cual se toma como negativa para puntos situados en el hemisferio sur.

Como se desprende de la ecuación (2.19), la fuerza de Coriolis, por unidad de volumen, es

$$\mathbf{F}_{cor} = -2\rho \Omega \times \mathbf{v} \quad (2.21a)$$

o, en notación tensorial

$$(F_{cor})_i = -2\rho \varepsilon_{ijk} \Omega_j u_k \quad (2.21b)$$

Denotando ahora por (u,v,w) las componentes de velocidad en el sistema xyz mencionado, se obtiene a su vez para las componentes de \mathbf{F}_{cor}

$$(F_{cor})_x = 2\rho \Omega (v \sin\varphi - w \cos\varphi) \quad (2.22a)$$

$$(F_{cor})_y = -2\rho \Omega u \sin\varphi \quad (2.22b)$$

$$(F_{cor})_z = 2\rho \Omega u \cos\varphi \quad (2.22c)$$

Del mismo modo, se tiene para la fuerza centrífuga por unidad de volumen

$$\mathbf{F}_{cen} = -\rho \boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{R}) \quad (2.23)$$

y sus componentes serán

$$(F_{cen})_x = 0 \quad (2.24a)$$

$$(F_{cen})_y = -\rho R \Omega^2 \sin\varphi \cos\varphi \quad (2.24b)$$

$$(F_{cen})_z = \rho R \Omega^2 \cos^2\varphi \quad (2.24c)$$

La importancia relativa de las fuerzas aparentes comparadas con los demás términos en la ecuación de momentum depende de la escala espacial del flujo resuelto. La razón entre las magnitudes de los términos convectivos y de la fuerza de Coriolis es del orden de

$$\frac{U}{L\Omega}$$

con U una velocidad representativa del campo de flujo, y L la escala espacial sobre la cual \mathbf{u} varía apreciablemente. Esta cantidad es conocida como el número de Rosby. Cuando $U/L\Omega \gg 1$, el efecto de la fuerza de Coriolis sobre el patrón de flujo es despreciable, aumentado su influencia a medida que el número de Rosby toma valores del orden de 1 o menores. Para condiciones características en la atmósfera se puede considerar $U \sim 10$ [m/s], de manera que para modelaciones de mesoescala, donde $L \sim 100$ [km], o de macroescala meteorológica, con $L \sim 1000$ [km], la presencia de la fuerza de Coriolis no puede ignorarse. En modelos de mesoescala todavía es posible omitir la influencia de esta fuerza en la ecuación de movimiento para la dirección vertical^[25]. En modelos de macroescala en cambio, la fuerza de Coriolis puede llegar a ser dominante con respecto a la convección de momentum, obteniéndose en esas condiciones el denominado flujo geostrófico, en el cual el gradiente de presión en un plano horizontal es normal a las líneas de flujo. En contraste, para modelaciones de microescala, donde las distancias involucradas son de sólo algunos kilómetros, el efecto de Coriolis es de orden secundario.

Con respecto a la fuerza centrífuga, su influencia puede suponerse también despreciable un situaciones de microescala donde cabe esperar que las perturbaciones que experimente el flujo se deban fundamentalmente a la acción de los contornos sólidos y a fuerzas gravitacionales (el producto $R\Omega^2$ en las componentes de la fuerza centrífuga es aproximadamente 0,0035g). Los análisis de meso- y macroescala

usualmente incluyen la componente vertical de la fuerza centrífuga por medio de una aceleración de gravedad corregida por la aceleración centrípeta.

2.3 Conservación de Energía

La conservación de la energía implica un balance entre la acumulación y convección neta de energía interna y cinética, y el calor transferido al elemento bajo análisis más el trabajo realizado sobre él por las fuerzas a las que está sometido. Tal balance de energía toma la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho e + \frac{1}{2}\rho u^2) + \frac{\partial}{\partial x_i}[u_i(\rho e + \frac{1}{2}\rho u^2)] = & -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} - \rho u_i g \delta_{i3} - \frac{\partial}{\partial x_i}(p u_i) \\ & + \frac{\partial}{\partial x_i}(\tau_{ij} u_j) + S_h \end{aligned} \quad (2.25)$$

siendo e la energía interna específica, $u^2 = u_i u_i$ y q_i el vector de flujo neto de calor por unidad de área hacia el elemento. Los tres términos que siguen a la divergencia de q_i corresponden al trabajo desarrollado por la fuerza de gravedad, la presión y los esfuerzos viscosos respectivamente. S_h representa una fuente de energía externa, que puede incluir cantidades tales como el calor latente de condensación, calor antropogénico, etc. Al restar la ecuación de continuidad de (2.25) se obtiene

$$\rho \frac{d}{dt}(e + \frac{1}{2} u^2) = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} - \rho u_i g \delta_{i3} - \frac{\partial}{\partial x_i}(p u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\tau_{ij} u_j) + S_h \quad (2.26)$$

donde se ha introducido el operador $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i}$ (derivada substancial).

Las ecuaciones de arriba contienen la energía total del flujo, es decir, tanto la energía térmica como la mecánica. Es posible derivar una ecuación sólo para la energía mecánica a partir de la ecuación de Navier–Stokes, mediante el producto escalar de dicha ecuación con el vector de velocidad u_i , resultando

$$\rho u_i \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_i u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = u_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho u_i g \delta_{i3}$$

de manera que la ecuación para la energía mecánica es

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} u^2 \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i \tau_{ij}) - \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} (p u_i) + p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \rho u_i g \delta_{i3} \quad (2.27)$$

Los términos fuentes en esta ecuación de transporte para la energía cinética pueden interpretarse como sigue:

$\frac{\partial}{\partial x_j} (u_i \tau_{ij})$: rapidez a la cual los esfuerzos viscosos efectúan trabajo sobre un elemento de volumen.

$\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$: rapidez de conversión irreversible de energía mecánica en energía térmica. Este término está asociado con pequeñas diferencias de velocidad en lados opuestos de un elemento, y representa la parte de $\partial/\partial x_j (u_i \tau_{ij})$ correspondiente al trabajo realizado al deformar el elemento sin cambio en su velocidad.

$\frac{\partial}{\partial x_i} (p u_i)$: rapidez a la cual la presión efectúa trabajo sobre el elemento.

$p \frac{\partial u_i}{\partial x_i}$: rapidez de conversión reversible de energía mecánica en energía térmica, debido a la compresión del elemento. Esta energía se puede recuperar sin pérdida como energía mecánica cuando el elemento se expanda, en contraste con $\tau_{ij} \partial u_i / \partial x_j$, el cual es siempre positivo, dando origen a una transferencia unidireccional de energía desde los agentes mecánicos, que causan el movimiento, a la energía interna del fluido, en concordancia con el carácter friccional del esfuerzo τ_{ij} .

Restando la ecuación (2.27) de (2.25) se obtiene para la energía interna

$$\rho \frac{de}{dt} = - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} - p \Delta + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + S_h \quad (2.28)$$

en donde Δ es al igual que antes, la razón de expansión $\partial u_i / \partial x_i$.

Para esta aplicación es preferible formular la ecuación de energía en términos de la temperatura, en lugar de la energía interna. La variación de ésta en función de la entropía, s , y el volumen específico v está dada por

$$de = ds - p dv \quad (2.29)$$

cuando la ecuación termodinámica fundamental es del tipo $e = e(s,v)$. No se considerarán cambios en la composición química del fluido, razón por la cual no se han incluido en (2.29) los potenciales químicos y las variaciones en el número de moles de los componentes. Al utilizar las identidades

$$C_v = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_v \quad \text{y} \quad \left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v,$$

con C_v el calor específico a volumen constante, la ecuación (2.29) se puede reescribir como

$$de = C_v dT + \left[T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v - p \right] dv \quad (2.30)$$

Para el aire en condiciones atmosféricas se puede emplear con buena aproximación la ecuación de estado del gas ideal, $pv = RT$, de modo que la expresión que multiplica a dv en (2.30) se anula, y la ecuación de energía térmica toma la forma

$$\rho C_v \frac{dT}{dt} = - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} - p\Delta + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + S_h \quad (2.31)$$

Una forma alternativa, en términos del calor específico a presión constante, C_p , puede obtenerse escribiendo (2.31) como

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} - \rho R \frac{dT}{dt} = - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} - p\Delta + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + S_h$$

y aplicando la ecuación de estado de gas ideal se tiene

$$R \frac{dT}{dt} = \frac{dp}{dt} v + p \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{dp}{dt} + p\Delta \right),$$

resultando entonces

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{dp}{dt} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + S_h \quad (2.32)$$

El vector q_i puede contener tanto la difusión de calor como el flujo neto de

radiación. En este caso no se incluirá el intercambio radiativo, ya que para las situaciones analizadas el término $\partial q_i / \partial x_i$ está dominado por la difusión turbulenta. Por lo tanto

$$\frac{\partial q_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \quad (2.33)$$

donde λ es la conductividad térmica del medio.

Combinando (2.33) y (2.32) y reemplazando el esfuerzo τ_{ij} por la expresión (2.14) se obtiene la ecuación de energía térmica en función del campo de temperatura y el campo de velocidades:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho T) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i T) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \alpha \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{C_p} \frac{dp}{dt} \\ &+ \frac{\mu}{C_p} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\mu}{C_p} \Delta^2 + \frac{S_h}{C_p} \end{aligned} \quad (2.34)$$

donde se ha vuelto a sumar la ecuación de continuidad para obtener la forma general de una ecuación de transporte, análoga a (2.16), esta vez en la variable T , y el cociente entre la conductividad térmica y C_p se ha puesto en función de la difusividad térmica molecular α .

En meteorología es usual resolver la ecuación de energía para la temperatura potencial θ , que corresponde a la temperatura que el aire alcanzaría al ser llevado adiabáticamente a un nivel de presión de 1000 [mbar]:

$$\theta = T_v (1000/p)^{R/C_p} \quad (2.35)$$

(con p en [mbar]) y donde se ha introducido además una temperatura modificada por la humedad, T_v , conocida como temperatura virtual, de modo que la ecuación de estado pueda basarse en la propiedades del aire seco:

$$T_v = (1 + 0,61q)T \quad (2.36)$$

siendo q la humedad específica. Ya que en este caso no se calcula la humedad y no se precisa referir los resultados a la superficie isobárica de 1000 [mbar], no es necesario incluir estas variables adicionales.

2.4 Conservación de Especies Químicas

El objetivo de plantear una ley de conservación para especies químicas es proveer una ecuación que permita calcular la concentración de sustancias polutantes liberadas a la atmósfera. Un balance de masa para cualquiera de estas sustancias en un elemento diferencial de volumen da como resultado la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i c) = -\frac{\partial J_i}{\partial x_i} + S_c \quad (2.37)$$

donde c es la concentración del polutante en el aire, en base másica (razón de masa de sustancia a la masa de aire en el mismo volumen). J_i representa el flujo difusivo de sustancia y S_c es la fuente neta. Si el mecanismo de difusión sigue la ley de Fick, entonces

$$J_i = -\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \quad (2.38)$$

siendo D el coeficiente de difusión de masa. Esta relación es válida si la difusión es isotrópica. Cuando el proceso es anisotrópico, el coeficiente de difusión no es un parámetro escalar, sino un tensor de orden 2, y en tal caso se tiene

$$J_i = -\rho D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \quad (2.39)$$

De acuerdo al teorema de reciprocidad de Onsager para procesos termodinámicos irreversibles D_{ij} debe ser simétrico, de manera que existirán en total seis componentes independientes.

El término fuente S_c contiene todos los mecanismos de producción y remoción de la especie en cuestión, y puede incluir procesos tales como transformaciones químicas, deposición seca y deposición húmeda. Como resultado de reacciones químicas las concentraciones de polutantes primarios pueden disminuir, mientras que las concentraciones de polutantes secundarios tales como sulfatos y ozono pueden aumentar. Los mecanismos de reacción involucrados son generalmente muy complejos, y pueden estar además conectados con variables como la intensidad de radiación, la humedad y la cantidad de catalizadores presentes. Sólo para el problema del ozono se han mencionado más de 50 ecuaciones de conservación (Panofsky [23]), producto de su elevada reactividad. La modelación de estos fenómenos no está contemplada dentro

de los objetivos de este trabajo, ya que se trata sólo con especies cuyos tiempos característicos de decaimiento por reacción química son mucho mayores que los tiempos de transporte dentro del dominio de solución para la escala de modelación adoptada.

La deposición seca se refiere a la remoción que tiene lugar en la superficie del suelo por precipitación gravitacional, impacto y absorción química. Partículas pequeñas con un diámetro d inferior a 20 [μm] precipitan a una velocidad v_g dada por la ley de Stokes:

$$v_g = \frac{d^2 g \rho_p}{18 \mu} \quad (2.40)$$

donde ρ_p es la densidad de la partícula. Velocidades características de decantación han sido obtenidas experimentalmente. Cuando $v_g > 1$ [m/s] las partículas caen a través del campo de flujo, y la difusión turbulenta pierde importancia^[11], reduciéndose el problema al cálculo de trayectorias balísticas para las partículas. Esto ocurre para diámetros mayores que 200 [μm] aproximadamente.

La deposición en el suelo, J_d , como flujo de masa precipitada por unidad de área es calculada como

$$J_d = v_g c_0 \quad (2.41)$$

con c_0 la concentración a nivel del suelo (en base volumétrica). Se ha observado que partículas del rango menor de tamaños y gases se depositan también sobre las superficies debido a absorción química e impacto. Para estas sustancias se define una velocidad de deposición v_d , que reemplaza a v_g en la ecuación (2.41). v_d se determina por observaciones de la deposición J_d y la concentración a nivel del suelo, de modo que

$$v_d = \frac{J_d}{c_0} \quad (2.42)$$

Resultados de mediciones dan para v_d valores entre 10^{-4} y 0,1 [m/s]. Los valores más altos se asocian con superficies húmedas y rugosas, condiciones atmosféricas inestables, y sustancias químicamente activas. Un valor promedio comúnmente usado como velocidad de deposición seca es del orden de 0,01 [m/s].

En cuanto a la deposición húmeda, ésta se relaciona con la captura de partículas o moléculas gaseosas por gotas de lluvia, nubes o partículas de hielo. El proceso es

sumamente complejo e involucra fenómenos de difusión por movimiento browniano, captura gravitacional e inercial (por impacto), termoforesis y difusioforesis, y efectos eléctricos. Funciones de captura de partículas por gotas de acuerdo a estos mecanismos son dadas por Pruppacher [27], observándose que la importancia relativa de ellos depende apreciablemente del tamaño medio de la partículas. Holnicki *et al.* [13] incluyen la deposición húmeda en el término fuente de una ecuación de concentración análoga a (2.37) mediante la relación $-\gamma\rho c$, donde γ , el factor de deposición húmeda, es aproximado como

$$\gamma = 2 \times 10^{-5} \alpha^{0.6} \quad (2.43)$$

siendo α la intensidad de las precipitaciones en [mm/hr].

3 Ecuaciones de Conservación Turbulentas

3.1 Simulación de Flujos Turbulentos

Las ecuaciones de transporte de momentum, energía y especies químicas, junto con la ecuación de continuidad, presentadas en el capítulo anterior forman un sistema coherente de ecuaciones diferenciales parciales, que puede ser resuelto numéricamente. Dichas ecuaciones son válidas tanto si el flujo es laminar como si es turbulento. En la atmósfera prevalecen casi siempre condiciones de movimiento turbulento, en particular en la capa límite atmosférica, donde típicamente^[17] se dan números de Reynolds del orden de 10^6 .

La premisa fundamental de la teoría de la turbulencia a lo largo de toda su historia formal ha sido que este fenómeno puede ser entendido dentro del dominio de la suposición del medio continuo de la dinámica de fluidos, lo que implica aceptar que las ecuaciones de Navier–Stokes constituyen una descripción matemática completa de los flujos turbulentos. Se han mencionado ciertos hechos experimentales que podrían arrojar dudas sobre la validez de esta suposición. Sin embargo, se trata de situaciones muy particulares (como, por ejemplo, el efecto de polímeros de cadena larga en solución acuosa) que no han modificado la adhesión generalizada de los investigadores a esta hipótesis básica.

Sería deseable, por consiguiente, poder resolver numéricamente las ecuaciones de Navier–Stokes en su forma exacta, sin la introducción adicional de modelo de turbulencia alguno, de manera que la única causa de error sea la discretización numérica. Por desgracia, una dificultad inmediata que surge al intentar esto es el hecho de que los flujos turbulentos se caracterizan por configuraciones de muchos tamaños distintos, con escalas de longitud que difieren en varios órdenes de magnitud, desde pequeños vórtices del orden de 1 [mm] hasta vórtices con dimensiones comparables a las del dominio de solución. Una escala de longitud característica de los vórtices que finalmente disipan la turbulencia puede estimarse por argumentos dimensionales en base a la razón ε de disipación de energía cinética turbulenta y a la viscosidad del fluido (por ser la propiedad que cuantifica su capacidad disipativa). La longitud obtenida^[1] es $(\nu^3/\varepsilon)^{1/4}$, la cual, en la atmósfera, típicamente resulta del orden mencionado de 1 [mm]. Por lo anterior, el problema requiere la utilización de mallas de discretización sumamente finas, y el empleo de supercomputadores. Se han obtenido soluciones de esta clase (denominada simulación completa), pero el número

de flujos que pueden ser simulados por este método ha sido limitado, y ha estado restringido a números de Reynolds bajos. La resolución directa de las ecuaciones de Navier–Stokes para un flujo a escala atmosférica demandaría una malla de discretización con una cantidad de nodos muy superior a la admisible en los más potentes computadores existentes en la actualidad (y posiblemente en los de las próximas generaciones). La incorporación de un modelo de turbulencia se hace inevitable.

El paso siguiente de aproximación después de la simulación completa lo constituye una técnica denominada simulación de grandes remolinos, la cual tuvo su origen en modelos para predicciones meteorológicas globales. La aproximación consiste en promediar las ecuaciones de Navier–Stokes sobre una región espacial lo suficientemente pequeña para remover los vórtices de menor escala, con lo cual se obtienen ecuaciones para la estructura de gran escala del flujo. Las componentes de gran escala son calculadas entonces explícitamente, mientras que las de pequeña escala deben ser modeladas. La separación entre estas dos escalas de descripción del campo de flujo se obtiene por una operación de filtrado, definiendo el campo de gran escala como^[8]

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \Delta) \mathbf{u}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (3.1)$$

donde \mathbf{u} es la velocidad, G la función de filtrado y Δ la amplitud espacial del filtro que separa los remolinos grandes de los pequeños (varios tipos de funciones han sido usadas como filtros, tales como funciones de tipo escalón y gaussianas). Esta definición permite dividir el campo de velocidad (y el de presión) en una componente \bar{u}_i para la escala resuelta, y una componente u'_i no discernible a la escala de resolución impuesta por la amplitud del filtro (llamada componente de sub-malla):

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (3.2)$$

Al aplicar el operador de filtrado definido por (3.1) a las ecuaciones de Navier–Stokes (2.16), se recupera la forma original de éstas, esta vez en función de las componentes de gran escala, excepto por el término no lineal (el término convectivo), para el cual se obtiene $\overline{\partial/\partial x_j(\rho u_i u_j)}$ en lugar de $\partial/\partial x_j(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j)$. Conforme a la ecuación (3.2), $\overline{u_i u_j}$ toma la forma

$$\overline{u_i u_j} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} + \overline{\bar{u}_i u'_j} + \overline{u'_i \bar{u}_j} + \overline{u'_i u'_j} \quad (3.3)$$

en la cual, el primer término del lado derecho depende únicamente de las componentes de gran escala, y puede ser calculado directamente al resolver numéricamente la ecuación de Navier–Stokes filtrada. Para los otros tres se requiere un modelo que permita expresarlos en función de las componentes de gran escala.

La ventaja de la simulación de grandes remolinos sobre las ecuaciones promediadas de Reynolds, que se describen en la sección que sigue, es permitir el cálculo directo de parte de los flujos de momentum, energía y especies, de modo que la porción de ellos que queda incluida en las componentes de sub-malla resulta menor que en el promedio de Reynolds, y el resultado total es menos sensible a las inexactitudes en el modelo de turbulencia. Para que esto ocurra, la resolución de la malla de discretización debe ser tal que la energía cinética de los movimientos de sub-malla represente sólo una pequeña fracción de la energía total.

Las fluctuaciones turbulentas presentan un espectro amplio de frecuencias, donde las frecuencias (y números de onda) más bajas corresponden a los remolinos más grandes, y lo contrario se tiene para los vórtices pequeños. La energía se encuentra contenida principalmente en los números de onda bajos, y es transferida hacia los números de onda elevados, donde es finalmente disipada por la viscosidad. A números de Reynolds suficientemente altos existe un rango de números de onda donde la turbulencia está estadísticamente en equilibrio, y es determinada únicamente por la razón de disipación de la energía cinética (ε) y la viscosidad (hipótesis sugerida por primera vez por Kolmogorov). Este rango de equilibrio se denomina "universal" debido a que la turbulencia en él es independiente de las condiciones externas^[12]. Además, la disipación se concentra fuertemente hacia los números de onda elevados, por lo que si el número de Reynolds es lo suficientemente grande se produce dentro del rango de equilibrio, un subrango donde la disipación es despreciable comparada con la energía transferida por efectos inerciales. Así, los vórtices con números de onda más bajos que los de este subrango inercial serán considerados remolinos "grandes", y los vórtices menores que los contenidos en el subrango inercial serán los "pequeños". La amplitud Δ del filtro debe escogerse, por lo tanto, de manera que el número de onda correspondiente a esta distancia quede dentro del subrango. Por otra parte, el tamaño de la discretización en la malla computacional debe ser menor que Δ , y a la vez, el dominio de solución necesita dimensiones suficientes para contener los remolinos más grandes. El número de nodos requeridos resulta entonces en general muy grande, y el método sólo puede aplicarse si se dispone de un supercomputador. Aún así, la cantidad de nodos necesaria es en algunos casos mucho mayor que la que permite la capacidad

actual de estos equipos, y se deben usar anchos de filtro que caen fuera del subrango inercial, incrementándose la dependencia de los resultados de la calidad del modelo de sub-malla.

Por lo anterior, la simulación de grandes remolinos ha sido empleada casi enteramente en la investigación básica de la turbulencia, y la aplicación a problemas de ingeniería ha sido indirecta, orientándose a generar información que pueda ser usada en modelaciones basadas en promedios temporales de Reynolds. Para problemas como los resueltos en este trabajo, las ecuaciones promediadas de Reynolds siguen siendo, por lo tanto, una vía práctica de solución.

3.2 Ecuaciones de Reynolds Promediadas

Esta aproximación resuelve problemas de flujos turbulentos tomando promedios temporales de las variables principales del flujo y resolviendo las ecuaciones de movimiento para estos promedios. La idea fue introducida por O. Reynolds en 1895 y dio origen a lo que se ha denominado la teoría estadística de la turbulencia, la que ha permitido el desarrollo de modelos de turbulencia para aplicaciones prácticas. La suposición fundamental es que las variables que caracterizan el campo de flujo, tales como velocidad, presión, densidad, etc., se pueden separar en una componente media y una perturbación aleatoria. Así, para la velocidad se tiene

$$u_i = \bar{u}_i + u_i' \quad (3.4)$$

donde \bar{u}_i es ahora el valor de la velocidad promediado en el tiempo, y u_i' la fluctuación aleatoria superpuesta a esta media temporal. En todo lo que sigue la barra superior ($\bar{\quad}$) denota el promedio temporal, tal como

$$\bar{u}_i = \frac{1}{T} \int_0^T u_i(t + \tau) d\tau \quad (3.5)$$

El intervalo de tiempo sobre el cual se toma el promedio debe ser suficientemente grande comparado con la escala de tiempo de las fluctuaciones turbulentas, y por otra parte, debe ser pequeño comparado con el periodo de cualquier variación lenta del campo de flujo cuya causa se considere determinística. De este modo, la aleatoriedad de u_i' conduce a la siguiente suposición:

$$\overline{u'_i} = 0 \quad \text{y} \quad \overline{\bar{u}_i} = \bar{u}_i$$

de manera que $\overline{u_i u_j} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} + \overline{\bar{u}_i u'_j} + \overline{u'_i \bar{u}_j} + \overline{u'_i u'_j}$ se reduce a

$$\overline{u_i u_j} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} + \overline{u'_i u'_j} \quad (3.6)$$

Tomando entonces $u_i = \bar{u}_i + u'_i$, $\rho = \bar{\rho} + \rho'$ y $p = \bar{p} + p'$ en las ecuaciones de continuidad (2.1) y de Navier–Stokes (2.16), y promediándolas en el tiempo se obtiene para cada una:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho' u'_i}) = 0 \quad (3.7)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_j \bar{u}_i) = & -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \bar{F}_i \\ & - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u'_i u'_j}) - \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho' u'_j}) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_j \overline{\rho' u'_i} + \overline{\rho' u'_j} \bar{u}_i + \overline{\rho' u'_i u'_j}) \end{aligned} \quad (3.8)$$

de modo que además de obtenerse los términos originales, en función de las componentes medias, aparecen términos adicionales que corresponden a correlaciones entre las fluctuaciones de velocidad y entre éstas y las fluctuaciones de densidad.

En la mayoría de los casos los efectos de compresibilidad pueden ser despreciados, y se puede suponer que el fluido se comporta como si fuese mecánicamente incompresible. Las condiciones que deben satisfacerse para que esto sea válido pueden deducirse por el siguiente análisis de órdenes de magnitud.

Se llamará U a la magnitud de las variaciones en espacio y tiempo de la velocidad u_i , y L a la escala espacial que caracteriza las distribuciones de u_i y otros parámetros del flujo (esto es, las variaciones de u_i son significativas sólo para distancias mayores que L). Entonces, el orden de magnitud de las derivadas espaciales de las componentes de u_i será U/L , y el campo de velocidades se aproximará a uno incompresible si

$$\left| \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right| \ll \frac{U}{L}$$

o bien, ya que $-\rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i}$, si

$$\left| \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} \right| \ll \frac{U}{L} \quad (3.9)$$

En este análisis es conveniente escoger a la densidad y a la entropía específica como las dos propiedades independientes de estado, por lo que la derivada substancial de la presión puede escribirse como

$$\frac{dp}{dt} = c^2 \frac{d\rho}{dt} + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_\rho \frac{ds}{dt} \quad (3.10)$$

donde $c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s$ es la velocidad de propagación de ondas acústicas en el fluido.

$|dp/dt|$ puede estimarse con poca pérdida de generalidad utilizando relaciones para flujo isoentrópico, ya que los efectos de la viscosidad y la conductividad térmica (que las ecuaciones de flujo isoentrópico omiten) son normalmente modificar la distribución de presión más que un control de la magnitud de las variaciones de la misma^[2]. La condición (3.9) se transforma entonces en

$$\left| \frac{1}{\rho c^2} \frac{dp}{dt} \right| \ll \frac{U}{L} \quad (3.11)$$

Para un flujo isoentrópico la ecuación de movimiento se simplifica a

$$\rho \frac{du_i}{dt} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + F_i \quad (3.12)$$

Como el interés aquí es en la fluctuaciones turbulentas de densidad, no se tomará en cuenta el efecto de las fuerzas de cuerpo, pues éstas en general estarán asociadas a gradientes suaves de la componente media de la densidad más que a las fluctuaciones mismas (por ejemplo, la conexión entre la densidad y el gradiente de presión estática producido por la fuerza de gravedad). Luego, con ayuda de la ecuación (3.12) se puede expresar (3.11) como

$$\left| \frac{1}{\rho c^2} \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{1}{2c^2} \frac{d}{dt} (u_i u_i) \right| \ll \frac{U}{L} \quad (3.13)$$

El primer término se relaciona únicamente con flujos transientes. Puede

considerarse como un caso representativo el de un campo de flujo oscilatorio, con una frecuencia n . En una región de dimensiones L la velocidad cambiará de signo en un tiempo del orden de n^{-1} , de manera que la rapidez de cambio de momentum será del orden de $\rho L^3 U n$, y por lo tanto, la variación de presión en los contornos de la región será $\sim \rho L U n$. Esto implica que $\partial p / \partial t \sim \rho L U n^2$, con lo cual la primera parte de la condición (3.13) es

$$\frac{L^2 n^2}{c^2} \ll 1 \quad (3.14)$$

Esta condición es satisfecha por la clase de flujos que se abordan en este trabajo (y en la mayoría de los casos), y sólo no se cumple en situaciones estudiadas por la acústica (se observa que $nL/c = 1$ cuando L coincide con la longitud de onda del sonido de frecuencia n).

En cuanto al segundo término de (3.13), su orden de magnitud será el mismo que el de $u_j \partial / \partial x_j (u_i u_i)$ (es decir, U^3/L) o el de $\partial / \partial t (u_i u_i)$, cualquiera sea mayor. Para este último resulta también un orden de magnitud máximo de U^3/L si la frecuencia de oscilación no excede el valor U/L , y en caso de que sea mayor es aplicable la condición (3.14) dada anteriormente. Por consiguiente, la segunda condición derivada de (3.13) es

$$\frac{U^2}{c^2} \ll 1 \quad (3.15)$$

la cual por supuesto se cumple para flujos con bajos números de Mach.

En consecuencia, se supondrá que el aire atmosférico no puede presentar ningún efecto de compresibilidad, en relación con la interacción de la presión y el campo de velocidad, y sólo se considerarán variaciones de densidad causadas por la temperatura. Todas las correlaciones que contengan fluctuaciones de densidad pueden desprejarse, excepto cuando aparezcan en la fuerza de gravedad, las que serán retenidas para incluir la producción (o destrucción) de turbulencia por efectos de flotación.

Con estas consideraciones, las ecuaciones (3.7) y (3.8) toman las formas más simples

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{p} \bar{u}_i) = 0 \quad (3.16)$$

y

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_j \bar{u}_i) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \bar{F}_i - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \overline{u'_i u'_j}) \quad (3.17)$$

Se observa que la ecuación de continuidad recobra la forma (2.1) y depende únicamente de las componentes medias, pero en la ecuación de momentum (conocida como ecuación de Reynolds) persiste la correlación entre las fluctuaciones de velocidad, y la ecuación no puede ser resuelta mientras no se exprese este término en función de las componentes medias. Es posible deducir directamente una ecuación para $\overline{u'_i u'_j}$ (los esfuerzos de Reynolds) a partir de la ecuación de Navier–Stokes, como se indica en la sección siguiente. La ecuación resultante, sin embargo, contiene la triple correlación $\overline{u'_i u'_j u'_k}$. Si un procedimiento análogo se sigue con el fin de encontrar una ecuación para este nuevo término, aparecerá la correlación de cuarto orden, y así sucesivamente, derivando en el célebre problema de clausura de las ecuaciones de Reynolds.

Este problema es de una dificultad tal que, en vista a las exigencias prácticas, ha sido necesario introducir hipótesis adicionales: la modelación fenomenológica. En ésta, el objetivo es el desarrollo de un conjunto de relaciones (ecuaciones diferenciales o algebraicas) que adecuadamente describan una gama amplia de flujos, aunque sin pretender un tratamiento exacto de la física de la turbulencia, y donde la conformidad con fenómenos observados es un factor importante para fijar la forma del modelo. No cabe esperar, por lo tanto, que esta aproximación conduzca al desarrollo de un modelo universalmente válido, razón por la cual algunos autores han criticado esta línea de investigación, y a la teoría estadística de la turbulencia en general (por ejemplo, Chapman y Tobak [4]), considerándola como una teoría "*sin estructura y con poco poder de conceptualización*", en comparación con ideas más recientes surgidas en el campo de los sistemas dinámicos caóticos. En esta teoría determinística de la turbulencia, la estructura del campo de flujo es descrita en términos topológicos, y los cambios de tal estructura son analizados aplicando la teoría de bifurcación, la cual estudia las soluciones de equilibrio posibles de las ecuaciones no lineales, y cómo aquellas cambian al variar los parámetros del problema (número de Reynolds, número de Mach, ángulo de ataque, etc.). Dichas soluciones pueden ser invariantes en el tiempo, periódicas, cuasi-periódicas o caóticas, dependiendo de las condiciones. A su vez, el estado posible para la configuración instantánea del campo de velocidad es representado como un punto en el espacio formado por todos los estados posibles. La evolución del campo de flujo hacia una solución de equilibrio es entonces una curva (llamada órbita) en tal espacio. Así, soluciones invariantes en el tiempo son puntos fijos en este espacio; soluciones periódicas corresponden a curvas cerradas. Las soluciones caóticas dan origen a objetos geométricos, denominados atractores extraños,

con características peculiares: i) a diferencia de las soluciones periódicas o cuasi-periódicas, el atractor tiene una función de autocorrelación que decae rápidamente en el tiempo; ii) es también sensiblemente dependiente de las condiciones iniciales (soluciones que partan de puntos infinitesimalmente próximos se separarán eventualmente de modo que cualquier perturbación es amplificada); iii) tiene una compleja estructura geométrica de múltiples capas anidadas, las cuales ocupan no obstante un volumen cero en el espacio de estados. Esta última propiedad ha conducido a introducir además el concepto de dimensionalidad fractal en la teoría de la turbulencia. (Definiciones más precisas de estos conceptos pueden encontrarse, por ejemplo, en la ref. [7]).

Estas ideas han recibido considerable atención en los últimos años, y se ha acumulado una cantidad extensa de literatura al respecto. Sin embargo, como puede inferirse del párrafo anterior, los estudios en esta área se han centrado en la estructura topológica de las soluciones de la ecuación de Navier–Stokes, pretendiendo dar una descripción cualitativa del comportamiento global de todas las soluciones, más que detenerse en el comportamiento local y preciso de casos particulares específicos. El alcance actual de estos métodos, por lo tanto, está lejos del nivel de complejidad de los problemas que deben resolverse en ingeniería, para los cuales los modelos fenomenológicos continuarán siendo por algún tiempo la única posibilidad práctica de solución (a pesar de los comentarios peyorativos de algunos investigadores como los mencionados). Además, aún cuando avances en la teoría determinística permitan llegar a conocer en principio la dinámica de las ecuaciones de Navier–Stokes, tal conocimiento podría no ser asequible en la práctica, debido a la precisión finita con que se conocen las variables. Lumley [21] ha mostrado el caso de un atractor extraño para el cual la dependencia sensible de las condiciones iniciales se traduce en que, sin importar cuán alta sea la precisión con que se conocen los valores iniciales (suponiendo que sea un número finito de dígitos), se alcanza un punto en la órbita más allá del cual los valores sucesivos no pueden ser predichos. O sea, después de un tiempo el carácter de la solución estará determinado completamente por la parte de la condición inicial que no se conoce. Se cree que otros atractores comparten esta propiedad, lo que significa que la estructura detallada de atractores complejos (incluyendo posiblemente aquel para la turbulencia desarrollada) es probablemente incomputable, y el carácter de la solución deba ser descrito estadísticamente después de todo.

3.3 Modelos de Clausura de Segundo Orden

Puesto que se tienen ecuaciones para el estado instantáneo del flujo y para su media temporal, es posible también derivar una ecuación para las fluctuaciones de velocidad. Al restar la ecuación (3.17) de la ecuación (2.16), omitiendo la fluctuaciones de densidad, excepto en la fuerza de gravedad, resulta

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}u'_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho}(\bar{u}_i u'_k + u'_i \bar{u}_k + u'_i u'_k - \overline{u'_i u'_k}) \right] = \\ - \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u'_k}{\partial x_i} \right) \right] - \rho' g \delta_{i3} - 2\bar{\rho} \varepsilon_{irs} \Omega_r u'_s \end{aligned} \quad (3.18)$$

De igual forma, restando (3.16) de (2.1) se obtiene la relación auxiliar

$$\frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}u'_k) = 0 \quad (3.19)$$

La ecuación (3.18) se multiplica ahora por u'_j y una ecuación análoga a la resultante puede escribirse permutando los subíndices i y j . Sumando a continuación ambas ecuaciones y promediando en el tiempo se llega (con ayuda de (3.19) y luego de reordenar convenientemente algunos términos) a la siguiente ecuación de transporte para los esfuerzos de Reynolds $\overline{u'_i u'_j}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho u'_i u'_j}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho \bar{u}_k u'_i u'_j}) = \\ - \overline{\rho u'_j u'_k} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} - \overline{\rho u'_i u'_k} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho u'_i u'_j u'_k}) \\ - \frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{p' u'_j}) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{p' u'_i}) + \overline{p' \left(\frac{\partial u'_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)} \\ + \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \overline{\mu \left[u'_j \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u'_k}{\partial x_i} \right) + u'_i \left(\frac{\partial u'_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u'_k}{\partial x_j} \right) \right]} \right\} \\ - \mu \left\{ \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u'_k}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}} + \overline{\left(\frac{\partial u'_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u'_k}{\partial x_j} \right) \frac{\partial u'_i}{\partial x_k}} \right\} \\ - \overline{g \rho' u'_j} \delta_{i3} - \overline{g \rho' u'_i} \delta_{j3} - 2\bar{\rho} \Omega_r (\varepsilon_{irs} \overline{u'_s u'_j} + \varepsilon_{jrs} \overline{u'_s u'_i}) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Los múltiples términos del lado derecho pueden recibir la siguiente interpretación: los dos primeros son la producción de esfuerzos debido a la interacción con el flujo principal; los tres que contienen a p' representan la redistribución de los esfuerzos debido a la interacción presión – velocidad; el término en la siguiente línea es la difusión de esfuerzos debido a la viscosidad; y el que le sigue es la destrucción de esfuerzos por acción de la misma; en la última línea se tienen la producción (o destrucción) de esfuerzos debido a la flotación y al efecto de Coriolis. Se advierte además la aparición de la triple correlación $\overline{u'_i u'_j u'_k}$ mencionada anteriormente, la que corresponde a la difusión turbulenta de los esfuerzos de Reynolds. Esta cantidad debe ser modelada en forma apropiada en términos de $\overline{u'_i u'_j}$ a fin de cerrar el sistema formado por las ecuaciones (3.20) y (3.17). Asimismo, deben modelarse los restantes términos difusionales y disipativos del lado derecho de (3.20).

Se han formulado diversos modelos siguiendo esta línea, llamada clausura de segundo orden de las ecuaciones de Reynolds (ya que se resuelve explícitamente hasta los momentos estadísticos de segundo orden $\overline{u'_i u'_j}$), que simbólicamente se podrían resumir en la forma

$$\frac{d}{dt}(\overline{u'_i u'_j}) = D_{ij} + P_{ij} - \Phi_{ij} - \varepsilon_{ij} \quad (3.21)$$

donde D_{ij} denota el transporte difusivo de $\overline{u'_i u'_j}$; P_{ij} la producción debido a los gradientes de las velocidades medias y a las fuerzas de cuerpo; Φ_{ij} los efectos combinados de interacciones no dispersivas de la presión y procesos de disipación no isotrópicos; y ε_{ij} la disipación viscosa.

Como la ecuación (3.20) muestra, de los procesos anteriores sólo P_{ij} queda exactamente representado en función de momentos de segundo orden y variables del flujo medio. Las fluctuaciones de densidad pueden ponerse en función de fluctuaciones de temperatura, de modo que los términos debido a la flotación contendrán la correlación $\overline{u'_i T'}$. Para ésta es directo deducir una ecuación de transporte, utilizando la ecuación de energía promediada en el tiempo, en forma similar a lo efectuado para $\overline{u'_i u'_j}$, la cual formará parte también del sistema de ecuaciones cerrado. De hecho, se puede obtener una ecuación general para la correlación de las fluctuaciones de velocidad y fluctuaciones de cualquier propiedad escalar ϕ transportada por el flujo (como la concentración), que adoptará la forma

$$\frac{d}{dt}(\overline{u'_i \phi'}) = D_i + P_i - \Phi_i \quad (3.22)$$

donde D_i , P_i y Φ_i designan procesos similares a los de la ecuación (3.21).

Para P_{ij} , Φ_{ij} y ε_{ij} se requieren aproximaciones suplementarias, existiendo varios esquemas con diferentes niveles de complejidad. Para D_{ij} la proposición más comúnmente usada es la de difusión proporcional al gradiente^[20]:

$$D_{ij} = -C_s \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{k}{\varepsilon} \overline{u'_k u'_l} \frac{\partial}{\partial x_l} \overline{u'_i u'_j} \right) \quad (3.23)$$

con C_s una constante experimental ($C_s \approx 0,2$). Aquí, k es la energía cinética turbulenta, definida como

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_k u'_k} \quad (3.24)$$

mientras que ε es la razón de disipación viscosa de k , y debe ser calculada a su vez mediante una ecuación de transporte (más detalles en la sección 3.4).

Se han hecho intentos por modelar separadamente las partes constituyentes de D_{ij} (incluyendo contribuciones por fluctuaciones de velocidad y presión, y por fuerzas de cuerpo fluctuantes), pero los modelos surgidos han tenido un efecto reducido sobre las características principales predichas para el campo de flujo.

La correlación presión-deformación Φ_{ij} , se suele separar en dos partes: $(\Phi_1)_{ij}$ conteniendo interacciones puramente turbulentas, y $(\Phi_2)_{ij}$ conteniendo interacciones con el flujo medio. Modelos desarrollados para estas cantidades son

$$(\Phi_1)_{ij} = -C_1 \frac{\varepsilon}{k} (\overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} k) \quad (3.25a)$$

conocido como el modelo de Rotta, y

$$(\Phi_2)_{ij} = -C_2 (P_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{kk}) \quad (3.25b)$$

siendo C_1 y C_2 constantes propias del modelo. La presencia de k y ε en (3.25a) proviene de dividir por la escala de tiempo de las fluctuaciones, la que se considera $\sim k/\varepsilon$. Puesto que, de acuerdo a la definición (3.24), $2k$ corresponde a la traza del tensor de esfuerzos de Reynolds, la expresión entre paréntesis en (3.25a) es la parte anisotrópica de dicho

tensor, en analogía a la función que cumple el esfuerzo desviatorio τ_{ij} respecto al esfuerzo total σ_{ij} en la ecuación (2.4). Así, $(\Phi_1)_{ij}$ representa una tendencia hacia la isotropía sobre los esfuerzos turbulentos. Algo equivalente produce $(\Phi_2)_{ij}$ sobre el tensor P_{ij} . Experimentos han mostrado que C_1 no tiene un valor único sino que se incrementa con el grado de anisotropía de la turbulencia; a la vez, se sugiere que C_2 debería disminuir. Launder [20] resume las diversas combinaciones de valores para este par de constantes que han sido usadas por diferentes investigadores.

Adicionalmente se ha observado que en flujos próximos a una pared, ésta influye sobre la correlación Φ_{ij} , siendo su principal efecto el de amortiguar el esfuerzo normal $\overline{(u'_i)^2}$ perpendicular a la pared. Teorías de este comportamiento propiamente tal son escasas, y los investigadores ajustan las constantes de sus modelos para incluir los cambios provocados por la pared. El efecto usualmente se toma proporcional a L/z , con L la escala espacial característica de la turbulencia, y z la distancia a la pared. Para L la práctica habitual es identificarla con $k^{3/2}/\varepsilon$. Con este procedimiento se ha conseguido predecir tolerablemente bien la influencia de una superficie plana, pero la aproximación no permite su extensión a superficies de topografía arbitraria. Otra debilidad de estos modelos llamados de reflexión de pared es el hecho de que en la estela de un obstáculo al flujo, el amortiguamiento de los esfuerzos normales persiste a lo largo de cierta distancia flujo abajo, lo que sugiere que parte de lo que se ha considerado "reflexión de pared" se debe más bien a un "aplanamiento" de los vórtices próximos a la pared; un efecto que, aunque causado por la pared, desaparecerá sólo gradualmente a medida que esos vórtices se desplacen flujo abajo hacia la estela del cuerpo.

La disipación de los esfuerzos es normalmente calculada suponiendo que predominan para ésta las condiciones de isotropía local, de manera que la disipación para las tres componentes normales $\overline{(u'_i)^2}$ es la misma (y por tanto, $1/3$ de la disipación total 2ε), y cero para las componentes de corte. Luego,

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij} \quad (3.26)$$

De lo expuesto en esta sección se puede concluir que un modelo de clausura de segundo orden ofrece, con respecto a la formulación más simplificada de la sección 3.4 que sigue, la ventaja de un tratamiento exacto de los agentes generadores de esfuerzos de Reynolds, tanto mecánicos como térmicos. Lo mismo es cierto en relación con otros

transportes turbulentos de escalares. Además, como cada término $\overline{u'_i u'_j}$ y $\overline{u'_i \phi'}$ es resuelto de modo independiente, la anisotropía en la difusividad turbulenta de momentum o de ϕ queda directamente considerada. Como contraparte, la tarea computacional se incrementa enormemente: es necesario resolver 6 ecuaciones de transporte para los esfuerzos de Reynolds, junto con una ecuación para ε . Para incorporar los efectos de flotación se precisan tres ecuaciones para las correlaciones $\overline{u'_i T'}$ y una más para la correlación $\overline{(T')^2}$ que aparecerá en las ecuaciones de transporte para aquéllas. Por último, si se quieren calcular por esta vía los flujos turbulentos de concentración, se agregan las tres ecuaciones para $\overline{u'_i c'}$ y una para $\overline{(c')^2}$. Todo esto implica resolver 15 ecuaciones de transporte adicionales a las de las variables medias, lo que configura un sistema de 21 ecuaciones diferenciales parciales a ser resueltas simultáneamente. Las exigencias que esto impone en cuanto a tiempo de procesamiento y memoria (además de las dificultades de estabilidad numérica), excede la capacidad normal disponible al trabajar con recursos computacionales limitados. Se hace necesario por lo tanto, introducir simplificaciones adicionales.

Una aproximación propuesta por Rodi [29], es la de suponer que el transporte total de $\overline{u'_i u'_j}$ es proporcional al transporte de k , siendo $\overline{u'_i u'_j}/k$ el factor de proporcionalidad. El transporte de k está dado por la contracción tensorial de (3.21), por lo que

$$\frac{d}{dt}(\overline{u'_i u'_j}) - D_{ij} = \frac{\overline{u'_i u'_j}}{k} \left(\frac{dk}{dt} - \frac{D_{mm}}{2} \right) \quad (3.27)$$

y, ya que $\Phi_{mm} = 0$, se tiene

$$\frac{d}{dt}(\overline{u'_i u'_j}) - D_{ij} = \frac{\overline{u'_i u'_j}}{2k} (P_{mm} - 2\varepsilon) \quad (3.28)$$

Así, la substitución de este resultado en la ecuación (3.21) la reduce a un conjunto de ecuaciones algebraicas para los esfuerzos de Reynolds, siendo necesario resolver ecuaciones diferenciales sólo para k y ε . Numerosas aplicaciones de estos modelos algebraicos han sido reportados, con buenos resultados en geometrías relativamente simples, a pesar de que la aproximación es motivada más por consideraciones de simplicidad numérica que por realismo físico. Sin embargo, desde el punto de vista computacional, la aproximación no ha aportado beneficios significativos en flujos con recirculación o tridimensionales, planteando problemas para asegurar la convergencia

de la solución comparables a los que se tienen al aplicar los modelos diferenciales que se busca simplificar. Estas dificultades para la convergencia son mucho mayores que las que se presentan con los modelos que aplican el concepto de viscosidad turbulenta, que constituye la siguiente posibilidad de simplificación. Este último es el esquema que se adopta en este trabajo, a través del conocido modelo $k - \varepsilon$, el cual ha sido probado más que ningún otro modelo de turbulencia basado en dos ecuaciones de transporte, encontrándose que es capaz de describir muchos tipos diferentes de flujos, incluyendo flujos tridimensionales y con recirculación, con una precisión suficiente para propósitos prácticos. Además se han reportado casos^[26] en los cuales el mayor esfuerzo computacional con el modelo algebraico para los esfuerzos de Reynolds no ha sido compensado con una mayor exactitud respecto a resultados obtenidos con el $k - \varepsilon$, e incluso en ciertas condiciones éstos han desmejorado.

3.4 Modelo $k - \varepsilon$

El modelo $k - \varepsilon$ comparte con los modelos de segundo orden el problema de obtener la razón ε de disipación de energía cinética turbulenta. A su vez, los valores locales para ésta deben ser calculados en base a una ecuación de transporte apropiada, pero en lugar de resolver una ecuación para cada componente del tensor de esfuerzos de Reynolds, se supone una ecuación constitutiva que relaciona los esfuerzos y la deformación en forma análoga a la que establece la ley de Stokes en un flujo laminar:

$$-\rho(\overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} k \delta_{ij}) = \mu_t \left[\left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (3.29)$$

donde μ_t se define como la viscosidad turbulenta. Puede advertirse la similitud entre esta ecuación y la ecuación (2.14) para los esfuerzos laminares, con $2k/3$ representando en este caso lo que podría considerarse como la presión turbulenta. La viscosidad turbulenta es calculada aplicando la relación de Prandtl-Kolmogorov,

$$\mu_t = \rho k^{1/2} L \quad (3.30)$$

donde L es la escala espacial característica de la turbulencia, y $k^{1/2}$ actúa como una velocidad representativa del movimiento turbulento. La longitud L no es constante dentro de la región del flujo, y está sujeta además a transporte e influida por la historia

del flujo, de un modo similar a k , por lo que su valor debe provenir también de una ecuación de transporte. No es necesario que dicha ecuación esté planteada directamente para L , pues cualquier otra variable que sea una combinación de k y L permitirá calcular μ_t . De las variables que han sido propuestas, la razón ε de disipación de energía cinética turbulenta es la más empleada, ya que su ecuación de transporte es más simple y no requiere términos adicionales en zonas próximas a una pared. Además, ε aparece explícitamente en la ecuación para k .

Por análisis dimensional se concluye que ε es proporcional a $k^{3/2}/L$, de modo que la viscosidad turbulenta es calculada como

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.31)$$

La constante C_μ recibe generalmente el valor de 0,09.

3.4.1 Ecuación de Transporte para k

La ecuación de transporte para k puede derivarse directamente de (3.20) aplicando una contracción a la misma, obteniéndose

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \bar{u}_j k) &= -\bar{\rho} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \overline{u'_j k'}) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{p' u'_j}) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{\mu u'_i \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)} \right] - \overline{\mu \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} - \overline{\rho' u'_3} g \end{aligned} \quad (3.32)$$

A la misma expresión se puede llegar efectuando primero una descomposición de Reynolds de las variables en la ecuación de energía cinética total (2.27), y promediándola en el tiempo. El resultado es una ecuación que contiene tanto la componente media de la energía cinética como la turbulenta. Para aislar la contribución de la turbulencia se deduce luego una ecuación sólo para la energía cinética media, multiplicando por \bar{u}_i la ecuación de Reynolds (3.17), la cual, restada de la ecuación anterior conduce a (3.32).

En tales consideraciones energéticas queda de manifiesto que el primer término

en el miembro derecho de (3.32) es la parte del trabajo realizado por los esfuerzos turbulentos que no contribuye a la energía cinética media, sino que corresponde a la energía transferida desde el flujo medio a la componente turbulenta. El término siguiente es la difusión turbulenta de k por acción de las fluctuaciones de velocidad, y a continuación se tiene la difusión provocada por las fluctuaciones de presión. La naturaleza difusiva de este término puede apreciarse integrándolo sobre una región en el espacio que contenga al campo de flujo, lo suficientemente grande para que en sus contornos la turbulencia ya sea nula. El resultado de tal integral es cero, mostrando que el término en cuestión no contribuye al nivel total de energía turbulenta, sino que solamente la redistribuye en el espacio, entre las tres componentes de la velocidad.

Sigue a los términos anteriores el trabajo efectuado por los esfuerzos viscosos asociados al movimiento turbulento, y a continuación la disipación de energía turbulenta. El último término es la contribución (ya sea positiva o negativa) de la flotación (los términos en (3.20) originados por la fuerza de Coriolis se anulan en la ecuación contraída, debido a la simetría de $\overline{u'_s u'_i}$, en concordancia con el hecho de que la fuerza de Coriolis no ejecuta trabajo sobre el elemento de masa).

Al aplicar la relación (3.29) (y puesto que para un flujo incompresible $\partial u_i / \partial x_i = 0$), la producción de k puede expresarse en base a los gradientes de velocidad del flujo medio:

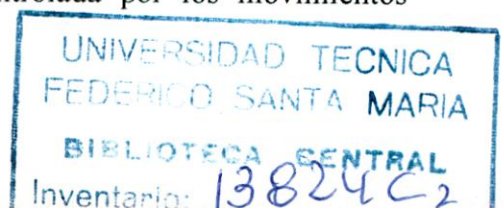
$$-\overline{\rho u'_i u'_j} \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} \quad (3.33)$$

Por su parte, la difusión turbulenta se supone proporcional al gradiente de k , siendo el coeficiente de difusión proporcional a su vez a la viscosidad turbulenta, en analogía a lo que ocurre en procesos de difusión molecular:

$$-(\overline{\rho u'_j k'} + \overline{p' u'_j}) = \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \quad (3.34)$$

σ_k es por lo tanto el equivalente a un número de Prandtl para la difusión de energía turbulenta. El valor que se toma en la mayoría de las aplicaciones es 1,0.

En cuanto a la disipación, es sabido que ésta ocurre predominantemente en los vórtices de menor tamaño presentes, los cuales, para números de Reynolds elevados, son mucho más pequeños que aquellos que contienen la mayor parte de la energía cinética. La razón de disipación no es entonces controlada por los movimientos



disipativos mismos, sino por los procesos que transfieren energía sucesivamente de los vórtices mayores a los más pequeños. Así, los movimientos de menor escala son desde este punto de vista pasivos: se ajustan en tamaño como sea requerido para disipar la energía a una razón dictada por un sistema de vórtices substancialmente mayores, cuya estructura es en gran medida independiente de la viscosidad. Por consiguiente, se suele suponer que la disipación depende solamente de ρ , k y la escala L de los movimientos portadores de energía, y por análisis dimensional se tiene

$$\mu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} = C_D \rho \frac{k^{3/2}}{L} = \rho \varepsilon \quad (3.35)$$

Para la constante C_D el valor usualmente empleado es 1,0.

El último término en (3.32) es la fuente de energía turbulenta debido a las fluctuaciones de densidad en presencia del campo gravitacional, y corresponde por tanto a un efecto de flotación. Empleando la ley de gas ideal

$$\rho = \frac{p}{RT},$$

tomando logaritmos y diferenciándola se obtiene

$$\frac{d\rho}{\rho} = \frac{dp}{p} - \frac{dT}{T} \quad (3.36)$$

Por lo tanto, en términos de las fluctuaciones, esta ecuación se puede aproximar para esta aplicación como

$$\frac{\rho'}{\bar{\rho}} \approx \frac{p'}{\bar{p}} - \frac{T'}{\bar{T}} \quad (3.37)$$

ya que es razonable suponer que $|\rho'| \ll \rho$, $|p'| \ll p$ y $|T'| \ll T$. En flujos atmosféricos, el término T' es por mucho el más dominante^[17], por lo que la fluctuación de densidad será esencialmente proporcional a la de temperatura (lo cual es consecuente con la desconexión que se estableció entre la densidad y la presión al introducir la suposición de flujo incompresible). En consecuencia,

$$\overline{\rho' u'_3 g} = -\frac{\bar{\rho}}{\bar{T}} \overline{u'_3 T' g} \quad (3.38)$$

La ecuación de transporte para k toma entonces la forma definitiva

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \bar{u}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{ef}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G - \bar{\rho} \varepsilon + \frac{\bar{\rho}}{T} \overline{u'_3 T' g} \quad (3.39)$$

donde

$$G = \mu_{ef} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \quad (3.40)$$

es la producción mecánica de energía cinética turbulenta. μ_{ef} es la llamada viscosidad efectiva, definida como la suma de la viscosidad turbulenta μ_t y la viscosidad molecular μ . De este modo, se incluye en G la contribución a k de los esfuerzos viscosos inducidos por las fluctuaciones de velocidad (si bien para altos números de Reynolds se cumple que $\mu_t \gg \mu$, y el aporte de la viscosidad molecular podría despreciarse).

3.4.2 Ecuación de Transporte para ε

Aunque se puede derivar de la ecuación de Navier–Stokes una ecuación exacta para el transporte de ε , ésta no resulta tan útil como las ecuaciones obtenidas para $\overline{u'_i u'_j}$ o k . La razón para esto es que los términos principales de la ecuación contienen correlaciones a nivel de la estructura fina del flujo, que describen el mecanismo detallado de disipación. Sin embargo, como se dijo en párrafos anteriores, los vórtices portadores de energía se consideran independientes de los movimientos a escala fina, de modo que el desarrollo de una ecuación de transporte para ε ha sido guiado principalmente por el análisis dimensional y la experimentación. La forma usual adoptada para esta ecuación es

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_1 \frac{\varepsilon}{k} G - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.41)$$

y los valores generalmente asignados a las constantes empíricas en flujos de capa límite son $C_1 = 1.43 \sim 1.45$ y $C_2 = 1.90 \sim 1.92$. Para σ_ε (el número de Prandtl para la difusión de ε) se utiliza un valor en torno a 1,3.

Varios investigadores han propuesto términos adicionales en el lado derecho de esta ecuación, orientados fundamentalmente a adaptar el modelo existente para que se

reproduzca correctamente el comportamiento en ciertos casos anómalos, que muestran discrepancia con la forma y los coeficientes que han dado resultado satisfactorio sobre un rango amplio de otros tipos de flujos (se trata principalmente del chorro axisimétrico en un medio en reposo, para el cual los niveles de energía cinética predichos resultan excesivos, lo que se ha imputado a la ecuación para ε). Las correcciones se han introducido preferentemente en el contexto de los modelos de clausura de segundo orden, e incluyen fuentes adicionales de ε de la forma^[20]

$$\frac{\varepsilon^2}{k} f(A_2), \quad \text{donde } A_2 = a_{ij} a_{ij}, \quad \text{con } a_{ij} = \frac{1}{k} (\overline{u'_i u'_j} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \overline{u'_k u'_k})$$

(A_2 es por tanto el segundo invariante del tensor de Reynolds, a menudo llamado la "anisotropía"). Algunas proposiciones para la función $f(A_2)$ han sido $f(A_2) = 3,75/(1 + 1,5\sqrt{A_2})$ (haciendo a la vez $C_1 = 1,1$), y también $f(A_2) = 0,6A_2$ (con $C_1 = 0,475$). No obstante los resultados para otras clases de chorros no han resultado satisfactorios. Lo mismo ha sucedido con otras fuentes adicionales probadas, y en general los intentos por mejorar la versión convencional de la ecuación de ε para ciertas clases de flujos han dado origen a modificaciones que, sujetas a pruebas más amplias, han producido resultados peores para otros flujos que la forma original.

En este trabajo se utiliza la ecuación (3.41) en su forma clásica, ya que junto con la ecuación para k constituye un modelo que ha demostrado predecir adecuadamente flujos tridimensionales con separación y recirculación, como los que aquí interesan.

4 Difusión Turbulenta de Escalares

4.1 Ecuaciones Promediadas de Temperatura y Concentración

Las ecuaciones de conservación de energía y especies químicas pueden promediarse también en el sentido de Reynolds, considerando que la temperatura y la concentración fluctúan en el tiempo como lo hace la velocidad, por lo que es posible escribir

$$T = \bar{T} + T' \quad \text{y} \quad c = \bar{c} + c'$$

El resultado de promediar la ecuación (2.34) para la temperatura es entonces

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{T}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \alpha \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \overline{u'_i T'}) \\ &+ \frac{1}{C_p} \left[\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \overline{u'_i \frac{\partial p'}{\partial x_i}} \right] + \frac{\mu}{C_p} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\bar{\rho}}{C_p} \varepsilon + \frac{S_h}{C_p} \end{aligned} \quad (4.1)$$

donde, de acuerdo al tratamiento de flujo incompresible, se ha eliminado el término que contiene a la razón de expansión Δ .

La aparición de la razón de disipación ε en esta ecuación, con signo contrario al que tiene en la ecuación para k era de esperarse, por cuanto esta fuente de energía térmica es el destino final de la energía cinética turbulenta, al ser disipada como calor. No obstante, desde el punto de vista del balance de energía térmica la fuente mencionada resulta despreciable, como también el término que la precede en (4.1), que es el efecto análogo para el flujo medio, es decir, la disipación térmica de energía cinética media por acción de la viscosidad. Es bien sabido que la influencia de estos términos sobre la temperatura del fluido (a veces llamada calentamiento aerodinámico) sólo cobra importancia en flujos de alta velocidad. Por su parte, el promedio $\overline{u'_i \frac{\partial p'}{\partial x_i}}$ representa la parte del trabajo ejecutado por las fluctuaciones de presión que contribuye a la energía cinética turbulenta, y puede considerarse despreciable también en el contexto de esta ecuación de energía térmica. La presencia de este y los demás términos que contienen derivadas de la presión se debe a la formulación de la ecuación de energía térmica en función del calor específico a presión constante, con lo cual se involucra el trabajo de flujo.

Con estas simplificaciones la ecuación para la temperatura media del flujo es

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{T}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \alpha \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \overline{u'_i T'}) + \frac{1}{C_p} \frac{d\bar{p}}{dt} + \frac{S_h}{C_p} \quad (4.2)$$

Del mismo modo se obtiene a partir de (2.37) la ecuación para la concentración media de substancia

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \bar{c}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{c}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \overline{u'_i c'}) + S_c \quad (4.3)$$

donde D es el coeficiente de difusión molecular. Tanto en (4.2) como en (4.3) aparecen las correlaciones entre las fluctuaciones de la propiedad transportada y las fluctuaciones de velocidad, y en general, para cualquier cantidad escalar ϕ transportada por el flujo y sujeta a una ley de conservación como las tratadas en este trabajo, el promedio de Reynolds de su ecuación de transporte contendrá el término $\overline{u'_i \phi'}$. Como se señaló en la sección 3.3, los modelos de clausura de segundo orden deducen ecuaciones directamente para estas cantidades. Al trabajar con la hipótesis de viscosidad turbulenta se considera que $\overline{u'_i \phi'}$ representa la difusión de ϕ por efecto de la turbulencia (se trata realmente del transporte convectivo de sub-malla): porciones macroscópicas del fluido moviéndose con una velocidad u'_i con respecto a la velocidad media, transportan a la propiedad en cuestión. Ya que se supone que las distribuciones de probabilidad para las fluctuaciones u'_i y ϕ' son simétricas en torno a sus medias, al promediar en el tiempo quedará únicamente $\overline{u'_i \phi'}$ como flujo neto de ϕ , en regiones donde el gradiente de $\bar{\phi}$ en la dirección de u'_i sea distinto de cero (puesto que si $\partial \bar{\phi} / \partial x_i$ es negativo, los flujos $u'_i \phi'$ con $u'_i > 0$ serán en promedio mayores que los $u'_i \phi'$ con $u'_i < 0$, y como resultado se establecerá un flujo neto de ϕ en la dirección de x_i). Esto constituye una analogía a gran escala del mecanismo de transporte molecular postulado por la mecánica estadística (la misma idea que subyace en la hipótesis de viscosidad turbulenta), por lo que se introduce un coeficiente de difusión turbulenta K para la variable ϕ , tal que

$$\overline{u'_i \phi'} = -K \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_i} \quad (4.4)$$

donde K es una propiedad del campo de flujo, y por lo tanto, una función de la

posición.

Si bien la justificación teórica de esta analogía macroscópica con la difusión molecular ha sido cuestionada, la ecuación (4.4) ha mostrado ser una representación útil de los flujos de sub-malla, y es el modelo más empleado cuando no se resuelve una ecuación de transporte para $\overline{u_i \phi}$. La mayoría de las teorías desarrolladas para describir la difusión turbulenta en la atmósfera aplican de un modo u otro el concepto del coeficiente de difusión K . El problema fundamental al que se ha avocado la mayor parte de la investigación en torno a este tema, tanto en el aspecto práctico como teórico, ha sido el de predecir las variaciones en el espacio y el tiempo de las propiedades estadísticas asociadas con la distribución de un contaminante proveniente de fuentes puntuales o lineales en la capa límite atmosférica. Los casos que han recibido mayor atención son aquellos relacionados con plumas estadísticamente estacionarias generadas por la emisión continua de un contaminante a una razón constante desde una fuente fija. El marco teórico dentro del cual se ha tratado la dispersión atmosférica turbulenta se suele dividir en tres direcciones principales: la teoría estadística, la teoría de similaridad y la teoría de transporte–gradiente (teoría K).

4.2 Teoría Estadística

La teoría estadística relaciona la dispersión de partículas con las propiedades estadísticas del campo turbulento de velocidad. En tales circunstancias, dos partículas fluidas, debido a la componente aleatoria en sus velocidades, se moverán de tal modo que estadísticamente la distancia entre ambas se incrementará con el tiempo. Al considerar un número muy grande de estas partículas emitidas desde una fuente específica y seguir sus trayectorias individuales a través del campo de flujo se observará una dispersión gradual de éstas en el espacio, conformando una pluma que se difunde lateralmente a medida que es transportada por la velocidad principal del flujo, y cuyas características esenciales pueden determinarse en base a promedios sobre todas las partículas.

En un análisis teórico de esta situación se suele suponer que el campo de turbulencia es homogéneo en el espacio y el tiempo (es decir, estacionario). Esta última condición es necesaria porque de lo contrario no sería válido promediar sobre un gran número de partículas que hubiesen partido desde la fuente en momentos consecutivos.

La teoría se basa en argumentos similares a los de la teoría cinética de los gases, para relacionar el desplazamiento de una partícula en un instante t , después de ser emitida, con su velocidad. Considérese por ejemplo el desplazamiento lateral y de una partícula, con respecto a un eje fijo x que apunte en la dirección del viento, y sea v la velocidad de dispersión en la dirección lateral mencionada (v es así una componente lateral turbulenta superpuesta a la velocidad uniforme del campo en dirección x , y es responsable por tanto de la difusión lateral de la pluma formada). La distancia recorrida en esta dirección después de un tiempo t es

$$y(t) = y(0) + \int_0^t v(t') dt' \quad (4.5)$$

Sin perder generalidad se puede situar el origen de las coordenadas en la fuente que emite las partículas, de modo que $y(0) = 0$. Ya que v se considera aleatoria, el promedio de los valores de $y(t)$ para un gran número de partículas será también cero.

Sea ahora $y(t_2 + t)$ el desplazamiento lateral durante el intervalo de tiempo t para una partícula que partió en el instante t_2 . Entonces,

$$y(t_2 + t) = \int_0^t v(t_2 + t') dt' \quad (4.6)$$

La varianza de y (que se llamará σ_y^2) puede determinarse promediando con respecto a un gran número de partículas que parten en diferentes instantes t_2 :

$$\begin{aligned} \sigma_y^2(t) = \overline{y^2}(t) &= \frac{1}{T} \int_0^T y^2(t_2 + t) dt_2 = \frac{1}{T} \int_{t_2=0}^T \int_{t'=0}^t \int_{t''=0}^t v(t_2 + t') v(t_2 + t'') dt' dt'' dt_2 \\ &= \int_{t''=0}^t \int_{t'=0}^t \overline{v(t_2 + t') v(t_2 + t'')} dt' dt'' \end{aligned} \quad (4.7)$$

donde $\overline{v(t_2 + t') v(t_2 + t'')} = \frac{1}{T} \int_0^T v(t_2 + t') v(t_2 + t'') dt_2$ corresponde a la correlación en el tiempo de la velocidad turbulenta de las partículas entre los instante t' y t'' .

Definiendo ahora como $\tau = t'' - t'$ el intervalo de tiempo que separa estos

instantes, se introduce el coeficiente de correlación lagrangiano

$$R_L(t) = \frac{\overline{v(t)v(t+\tau)}}{v^2(t)} \quad (4.8)$$

Debido a la simetría con respecto a t' , t'' de la integral en (4.7), ésta también puede evaluarse como

$$\sigma_y^2(t) = 2 \int_{t'=0}^t \int_{t''=0}^{t'} \overline{v(t_2 + t')v(t_2 + t'')} dt'' dt'$$

la cual, en función del coeficiente de correlación queda como

$$\sigma_y^2(t) = 2 \overline{v^2(t)} \int_0^t \int_0^{t'} R_L(\tau) d\tau dt' \quad (4.9)$$

De acuerdo a su definición, $R_L(0) = 1$, y además este valor es el máximo que puede tomar (ya que $\overline{[v(t+\tau) - v(t)]^2} \geq 0$ se concluye, en virtud de la homogeneidad en el tiempo que $2 \overline{v^2(t)} - 2 \overline{v(t+\tau)v(t)} \geq 0$, y por lo tanto $R_L(\tau) \leq 1$). También de la homogeneidad en el tiempo se deduce que $R_L(\tau)$ debe ser simétrica con respecto a τ , e intuitivamente cabe esperar que sea decreciente a medida que τ se incrementa, de modo que para τ suficientemente alto $R_L(\tau)$ se haga finalmente cero. Luego, la integral siguiente es finita:

$$\int_0^{\infty} R_L(\tau) d\tau = \mathfrak{L}_L \quad (4.10)$$

y \mathfrak{L}_L es conocida como la escala integral de tiempo (lagrangiana), que puede interpretarse como una medida del periodo de tiempo más largo durante el cual, en promedio, persiste el movimiento de una partícula en una dirección dada.

Resulta interesante observar las formas asintóticas de la ecuación (4.9) para valores muy pequeños y muy grandes de t . En el primer caso R_L es casi igual a uno, y puede tomarse aproximadamente como constante en la integración, de manera que con $R_L(\tau) \approx 1$ la ecuación se reduce a

$$\sigma_y^2(t) \approx \overline{v^2} t^2 \quad (4.11)$$

y la dispersión $\sigma_y(t)$ ocurre proporcional al tiempo. En cambio para t suficientemente grande ($t \gg \mathfrak{L}$) se obtiene

$$\sigma_y^2(t) \approx 2 \bar{v}^2 \mathfrak{L} t \quad (4.12)$$

y la dispersión $\sigma_y(t)$ en la región lejana a la fuente es proporcional a $t^{1/2}$. Así, para la difusión desde una fuente puntual estacionaria, la razón de dispersión disminuye a medida que el tiempo de transporte se incrementa. Se ha demostrado que inicialmente el espectro completo de energía contribuye a la difusión, pero a medida que el tiempo aumenta una especie de filtro pasa-bajos con una frecuencia de corte de $1/t$ aproximadamente actúa sobre el espectro^{[11], [28]}. Eventualmente sólo los vórtices más grandes actúan como difusores efectivos, mientras que los vórtices pequeños simplemente mueven el polutante en un sentido y otro dentro de la nube.

El resultado para t grande es equivalente al que se obtendría por analogía con un proceso de difusión según la ley de Fick, con un coeficiente de difusión constante. Al aplicar esta ley para la difusión en la dirección transversal de las partículas que salen desde la fuente situada en $y = 0$, se puede escribir la siguiente ecuación para el número de partículas $n(y, t)$ que han alcanzado una desviación lateral y después de un tiempo t :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = K \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} \quad (4.13)$$

siendo K el coeficiente de difusión. La solución de (4.13) en estas condiciones es

$$n(y, t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Kt}} \exp\left(-\frac{y^2}{4Kt}\right) \quad (4.14)$$

con $Q = \int_{-\infty}^{\infty} n dy$ representado la cantidad total de partículas emitidas hasta el tiempo t .

Considérese ahora el movimiento de estas partículas desde un punto de vista probabilístico, suponiendo que en promedio recorren una distancia \mathfrak{L} en dirección y antes de cambiar su velocidad (en analogía con el recorrido libre medio del movimiento molecular). Se puede demostrar que la probabilidad de que una partícula haya avanzado una distancia y después de N fluctuaciones de velocidad es^[12]

$$P(y; N) = \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\mathfrak{E}_L N}\right) \quad (4.15)$$

Esta probabilidad se puede expresar en función del tiempo reemplazando N en términos de la escala integral de tiempo \mathfrak{E}_L como

$$N = \frac{t}{\mathfrak{E}_L} \quad (4.16)$$

ya que \mathfrak{E}_L representa el tiempo medio durante el cual la partícula mantiene su velocidad. De este modo se tiene

$$P(y; t) = \sqrt{\frac{2\mathfrak{E}_L}{\pi t}} \exp\left(-\frac{y^2 \mathfrak{E}_L}{2\mathfrak{E}_L^2 t}\right) \quad (4.17)$$

Para $t \gg \mathfrak{E}_L$ resultan valores muy grandes para N de modo que la probabilidad varía sólo ligeramente entre valores sucesivos de N , y la distribución de probabilidades puede tomarse como continua. Por consiguiente, la función de densidad de probabilidad $f(y; t)$ que se deduce de (4.17) al aplicar la condición de normalización $\int_{-\infty}^{\infty} f(y; t) dy = 1$ es

$$f(y; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\mathfrak{E}_L^2 / \mathfrak{E}_L)t}} \exp\left(-\frac{y^2}{2(\mathfrak{E}_L^2 / \mathfrak{E}_L)t}\right) \quad (4.18)$$

Esta expresión es equivalente a la ecuación (4.14) (de hecho el cociente $n(y,t)/Q$ en tal ecuación podría considerarse como la probabilidad empírica de que una partícula alcance la coordenada y al cabo de un tiempo t), de manera que la relación entre la constante de difusión y los parámetros característicos de la turbulencia es

$$K = \frac{\mathfrak{E}_L^2}{2\mathfrak{E}_L} \quad (4.19)$$

La función (4.18) es por supuesto la distribución de Gauss, cuya varianza es

$$\sigma_y^2 = (\mathfrak{E}_L^2 / \mathfrak{E}_L)t = 2Kt \quad (4.20)$$

La relación funcional así obtenida entre σ_y^2 y el tiempo coincide con el resultado previo

(4.12), y al emplear dicha relación, el coeficiente de difusión puede ser dado también como

$$K = \overline{v^2} \mathfrak{L} \quad (4.21)$$

Es claro que la varianza $\overline{v^2}$, que es proporcional a la energía turbulenta, se basa en la velocidad lagrangiana. Para relacionar estos resultados con las propiedades turbulentas referidas a un sistema euleriano, se supone que un factor de escala simple, β , puede aplicarse a la coordenada de tiempo. β es el cuociente entre la escala de tiempo lagrangiana \mathfrak{L} y la escala de tiempo euleriana que se define de igual forma, pero con la correlación entre las velocidades medidas en dos instantes distintos en un punto fijo. Para la turbulencia atmosférica se ha observado que en promedio el valor de β es de 4,0 aproximadamente^[11].

Una solución analítica simple para (4.9) se obtiene al suponer para el coeficiente de correlación una forma exponencial $R_L(\tau) = \exp(-|\tau|/\mathfrak{L})$, de lo cual resulta

$$\sigma_y^2(t) = 2 \overline{v^2} \mathfrak{L}^2 \left[\exp\left(-\frac{t}{\mathfrak{L}}\right) + \frac{t}{\mathfrak{L}} - 1 \right] \quad (4.22)$$

Estudios en base a esta ecuación han mostrado que al emplear valores típicos para $\overline{v^2}$ en una capa límite atmosférica neutral, los resultados simplificados de región lejana son aplicables a distancias de la fuente mayores que 5 a 10 veces la altura de la capa límite atmosférica^[28].

Otra solución analítica fue dada por Sutton (1953) a partir de la fórmula

$$R_L(\tau) = \left(\frac{\nu}{\nu + \overline{v^2} \tau} \right)^n$$

donde ν es la viscosidad cinemática y n un parámetro de estabilidad determinado a partir del perfil de velocidad de viento según la ley de potencia

$$\frac{u}{u_0} = \left(\frac{z}{z_0} \right)^{\frac{n}{2-n}}$$

con u_0 la velocidad medida a la altura z_0 . Este método, aunque se basaba en la ecuación fundamental (4.9), llegó a ser tan modificado por factores empíricos que fue

reemplazado por otros al desarrollarse las curvas de Pasquill–Gifford, que se describen en la sección 4.4.2.

La principal dificultad para aplicar la teoría estadística a la difusión en la capa límite atmosférica es que el requisito básico de un campo de turbulencia homogéneo no se satisface. Resultados experimentales muestran que las escalas integrales de longitud para las componentes turbulentas de la velocidad tanto en dirección vertical como transversal varían con la altura, siendo más ostensible el efecto para la componente vertical. Por esto, se considera que la teoría sólo resulta aplicable para predecir la dispersión lateral de plumas^[28], y aún en tales casos la concordancia con las observaciones puede ser dudosa debido a la variación de $\overline{v^2}$ con la altura. Estos problemas se manifiestan ya para flujo sobre una superficie plana, y evidentemente se agudizan si el flujo tiene lugar sobre una superficie irregular, donde sea perturbado por obstáculos tales como edificaciones o colinas. Se han desarrollado algunas aplicaciones de la teoría estadística para estimar la expansión de plumas en flujos alrededor de obstáculos (por ejemplo en Hunt *et al.* [14]), pero se han limitado a geometrías simples, con obstáculos bidimensionales (esto es, muy largos en la dirección transversal al flujo), o tridimensionales axisimétricos. Dichas aplicaciones suponen además que la intensidad de la turbulencia es baja $((u')^2/\overline{u_0} \ll 1$, con $\overline{u_0}$ la velocidad media flujo arriba del obstáculo), y que los vórtices turbulentos no interactúan entre sí en el tiempo que les toma moverse alrededor del obstáculo (lo que equivale a que se cumpla para la escala de tiempo lagrangiana: $\mathfrak{L}_L \gg a/\overline{u_0}$, siendo a la escala de tamaño característica del obstáculo). Para condiciones usuales en flujos atmosféricos esta última suposición restringe, en rigor, las distancias de desplazamiento a lo largo de las trayectorias a no más de 200[m] aproximadamente. Para algunos flujos los resultados pueden ser todavía útiles aun cuando los tiempos de transporte sean grandes comparados con la escala de tiempo lagrangiana, si $\overline{v^2}$ cambia en una pequeña cantidad en el tiempo \mathfrak{L}_L , lo cual se satisface si la pendiente del terreno cambia lentamente sobre distancias del orden de 100[m] para fuentes a baja altura (menos de 20[m]), o distancias del orden de 500[m] para fuentes a 100[m] de altura^[14]. En el caso de flujo sobre colinas las pendientes involucradas son en la mayoría de los casos mucho más abruptas, y la turbulencia cerca de la superficie es generada principalmente por esfuerzos producidos por el estado del flujo local más que por las condiciones imperantes flujo arriba, de modo que la aproximación de la teoría lagrangiana no resulta apropiada.

Por último se pueden mencionar otros tipos de modelación estadística derivados de la anterior, que caen en la categoría de métodos de Monte-Carlo, en los cuales se simulan en el computador las trayectorias de miles de porciones discretas de aire (denominados "puffs") como si fuesen partículas. Los parámetros de la distribución de concentración son calculados luego mediante un análisis estadístico de esta muestra generada. La simulación de las trayectorias requiere el cálculo de las fluctuaciones de velocidad, para lo cual las fórmulas empleadas precisan de todos modos información sobre la función de correlación $R_L(\tau)$ o las escalas espaciales y temporales características de la turbulencia.

4.3 Teoría de Similitud

El interés central de la teoría de similitud es establecer relaciones para los flujos de momentum, calor y masa desde la superficie de la tierra, dentro de la capa superficial, que corresponde aproximadamente al 10% inferior de la capa límite atmosférica. La suposición de flujo constante de momentum en este segmento de la capa conduce a la relación

$$\tau = \tau_0 = \rho u_*^2$$

o bien,

$$K_m \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = u_*^2 \quad (4.23)$$

donde τ_0 es el esfuerzo en la superficie, u_* se define como la velocidad de fricción, K_m es la difusividad de momentum, que equivale a la viscosidad (cinemática) turbulenta, y \bar{u} es la componente media horizontal del viento. Por conveniencia se ha escogido el eje x apuntado en la dirección del viento, aunque sería igualmente válido tener un sistema de coordenadas donde la otra componente horizontal, \bar{v} , no sea nula, de manera que en tal caso

$$K_m \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = u_*^2 \cos \xi$$

$$K_m \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} = u_*^2 \sin \xi$$

con $\xi = \arctan(\bar{v}/\bar{u})$ el ángulo entre la dirección del viento y el eje x . Por simplicidad

se tomará $\xi = 0$ en lo sucesivo.

Para obtener una función de variación de K_m en la capa superficial, una elección razonable como escala de velocidad es u_* , y como escala de longitud, la altura z sobre el suelo. Luego, por razones dimensionales se tiene

$$K_m = \kappa u_* z \quad (4.24)$$

donde la constante de proporcionalidad κ es conocida como la constante de von Kármán, y su valor es situado por la mayoría de los investigadores entre 0,35 y 0,4. Al substituir (4.24) en (4.23) e integrar se obtiene el perfil de velocidad logarítmico

$$\frac{\bar{u}}{u_*} = \frac{1}{\kappa} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) \quad (4.25)$$

donde z_0 ha sido introducida como constante de integración, y es llamada el parámetro de rugosidad. El valor de z_0 depende del tipo de superficie, y en la práctica es determinado extrapolando hasta $\bar{u} = 0$ curvas obtenidas por mediciones de \bar{u} a diferentes alturas z . El rango de valores así obtenido^[25] va desde 0,01[mm] sobre hielo liso, hasta 10[m] sobre edificios con alturas del orden de 100[m]. La extrapolación es, no obstante, sólo un artificio y no se espera que la ecuación (4.25) sea válida a alturas tan bajas como z_0 , las que caen muy por debajo de los puntos más altos de los elementos individuales de rugosidad que caracterizan a la superficie. Por esto, en el caso de superficies muy rugosas (por ejemplo, áreas urbanas, bosques, maizales, etc.), el nivel de referencia más apropiado para medir las alturas no es el suelo, sino un nivel desplazado una distancia d_0 sobre él (d_0 es conocido como el desplazamiento de plano-cero). Con esta modificación la ecuación para el perfil logarítmico pasa a ser

$$\frac{\bar{u}}{u_*} = \frac{1}{\kappa} \ln\left(\frac{z - d_0}{z_0}\right) \quad (4.26)$$

y es de esperar que el valor de d_0 quede entre cero y la altura media de los elementos de rugosidad, dependiendo de cuán densamente éstos cubran la superficie. En la práctica tanto z_0 como d_0 son determinados empíricamente ajustando la curva (4.26) a perfiles de velocidad observados.

La validez de las ecuaciones (4.25) o (4.26) ha sido verificada en capas límites neutralmente estratificadas, pero la omisión de los efectos de flotación en las

consideraciones conducentes a la relación (4.24) limita su aplicación sólo a situaciones donde la producción de energía cinética turbulenta se deba fundamentalmente a la acción mecánica de los esfuerzos y la producción por flotación sea despreciable. Para incorporar el efecto de la flotación a la teoría de similaridad la hipótesis más ampliamente usada es la propuesta por Monin y Obukhov. La suposición es que en la capa superficial el flujo medio y las características turbulentas dependen sólo de cuatro variables independientes: la altura sobre la superficie z , la velocidad de fricción u_* , el flujo turbulento de calor desde la superficie $\overline{w' T'}$, y el denominado parámetro de flotación g/T_0 (con T_0 la temperatura promedio sobre la región analizada). Así, para el perfil de velocidad $\partial\bar{u}/\partial z$ se tendrá una relación funcional con cinco cantidades físicas

$$F(\partial\bar{u}/\partial z, u_*, z, \overline{w' T'}, g/T_0) = 0$$

la cual involucra las dimensiones de longitud, tiempo y temperatura. De acuerdo al teorema de Buckingham del análisis dimensional, se pueden construir dos grupos adimensionales independientes. El primero se escoge como

$$\pi_1 = \frac{z}{u_*} \frac{\partial\bar{u}}{\partial z} \quad (4.27)$$

y el otro debe contener las cantidades restantes. Una posibilidad es

$$\pi_2 = \frac{z}{u_*^3} \frac{g}{T_0} \overline{w' T'} \quad (4.28)$$

que usualmente es escrito en términos del cociente z/L , donde L es definida como

$$L = - \frac{u_*^3}{\kappa \frac{g}{T_0} \overline{w' T'}} \quad (4.29)$$

y conocida como la longitud de Monin–Obukhov. L puede considerarse como la altura a la cual la producción de energía turbulenta por flotación, $g \overline{w' T'}/T_0$, iguala a la producción debido a los esfuerzos de corte, $u_*^3/\kappa z$. Los grupos adimensionales (4.27) y (4.28) deben satisfacer una ecuación general de la forma

$$f\left(\frac{z}{u_*} \frac{\partial\bar{u}}{\partial z}, \frac{z}{L}\right) = 0$$

cuya solución será

$$\frac{z}{u_*} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \frac{1}{\kappa} \phi_m(z/L) \quad (4.30)$$

donde ϕ_m es una función universal de su argumento, y la constante de von Kármán se ha insertado por conveniencia con el fin de tener $\phi_m(0) = 1$, puesto que a medida que el flujo de calor $\overline{w' T'}$ disminuye, L tiende a infinito y de ese modo, para estratificación estable $z/L \rightarrow 0$ y la ecuación (4.30) se reduce al resultado predicho por (4.23) y (4.24).

Un procedimiento similar puede aplicarse para el perfil de temperatura $\partial \bar{T} / \partial z$. De hecho, la teoría de Monin–Obukhov establece que cualquier propiedad media de la turbulencia, $\bar{\varphi}$, en la capa superficial, adimensionalizada por una combinación apropiada o escala φ_0 y formulada en términos de la variables z , u_* , $\overline{w' T'}$ y g/T_0 debe ser una función universal de z/L solamente. Así, los gradientes verticales adimensionales de velocidad y temperatura se expresan como^[1]

$$\frac{\kappa z}{u_*} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \phi_m(z/L) \quad (4.31a)$$

$$\frac{\kappa z}{T_*} \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} = \phi_h(z/L) \quad (4.31b)$$

en donde $T_* = -\overline{w' T'}/u_*$ es una escala de temperatura (temperatura de fricción), y por lo tanto las difusividades turbulentas de momentum y calor serán

$$K_m = \frac{\kappa z u_*}{\phi_m(z/L)} \quad (4.32a)$$

$$K_h = \frac{\kappa z u_*}{\phi_h(z/L)} \quad (4.32b)$$

La transferencia de sustancias gaseosas a la atmósfera puede tratarse en esta teoría de igual forma que la transferencia de calor, de modo que la relación entre los flujos turbulentos de tales sustancias, $\overline{w' c'}$ y el gradiente de su concentración media es análoga a las expresiones (4.31). Se puede definir entonces una escala para la concentración como $c_* = -\overline{w' c'}/u_*$ tal que

$$\frac{\kappa z}{c_*} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \phi_c(z/L) \quad (4.33)$$

y de aquí se desprende para la difusividad de substancia

$$K_c = \frac{\kappa z u_*}{\phi_c(z/L)} \quad (4.34)$$

Se puede esperar que la función de similaridad ϕ_c tenga la misma forma que ϕ_h , si \bar{T} y \bar{c} son ambos considerados como escalares pasivos, cuya difusión es determinada solamente por la difusión turbulenta de velocidad, y entonces $K_c = K_h$. K_m en cambio, incluye también el efecto de las fluctuaciones de presión, de manera que no se puede suponer en general igual a los otros coeficientes (si bien para estratificación estable tienden a coincidir).

Las formas generalmente aceptadas para las funciones de similaridad ϕ_m y ϕ_h sobre la base de experimentos micrometeorológicos son^{[1], [11], [25]}

$$\phi_m = \begin{cases} (1 - \gamma_1 z/L)^{-1/4} & ; z/L < 0 \\ 1 + \beta z/L & ; z/L \geq 0 \end{cases} \quad (4.35)$$

$$\phi_h = \begin{cases} \phi_h(0) (1 - \gamma_2 z/L)^{-1/2} & ; z/L < 0 \\ \phi_h(0) + \beta z/L & ; z/L \geq 0 \end{cases} \quad (4.36)$$

Existen algunas diferencias en los valores estimados para las constantes γ_1 , γ_2 , β y $\phi_h(0)$, que se deben principalmente a dificultades de medición y desviaciones de las condiciones iniciales supuestas por la teoría. Se considera que las mejores estimaciones son:

$$\gamma_1 = 15 \quad ; \quad \gamma_2 = 9 \quad ; \quad \beta = 4,7 \quad ; \quad \phi_h(0) = 0,74$$

Una medida de la estabilidad que es a menudo usada en lugar de z/L es el número de Richardson, definido como

$$Ri = \frac{g}{T_0} \frac{\partial \bar{T} / \partial z}{(\partial \bar{u} / \partial z)^2} \quad (4.37)$$

La ventaja de Ri sobre z/L es el poder ser calculado a partir de gradientes verticales medios de temperatura y velocidad fácilmente medibles. Por otra parte, en lo que

conciene a la modelación computacional, resulta más simple dar condiciones de contorno para simular cierta clase de estabilidad ajustando los valores prescritos para los gradientes de velocidad y temperatura de modo de lograr un valor dado para el número de Richardson. La longitud de Monin–Obukhov involucra en cambio precisamente los flujos turbulentos que se pretende calcular.

El signo de Ri depende del signo del gradiente de temperatura, puesto que $Ri > 0$ corresponde a $\partial\bar{T}/\partial z > 0$ y por lo tanto a una capa con estratificación estable; $Ri < 0$ corresponde a $\partial\bar{T}/\partial z < 0$ e indica una estratificación inestable. Para condición neutra se tendrá $\partial\bar{T}/\partial z = 0$ y $Ri = 0$. A su vez, cuando $Ri < 0$ se suelen distinguir un régimen de convección forzada, para $Ri \geq -1$, en el cual tanto la producción mecánica como térmica de energía cinética turbulenta son importantes, y un régimen de convección libre, para $Ri < -1$, en el cual la producción térmica de turbulencia predomina ampliamente sobre la mecánica.

Además de las ecuaciones (4.35) y (4.36), existen formas alternativas para las funciones de similaridad, que dan suficiente precisión para la mayoría de las aplicaciones prácticas^[1]:

$$\phi_h = \phi_m^2 = (1 - 15 z/L)^{-1/2} \quad ; \quad z/L < 0 \quad (4.38a)$$

$$\phi_h = \phi_m = 1 + 5 z/L \quad ; \quad z/L \geq 0 \quad (4.38b)$$

Estas expresiones se desvían sólo ligeramente de las curvas (4.35) y (4.36), y tienen la ventaja de poder escribirse explícitamente en función de Ri:

$$\phi_h = \phi_m^2 = (1 - 15 Ri)^{-1/2} \quad ; \quad Ri < 0 \quad (4.39a)$$

$$\phi_h = \phi_m = 1 + \frac{5 Ri}{1 - 5 Ri} \quad ; \quad Ri \geq 0 \quad (4.39b)$$

Es posible estimar ahora la proporción entre las difusividades de calor y momentum para diferentes condiciones de estabilidad, dividiendo entre sí las ecuaciones (4.32), e introduciendo las funciones (4.39), de lo que se obtiene

$$\frac{K_h}{K_m} = \frac{\phi_m}{\phi_h} = \begin{cases} (1 - 15 Ri)^{1/4} & ; Ri < 0 \\ 1 & ; Ri \geq 0 \end{cases} \quad (4.40)$$

Luego, en condiciones estables o neutras las difusividades turbulentas de calor y momentum pueden suponerse iguales, mientras que para condiciones inestables la difusividad térmica excede progresivamente a la de momentum a medida que la situación se aproxima al régimen de convección libre.

Las ecuaciones (4.32) y (4.39) muestran que las difusividades disminuyen rápidamente al incrementarse el grado de estabilidad, y tienden a cero cuando Ri se aproxima a 0,2. Este valor es llamado el número de Richardson crítico (algunos autores lo sitúan en 0,25), y para condiciones donde Ri exceda este valor la turbulencia atmosférica es suprimida por la estratificación estable y el flujo se torna laminar.

La teoría de similaridad se ha utilizado para calcular el desplazamiento vertical de plumas procedentes de fuentes continuas y nubes de contaminantes con emisión a nivel del suelo. La rapidez de elevación media es estimada por relaciones de la forma^[28]

$$\frac{d\bar{z}}{dt} = b u_* \phi(\bar{z}/L)$$

con b una constante y ϕ una función de similaridad. La teoría proporciona también el desplazamiento en la dirección del flujo principal. Datos experimentales muestran que la expansión vertical de la pluma es bien predicha en condiciones neutras, incluso si la pluma se ha dispersado más allá de la capa superficial, hasta aproximadamente la mitad de la altura de la capa límite. Sin embargo, uno de los principales inconvenientes es precisamente el que la teoría sólo es capaz de predecir la expansión vertical, y no la horizontal (una situación inversa a lo que ocurre con la teoría estadística). Además, no puede extenderse en forma simple para incluir emisiones en altura sobre el nivel del suelo, y han habido dificultades para desarrollar argumentos de similaridad en casos de estabilidad general. En consecuencia, en lo que concierne a la dispersión de contaminantes, la teoría de similaridad ha sido empleada principalmente como un medio de proveer las difusividades turbulentas verticales para la teoría de transporte–gradiente.

4.4 Teoría de Transporte–Gradiente (Teoría K)

La teoría de transporte–gradiente es mencionada también en la literatura como "teoría K" o "teoría de difusión"; esta última denominación es motivada por la analogía que se supone entre la difusión turbulenta de una substancia y su difusión molecular. El

método es un resultado del promedio de Reynolds de la ecuación para la concentración de la sustancia, y de la hipótesis de que los flujos turbulentos $\overline{u'_i c'}$ son proporcionales al gradiente de la concentración media, tal como se expuso en la sección 4.1 para un escalar pasivo ϕ cualquiera. La teoría K es por tanto afín a la teoría clásica para la difusión turbulenta de escalares, resumida en la ecuación (4.4), con la diferencia que al extender tal relación lineal entre el flujo turbulento de una propiedad y el gradiente de su media temporal al campo de la turbulencia atmosférica, ha sido usual considerar al coeficiente K como un vector, con lo cual se pretende incluir en el modelo la anisotropía de la difusión. Formalmente la anisotropía exige que K sea un tensor de orden 2 (véase la ecuación (2.39)), y es claro que si K es un vector no es posible escribir una ecuación que relacione el vector $\overline{u'_i c'}$ con el gradiente de concentración $\partial\bar{c}/\partial x_i$ en la forma (4.4). Por lo tanto la teoría K debe tomarse como un modelo que calcula la difusión turbulenta en las direcciones horizontales y vertical a partir de las componentes respectivas del gradiente de concentración mediante las ecuaciones independientes

$$\overline{u' c'} = -K_x \frac{\partial\bar{c}}{\partial x} \quad (4.41a)$$

$$\overline{v' c'} = -K_y \frac{\partial\bar{c}}{\partial y} \quad (4.41b)$$

$$\overline{w' c'} = -K_z \frac{\partial\bar{c}}{\partial z} \quad (4.41c)$$

donde K_x y K_y son las difusividades horizontales y K_z es la difusividad vertical. Estos tres parámetros no son entonces las componentes de un vector sino coeficientes de difusión escalares independientes, provenientes de la descomposición del modelo de sub-malla para $\overline{u'_i c'}$ en modelaciones separadas para las direcciones vertical y horizontal. Las razones que motivan esta separación no son siempre de índole física sino más bien aspectos prácticos de cálculo^[25]: en la mayoría de las modelaciones de mesoescala el espaciado horizontal de la malla es mucho mayor que el espaciado vertical, de modo que la diferencia en las escalas de los flujos que se consideran de sub-malla hace esperar modelos diferentes para describirlos. Además, para la capa límite atmosférica, es mucho más lo que se sabe sobre la forma funcional de los flujos turbulentos en dirección vertical, lo que ha llevado a un tratamiento diferente y más detallado para la difusión vertical, en comparación con las direcciones horizontales.

En rigor esta teoría es válida solamente si el tamaño en cierto punto de la nube de contaminante siendo dispersada es mucho mayor que la escala de longitud de la turbulencia en dicho punto, de modo que todas las escalas de turbulencia puedan tomar parte en el proceso. Si esta condición no se cumple los coeficientes de difusión no son solamente función de la posición dentro del campo de flujo, sino también función de la distribución de concentración. Para las dimensiones usuales de los dominios de solución en aplicaciones de dispersión en la capa límite atmosférica, en donde la escala máxima de turbulencia es del orden de 0,1 veces la altura de la capa, la condición se satisface^[28]. Por otra parte, se ha visto que a pesar de esta restricción teórica es posible efectuar cálculos útiles de concentración suponiendo que los K_i son sólo función de la posición, incluso con escalas espaciales menores que las de la turbulencia, particularmente en flujos complejos alrededor de obstáculos^[14].

Al introducir los modelos (4.41) en la ecuación para la concentración media (4.3), ésta puede escribirse como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \bar{c}) + \frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho} \bar{u} \bar{c}) + \frac{\partial}{\partial y}(\bar{\rho} \bar{v} \bar{c}) + \frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho} \bar{w} \bar{c}) = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\bar{\rho} K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\bar{\rho} K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{\rho} K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + S_c \end{aligned} \quad (4.42)$$

En este caso la difusividad molecular de masa podría despreciarse, o bien ser incluida sumándola a los coeficientes K_i .

La mayor parte de la investigación en torno a la teoría K en sí misma se ha dedicado a obtener soluciones para la ecuación (4.42), utilizando funciones dadas para las velocidades y los coeficientes de difusión. Las soluciones se han obtenido por métodos analíticos y numéricos. Soluciones del primer tipo pueden determinarse sólo para formas simples de las funciones de velocidad y difusividad, y para versiones a su vez simplificadas de la ecuación diferencial. Tal como en el caso de la teoría de similitud, el interés se ha puesto preferentemente en la dispersión vertical. Así, los casos más comúnmente tratados corresponden a la difusión vertical desde fuentes puntuales o lineales continuas sobre una superficie plana, con un perfil para la velocidad del viento invariante en la dirección del flujo. La ecuación se reduce entonces a

$$\bar{u}(z) \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (4.43)$$

Si se toma un perfil de velocidad uniforme $\bar{u}(z) = u_1$ promediado en dirección vertical y K_z como constante, la ecuación (4.43) se transforma en la conocida ecuación de difusión unidimensional transiente (donde la coordenada de tiempo es aquí x/u_1 , es decir el tiempo de transporte flujo abajo), para la cual se conoce un gran cantidad de soluciones analíticas. Un conjunto de condiciones de contorno típicas en problemas de dispersión atmosférica es el siguiente:

- $K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$ en $z = H$, (con H la altura de la capa límite atmosférica), representando una reflexión perfecta de la substancia en el contorno superior de la capa límite.
- $K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = v_d \bar{c}$ en $z = z_0$, representando la deposición sobre la superficie, con v_d la velocidad de deposición y z_0 un nivel de referencia dado próximo a la superficie. z_0 no es en este caso el parámetro de rugosidad sino una altura conveniente sobre el suelo, para separar la región donde tiene lugar la dispersión atmosférica de aquella inmediatamente sobre la superficie, donde ocurre transferencia entre los elementos que la cubren. Ya que $H \gg z_0$ se puede emplear la solución con $z_0 = 0$.
- La condición inicial es $\lim_{x \rightarrow 0} \bar{c} = \frac{Q}{u_1} \delta(z - h)$, representando una fuente puntual continua de intensidad Q a una altura h sobre el suelo (δ es la función delta de Dirac).

La solución de (4.43) sujeta a estas condiciones es^[9]

$$\bar{c}(x, z) = \frac{Q}{u_1} G(x, z, h) \quad (4.44)$$

siendo $G(x, z, h)$ la función de Green de la ecuación, y que corresponde al efecto producido a una distancia x y una altura z por una emisión unitaria continua a una altura h en $x = 0$:

$$G(x, z, h) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{K_z q_n^2 x}{u_1}\right) S_n(z, h) \quad (4.45)$$

donde

$$S_n(z, h) = \frac{2 \cos(q_n[H - h]) \cos(q_n[H - z])}{1 + \frac{\sin(2q_n H)}{2q_n H}} \quad (4.46)$$

y q_n son las raíces en orden ascendente de la ecuación $(q_n H) \tan(q_n H) = \frac{H v_d}{K_z}$

Cuando se incorpora el efecto de una capa superficial a través de la aproximación

$$\bar{u}(z) = \begin{cases} u_1 (z/z_1)^m & ; z_0 \leq z \leq z_1 \\ u_1 & ; z_1 < z \leq H \end{cases}$$

$$K_z(z) = \begin{cases} K_1 (z/z_1) & ; z_0 \leq z \leq z_1 \\ K_1 & ; z_1 < z \leq H \end{cases}$$

la solución es similar a la dada por las ecuaciones (4.44) y (4.45), excepto que $S_n(z, h)$ es ahora

$$S_n(z, h) = \begin{cases} a_n(h) W_0(\beta q_n z_1 (z/z_1)^{1/\beta}) & ; z_0 \leq z \leq z_1 \\ a_n(h) \cos(q_n [H - z]) & ; z_1 < z \leq H \end{cases} \quad (4.47)$$

con $\beta = 2/(1 + m)$ y $W_0(\theta)$ una función cilíndrica definida como

$$W_n(\theta) = A_n J_n(\theta) + Y_n(\theta) \quad (J_n \text{ e } Y_n \text{ son las funciones de Bessel}).$$

A_n y los valores propios q_n son obtenidos haciendo coincidir las soluciones en $z = z_1$, de donde los q_n son raíces de la ecuación

$$\frac{v_d (z_1/z_0)^{1/\beta} Y_0(\theta_1) + q_n K_1 Y_1(\theta_1)}{v_d (z_1/z_0)^{1/\beta} Y_0(\theta_1) + q_n K_1 J_1(\theta_1)} = \frac{Y_0(\theta_2) \sin(q_n [H - z_1]) + Y_1(\theta_2) \cos(q_n [H - z_1])}{J_0(\theta_2) \sin(q_n [H - z_1]) + J_1(\theta_2) \cos(q_n [H - z_1])} \quad (4.48)$$

donde $\theta_1 = \beta q_n z_1 (z_0/z_1)^{1/\beta}$ y $\theta_2 = \beta q_n z_1$. A_n está dado por el negativo del valor que toman los miembros de la ecuación (4.48), y los coeficientes $a_n(h)$ por

$$a_n(h) = \begin{cases} W_0(\beta q_n z_1 (h/z_1)^{1/\beta}) / (I_1 + I_2) & ; z_0 \leq h \leq z_1 \\ \cos(q_n [H - h]) / (I_1 + I_2) & ; z_1 < h \leq H \end{cases} \quad (4.49)$$

con
$$I_1 = \frac{1}{2} (H - z_1) \left(1 + \frac{\sin(2q_n [H - z_1])}{2q_n (H - z_1)} \right)$$

$$I_2 = \frac{1}{2} \beta z_1 \left[1 - \left(\frac{z_0}{z_1} \right)^{2/\beta} (W_0^2(\theta_1) + W_1^2(\theta_1)) \right]$$

Soluciones aún más complejas se han obtenido para aproximaciones más generales del perfil de difusividad (Fisher [9]), usando modelos de dos y tres capas, como también soluciones que incluyen una velocidad de filtración v_f en el contorno superior de la capa límite hacia la troposfera superior, de modo que la condición de contorno en $z = H$ es $K_z \partial \bar{c} / \partial z = -v_f \bar{c}$. De igual modo se han estudiado las soluciones para el caso tridimensional

$$\bar{u}(z) \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (4.50)$$

donde para la velocidad y las difusividades se adoptan funciones de potencia como las dadas anteriormente:

$$\bar{u}(z) = u_1(z/z_1)^n \quad ; \quad K_y(z) = K_{y1}(z/z_1)^p \quad ; \quad K_z(z) = K_{z1}(z/z_1)^q$$

Este tipo de funciones ha sido el más empleado en la teoría analítica de la difusión atmosférica, debido a que para funciones más complicadas el problema adquiere una dificultad inmanejable. Aún así, las expresiones (4.45) y siguientes muestran que incluso para una ecuación tan simplificada como la (4.43), la evaluación de las soluciones con condiciones de contorno usuales en la atmósfera resulta muy complicada y es necesario obtener numéricamente los valores propios q_n . Se ha visto que el perfil de velocidad puede ser bien aproximado por una función de este tipo, a la que se puede hacer seguir de cerca a la forma logarítmica sobre un rango amplio de alturas (de hecho las mediciones rara vez discriminan claramente en favor de uno de estos dos tipos de perfil). Sin embargo la selección de exponentes y constantes multiplicativas adecuados para las funciones de las difusividades constituye la principal dificultad para aplicar los resultados de la teoría analítica, puesto que se ha concluido que estos parámetros son en realidad funciones de x . La teoría estadística muestra, por ejemplo, que K_y es función de la distancia a la fuente, y sólo en la región lejana a ella deja de serlo. La teoría analítica de difusión es por consiguiente de uso limitado para el cálculo de concentraciones, y se ha empleado fundamentalmente para estudiar explícitamente la dependencia de la dispersión de algún parámetro o combinación de parámetros. Sorprendentemente una de las soluciones más simples de

(4.43), modificada mediante información empírica, se ha convertido en la base para la clase de modelos más empleados en el cálculo de concentraciones de contaminantes liberados a la atmósfera: los modelos gaussianos. Las características fundamentales de éstos se describen en la siguiente sección. De hecho, tanto las soluciones dadas por (4.45) como por (4.47) se reducen a la ecuación básica (4.64) de la modelación gaussiana, al suponer una reflexión perfecta de la substancia en el suelo ($v_d = 0$) y una distribución de Gauss en la dirección y .

Soluciones numéricas de la ecuación (4.42) han permitido utilizar perfiles más realistas para las difusividades turbulentas. Generalmente se toma $K_z = K_h$, con K_h la difusividad térmica turbulenta predicha por la teoría de similaridad. Las funciones para K_m y K_h establecidas por esta teoría son válidas sólo en la capa superficial, y es menos lo que se sabe sobre los perfiles de K_i en el resto de la capa límite debido a la dificultad para realizar mediciones de flujos turbulentos y gradientes. Algunos perfiles derivados para K_m sugieren que éste se incrementa primero linealmente con la altura, alcanza un valor máximo en $z \approx H/3$ y luego decrece gradualmente hasta cero en el contorno superior de la capa límite atmosférica^[1]. Se cree que el valor máximo depende de u_* , H y la longitud de Monin–Obukhov L . Por consideraciones de similaridad se han obtenido perfiles para K_m , en condiciones neutra y estable, de la forma

$$\frac{K_m}{H u_*} = K_*(z/H, H/L)$$

en los cuales la función de similaridad K_* debe ser consistente con la ecuación (4.32a) en la capa superficial, anularse cuando $z/H \rightarrow 1$, tener un valor máximo en algún punto sobre la capa superficial y disminuir monótonamente al aumentar el grado de estabilidad (H/L).

Estas fórmulas, que dan los coeficientes de difusión como funciones de la distancia sobre el suelo se denominan *coeficientes de perfil*. Un método alternativo es el de *coeficientes de difusión locales*, los cuales son definidos sólo en base a gradientes locales. En este último caso algunos investigadores han preferido expresar K_i en términos de una longitud de mezcla l , tal que

$$K_i \propto l^2 \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 \right]^{1/2}$$

Por ejemplo, la fórmula sugerida por Blackadar para estratificación estable es^[25]

$$K_m = K_h = 1,1 \left(1 - \frac{Ri}{Ri_c} \right) l^2 \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 \right]^{1/2} ; Ri \leq Ri_c \quad (4.51)$$

con Ri_c el número de Richardson crítico. Para $Ri > Ri_c$ se tiene $K_m = K_h = 0$. La longitud de mezcla es dada por

$$l = \min(\kappa z, 70[\text{m}]) \quad (4.52)$$

La constante de von Kármán κ se toma aquí como 0,35.

En una modelación numérica que resuelve junto con la ecuación de concentración las ecuaciones del campo del flujo (velocidades y presión), Iványi y Mersich [14] aplican también el concepto de longitud de mezcla para condiciones inestables mediante

$$K_m = 5,0 (-Ri_b)^{1/2} l^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right| \quad (4.53a)$$

$$K_h = 7,9 (-Ri_b)^{1/2} l^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right| \quad (4.53b)$$

En este caso se utiliza un valor promedio del gradiente $\partial \bar{u} / \partial z$ en la capa límite, y el número de Richardson es evaluado con un valor global sobre la capa superficial:

$$Ri_b = \frac{g (T_h - T_s) h}{T_0 u_h^2} \quad (4.54)$$

donde T_0 es la temperatura media cerca de la superficie, T_s la temperatura del suelo y h la altura de la capa superficial. T_h y u_h son la temperatura y velocidad evaluadas en $z = h$. Para la longitud de mezcla toman la función

$$l = \frac{\kappa z}{1 + \frac{\kappa z}{H/10}} \quad (4.55)$$

Las anteriores son sólo algunas de las numerosas fórmulas que han sido propuestas para calcular las difusividades turbulentas. Existe en la literatura una enorme cantidad de funciones propuestas para los perfiles de K_i , y las discrepancias con resultados experimentales son en muchos casos significativos. Esta proliferación

refleja las dificultades para determinar funciones algebraicas que describan adecuadamente los coeficientes de difusión sobre toda la capa límite atmosférica, aún suponiendo que el campo de flujo es perfectamente uniforme en las direcciones horizontales, y evidentemente no cabe esperar que tales funciones sean aplicables a patrones de flujo más complicados. La obtención de K_i debe provenir por tanto de modelos de turbulencia más elaborados.

4.5 Modelos Gaussianos

4.5.1 Descripción General

Los modelos de plumas gaussianas se emplean profusamente en el estudio de la contaminación producida por fuentes puntuales y lineales, y son la base para casi todos los programas computacionales desarrollados por la Agencia de Protección Ambiental (EPA) de Estados Unidos para la modelación de estos fenómenos. El objetivo de estas modelaciones es proporcionar procedimientos que permitan el cálculo de concentraciones con una exactitud suficiente para estudios de impacto ambiental con fines regulatorios. Por lo tanto el método no pretende dar una descripción precisa del proceso de dispersión, y es esencialmente un modelo empírico, fundado en simplificaciones drásticas de la ecuación general (4.42).

El punto de partida es la ecuación de difusión pura, sin los términos de convección, donde además se supone que las difusividades K_x , K_y y K_z son constantes, por lo que la ecuación se reduce a

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = K_x \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} \quad (4.56)$$

Se obtiene luego la solución de esta ecuación para la difusión en un medio infinito de una cierta cantidad m de sustancia liberada instantáneamente en un punto. Si se toman para este punto las coordenadas $x = 0$, $y = 0$, $z = h$, la condición inicial puede expresarse como

$$\bar{c}(x, y, z) = m \delta(x) \delta(y) \delta(z - h) \quad ; \quad \text{en } t = 0 \quad (4.57)$$

La ecuación (4.56) se puede resolver por lo métodos tradicionales (separación de

variables, transformadas de Laplace o Fourier, etc.) En este caso el desarrollo se puede abreviar aprovechando el hecho de que la condición inicial (4.57) es el producto de tres funciones en sólo una coordenada, de modo que la solución de (4.56) se puede obtener como el producto de las soluciones de tres ecuaciones unidimensionales para cada dirección:

$$\bar{c}(x, y, z, t) = \bar{c}_1(x, t) \bar{c}_2(y, t) \bar{c}_3(z, t)$$

donde

$$\frac{\partial \bar{c}_1}{\partial t} = K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_1}{\partial x^2}, \text{ con } \bar{c}_1(x, t) = m^{1/3} \delta(x) \quad (4.58a)$$

$$\frac{\partial \bar{c}_2}{\partial t} = K_y \frac{\partial^2 \bar{c}_2}{\partial y^2}, \text{ con } \bar{c}_2(y, t) = m^{1/3} \delta(y) \quad (4.58b)$$

$$\frac{\partial \bar{c}_3}{\partial t} = K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_3}{\partial z^2}, \text{ con } \bar{c}_3(z, t) = m^{1/3} \delta(z - h) \quad (4.58c)$$

La solución de la ecuación de difusión unidimensional como la (4.58a), en un medio infinito con una distribución inicial $\bar{c}_1(x, 0) = f(x)$ resulta ser

$$\bar{c}_1(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi K_x t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x') \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{4 K_x t}\right] dx' \quad (4.59)$$

y para $f(x) = m^{1/3} \delta(x)$ se tiene

$$\bar{c}_1(x, t) = \frac{m^{1/3}}{2\sqrt{\pi K_x t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4 K_x t}\right) \quad (4.60)$$

Soluciones semejantes se obtienen para \bar{c}_2 y \bar{c}_3 de modo que la solución de (4.56) es

$$\bar{c}(x, y, z, t) = \frac{m}{8(\pi t)^{3/2} \sqrt{K_x K_y K_z}} \exp\left[-\left(\frac{x^2}{4 K_x t} + \frac{y^2}{4 K_y t} + \frac{(z-h)^2}{4 K_z t}\right)\right] \quad (4.61)$$

que se puede escribir también como una función de Gauss en tres dimensiones

$$\bar{c}(x, y, z, t) = \frac{m}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right)\right] \quad (4.62)$$

siendo $\sigma_x = (2 K_x t)^{1/2}$, $\sigma_y = (2 K_y t)^{1/2}$ y $\sigma_z = (2 K_z t)^{1/2}$ las desviaciones standard, que cuantifican la expansión, a medida que el tiempo transcurre, de la nube de contaminante producida por la emisión instantánea de la masa m . Estos parámetros son designados como coeficientes de dispersión.

Si ahora se supone que existe una velocidad media de viento, \bar{u} , en la dirección x , constante en todo el medio, la nube será transportada en la dirección del flujo, mientras simultáneamente se expande, y la ecuación (4.62) sigue siendo válida para un sistema de coordenadas que se mueva también con velocidad \bar{u} en dirección x . Para representar una emisión continua de substancia se puede considerar la superposición de estas nubes, dispuestas con sus centros a lo largo de una eje paralelo a x , conformando una pluma continua en estado estacionario. La configuración es entonces una distribución de fuentes puntuales instantáneas a lo largo del eje de la pluma, para cada una de las cuales se tendrá una ecuación similar a (4.62), con la coordenada x reemplazada por $x - \bar{u}t$ debido a la traslación flujo abajo, y donde los coeficientes de dispersión serán función de la distancia al punto de emisión $(0, 0, h)$ (ya que para cada una de estas nubes el tiempo de difusión transcurrido será igual al que le tomó en llegar hasta la posición donde se sitúa a lo largo de pluma). Si Q es el flujo de masa por unidad de tiempo que emite la fuente, el cociente Q/\bar{u} es una estimación de la masa depositada por la fuente sobre la columna de aire que fluye sobre ella. Así, para cada fuente puntual la masa m asociada será $Q dx/\bar{u}$, y la integración en x conduce a

$$\bar{c}(x, y, z) = \frac{Q}{2 \pi \bar{u} \sigma_y \sigma_z} \exp \left[- \left(\frac{y^2}{2 \sigma_y^2} + \frac{(z - h)^2}{2 \sigma_z^2} \right) \right] \quad (4.63)$$

donde la dependencia de la coordenada x se da a través de los coeficientes de dispersión σ_y y σ_z , los cuales, además de ser función de la distancia x a la fuente, dependen del grado de estabilidad atmosférica. Estas funciones se establecen empíricamente, como se describe más adelante, de modo que a pesar de la derivación a partir de la ecuación (4.56), la relación (4.63) se convierte en gran medida en una ecuación empírica, pues las funciones prescritas para σ_y y σ_z no son en general compatibles con la suposición inicial de difusividades constantes empleada para resolver (4.56).

La ecuación (4.63) fue deducida para una fuente emitiendo en el punto $(0, 0, h)$ hacia un medio infinito, por lo que debe ser modificada para tomar en cuenta la

interacción de la pluma con el suelo, como ocurre en el caso de la chimenea que se ilustra en la figura 4.1. La condición de contorno usualmente adoptada por los modelos gaussianos es suponer una reflexión perfecta de la substancia en el suelo, de manera que $\partial \bar{c} / \partial z = 0$ en $z = 0$. La solución para este nuevo caso se puede obtener fácilmente a partir de (4.63) efectuando la superposición de esta solución con la que se obtendría para una fuente imagen de la anterior, situada en $(0, 0, -h)$. La distribución simétrica de las fuentes implica que en $z = 0$ se cumple que $\partial \bar{c} / \partial z = 0$ como se quería. Por lo tanto, la ecuación de dispersión gaussiana sin limite para $z > 0$ es

$$\bar{c}(x, y, z) = \frac{Q}{2 \pi \bar{u} \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2 \sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{(z-h)^2}{2 \sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h)^2}{2 \sigma_z^2}\right] \right\} \quad (4.64)$$

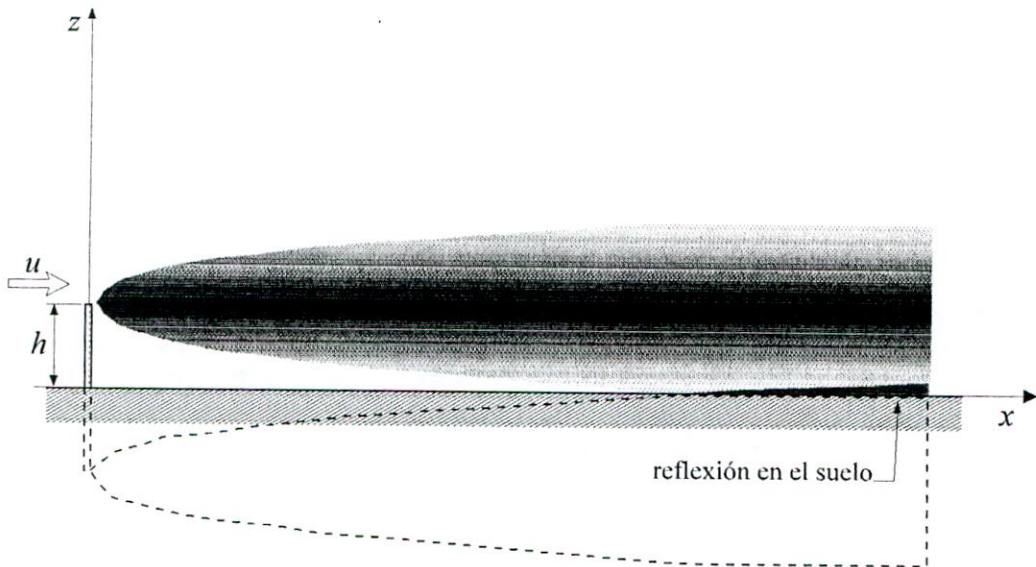


Figura 4.1 Reflexión en el suelo del material de una pluma, simulada mediante una fuente imagen.

No siempre es cierta esta ausencia de límite para la dispersión hacia arriba debido a que una capa de inversión térmica elevada inhibe los desplazamientos verticales de aire y puede actuar como una barrera para la difusión de polutantes. La suposición usual es que esta capa refleja la substancia tal como lo hace el suelo, de modo que a la altura $z = L$ a la que se sitúa esta capa se tiene también que $\partial \bar{c} / \partial z = 0$ (esta situación se muestra esquemáticamente en la figura 4.2). Con la fuente ubicada entre dos superficies reflectantes será necesario superponer las soluciones de infinitas

imágenes, tanto bajo el suelo como sobre la capa de inversión, resultando

$$\bar{c}(x, y, z) = \frac{Q}{2 \pi \bar{u} \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2 \sigma_y^2}\right) \times \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \exp\left[-\frac{(z - h + 2nL)^2}{2 \sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z + h + 2nL)^2}{2 \sigma_z^2}\right] \right\} \quad (4.65)$$

En todas estas ecuaciones h representa la altura sobre el nivel del suelo a la cual la sustancia es liberada a la atmósfera. En el caso típico de una chimenea industrial es preciso tomar en cuenta la elevación inicial de la pluma debido a la flotación de los gases y al momentum vertical con el que éstos salen de la chimenea. Generalmente el momentum vertical de la pluma disminuye rápidamente debido a la interacción con el aire circundante fluyendo en dirección horizontal, sin embargo el efecto de la flotación persiste durante un tiempo suficiente para producir una elevación considerable de la pluma sobre el nivel de descarga de la chimenea. Esta fase inicial del proceso es tratada de forma simplificada suponiendo que la dispersión comienza desde una altura efectiva h_e , determinada sumando a la altura real de la chimenea (h) la elevación de la pluma (Δh) sobre la descarga de aquélla. Existen numerosas fórmulas para calcular Δh , muchas de las cuales dan resultados discrepantes entre sí (incluso hasta en un orden de magnitud) o con valores observados. De éstas, las que han mostrado ser más precisas son las fórmulas de Briggs, utilizadas por los programas computacionales de la EPA^[10].

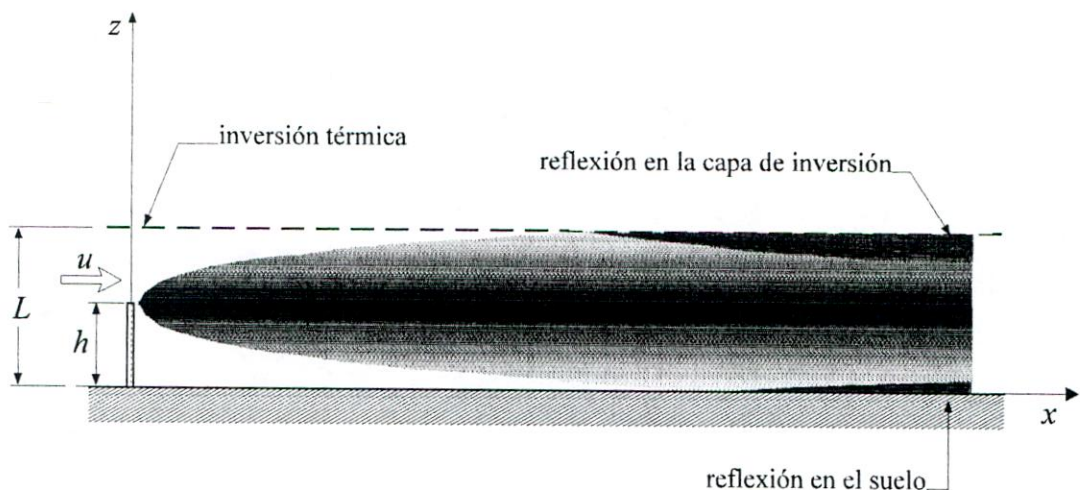


Figura 4.2 Pluma atrapada entre el suelo y una capa de inversión térmica.

Para condiciones atmosféricas inestables o neutra el modelo de Briggs establece que la elevación de la pluma, en función de la distancia x flujo abajo de la fuente se puede calcular como

$$\Delta h = 1,6 \frac{F^{1/3}}{\bar{u}} [\min(x, 3.5x^*)]^{2/3} \quad (4.66)$$

donde F es el llamado flujo de flotación, \bar{u} la velocidad media del viento a la altura de la chimenea, y $3,5x^*$ es la distancia aproximada a la cual la pluma alcanza su nivel definitivo. F es calculado mediante la velocidad y la temperatura de los gases a la salida de la chimenea (w_g y T_g respectivamente), el diámetro de la chimenea (d), y la temperatura atmosférica T_a :

$$F = g \frac{w_s d^2}{4 T_g} (T_g - T_a) \quad (4.67)$$

mientras que x^* está dado por

$$x^* = \begin{cases} 34 F^{2/5} & ; F > 55 [\text{m}^4 \text{s}^{-3}] \\ 14 F^{5/8} & ; F \leq 55 [\text{m}^4 \text{s}^{-3}] \end{cases} \quad (4.68)$$

Para estratificación estable se calcula

$$\Delta h = \begin{cases} 1,6 (F^{1/3} / \bar{u}) x^{2/3} & ; x < 2,07 \bar{u} s^{-1/2} \\ 2,6 [F / (\bar{u} s)]^{1/3} & ; x \geq 2,07 \bar{u} s^{-1/2} \end{cases} \quad (4.69)$$

donde s es un parámetro de estabilidad basado en el gradiente vertical de la temperatura potencial:

$$s = \frac{g}{T_a} \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (4.70)$$

Adicionalmente, para bajas velocidades de viento ($\bar{u} < 1,5 [\text{m/s}]$) la elevación de la pluma es calculada como

$$\Delta h = 5 F^{1/4} s^{-3/8} \quad (4.71)$$

tomándose finalmente el menor entre los valores resultantes de (4.69) y (4.71).

4.5.2 Coeficientes de Dispersión

En lo que concierne a los coeficientes de dispersión σ_y y σ_z , se han hecho muchos esfuerzos por desarrollar métodos simples y precisos para estimar estos parámetros. Uno de los métodos más utilizados es el conocido como las curvas de Pasquill–Gifford. Estos gráficos de σ_y y σ_z como función de la distancia flujo abajo de la fuente se reproducen en la figura 4.3. La dependencia del grado de estabilidad atmosférica se incluye discretizando el rango continuo de esta variable (medida, por ejemplo, por el número de Richardson) en una escala cualitativa de seis categorías, designadas desde la A a la F de acuerdo a la siguiente equivalencia:

- A: muy inestable
- B: moderadamente inestable
- C: ligeramente inestable
- D: neutra
- E: ligeramente estable
- F: estable

Para cada una de estas clases de estabilidad hay una curva en los gráficos de Pasquill–Gifford. La selección de una categoría en particular se efectúa generalmente mediante un procedimiento introducido por Turner (u otros similares) basado en las condiciones meteorológicas, el que se resume en la tabla 4.1. En esta tabla la velocidad del viento corresponde a la medida a 10 [m] sobre el suelo, y la nubosidad es la fracción del cielo cubierta por las nubes. El nivel de insolación se determina mediante el ángulo de elevación del sol sobre el horizonte (α) y la nubosidad (por ejemplo, insolación fuerte equivale a un día despejado con $\alpha > 60^\circ$; insolación moderada equivale a $\alpha > 60^\circ$ y nubosidad parcial o cielo despejado y $35^\circ < \alpha < 60^\circ$; insolación leve se tiene para cielo despejado y $\alpha < 35^\circ$ o cuando el cielo está nublado). En los casos donde aparecen dos clases de estabilidad se deben promediar los valores de σ_y , σ_z obtenidos con cada una. Además, si el cielo está cubierto se debe tomar la clase D, tanto de día como de noche, independientemente de la velocidad del viento.

Las curvas de Pasquill–Gifford fueron desarrolladas durante la década de 1960 y han estado en uso desde entonces, siendo incluidas en los programas de la EPA mediante funciones que se ajustan adecuadamente a ellas. No obstante, se debe señalar que su aplicación en situaciones que difieran apreciablemente de las condiciones en las que fueron deducidas puede significar errores importantes en la estimación de los

coeficientes de dispersión. La mayoría de los experimentos que se emplearon para determinar estas curvas consistieron en emisiones continuas sin flotación, a nivel del suelo o en la parte inferior de la capa límite. Las superficies eran generalmente de baja rugosidad, y muy pocas mediciones se hicieron a distancias superiores a 1 [km] de la fuente (como se aprecia en la figura 4.3, los datos fueron extrapolados para extender las curvas a valores de x mayores de 1 [km]). En algunos casos σ_z no fue medido directamente sino que fue inferido de mediciones de la distribución a nivel del suelo en dirección transversal al viento. Por consiguiente el esquema de Pasquill–Gifford debería aplicarse específicamente en las siguientes condiciones^[11]: terreno plano con poca vegetación, emisiones a nivel del suelo o cerca de él, variables promediadas sobre intervalos de 3 a 10 minutos, viento estacionario y distancias flujo abajo no mayores de 1 [km].

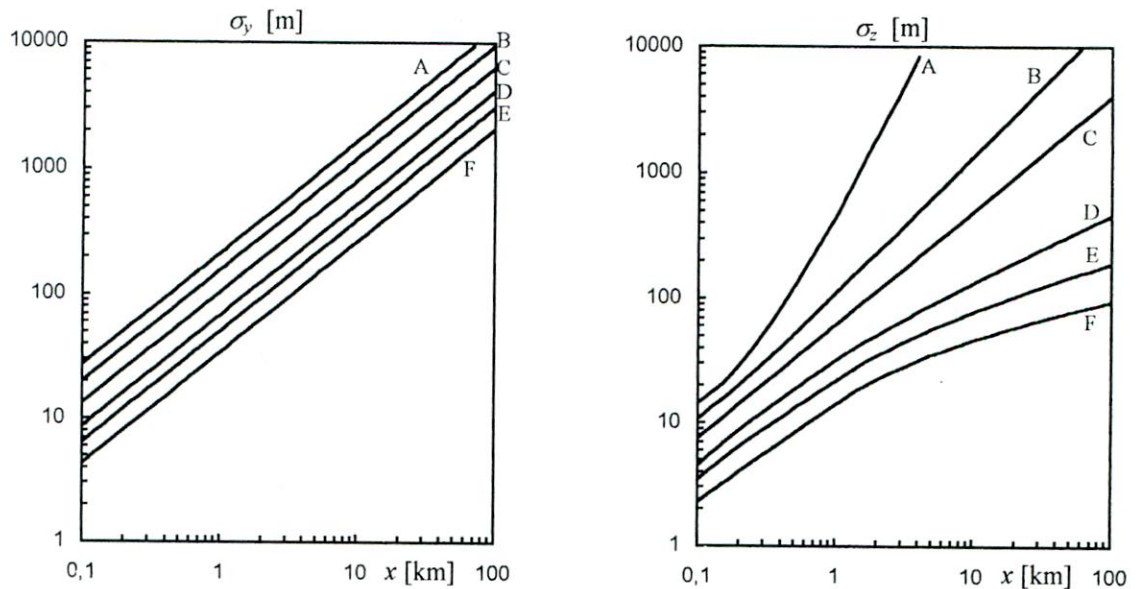


Figura 4.3 Curvas de Pasquill–Gifford para los coeficientes de dispersión

Tabla 4.1 Relación de clases de estabilidad con las condiciones meteorológicas

velocidad del viento [m/s]	Insolación diurna			Nubosidad nocturna	
	Fuerte	Moderada	Leve	Nuboso ($\geq 4/8$)	Despejado ($\leq 3/8$)
< 2	A	A – B	B	E	F
2 – 3	A – B	B	C	E	F
3 – 5	B	B – C	C	D	E
5 – 6	C	C – D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

En la mayor parte de los problemas en los que se emplean los modelos gaussianos las condiciones indicadas no se satisfacen completamente, y es de esperar desviaciones significativas a menos que se añadan factores de corrección. Para superficies urbanas, algunos experimentos han indicado que la clase de estabilidad debería ser desplazada en un grado hacia el nivel superior de inestabilidad con respecto a la determinada de la tabla 4.1. Para considerar un tiempo T de promedio diferente al original, se ha propuesto, para ambos coeficientes de dispersión, el factor correctivo $(T/10)^{0,2}$, con T en minutos. Para fuentes a gran altura o con flotación considerable, existen curvas suplementarias para σ_y y σ_z , obtenidas por observaciones de la difusión desde fuentes a alturas sobre la capa superficial (las curvas de Brookhaven o las de la TVA). Briggs ha derivado funciones analíticas que se ajustan a las curvas de Pasquill–Gifford en la cercanía de la fuente, y a las curvas Brookhaven y TVA para grandes distancias. Estas funciones son aplicables para campo abierto, y han sido adoptadas como una alternativa al esquema de Pasquill–Gifford por algunos modelos de la EPA. Pueden resumirse en la forma general

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_y \text{ [m]} \\ \sigma_z \text{ [m]} \end{array} \right\} = ax(1 + bx)^c \quad ; \quad 10^2 < x < 10^4 \text{ [m]} \quad (4.72)$$

donde las constantes a , b y c dependen de la clase de estabilidad como se lista a continuación.

Tabla 4.2 Constantes de las funciones de Briggs

clase de estabilidad		A	B	C	D	E	F
σ_y	a	0,22	0,16	0,11	0,08	0,06	0,04
	b	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
	c	-1/2	-1/2	-1/2	-1/2	-1/2	-1/2
σ_z	a	0,20	0,12	0,08	0,06	0,03	0,016
	b	0	0	0,0002	0,0015	0,0003	0,0003
	c	0	0	1/2	-1/2	-1	-1

Más que aplicar factores de corrección a las curvas originales de Pasquill–Gifford, algunos especialistas han preferido buscar nuevas formas de estimar eficientemente los coeficientes de dispersión, incorporando información adicional

sobre la turbulencia. Por ejemplo, Pasquill ha recomendado que la dispersión transversal σ_y sea calculada a partir de la desviación standard de la dirección del viento, σ_θ , y la distancia flujo abajo^{[11], [28]} mediante

$$\sigma_y = \sigma_\theta x f(x) \quad (4.73)$$

donde $f(x)$ está dada por:

x [km]	0	0,1	0,2	0,4	1	2	4	10	> 10
$f(x)$	1,0	0,8	0,7	0,65	0,6	0,5	0,4	0,33	$0,33 \sqrt{10/x}$

Otras formas sugeridas para σ_y y σ_z involucran parámetros tales como la desviación standard de la velocidad transversal (σ_v), el tiempo de transporte, la escala de tiempo lagrangiana y la velocidad de viento geostrófica. El comportamiento de estas funciones es estudiado por Smith y Blackall [30]. Muchos de estos modelos son tentativos, y surgen además dificultades adicionales debido a que en estos casos es necesario determinar nuevos parámetros de la turbulencia: σ_θ y σ_v . Para este último se han sugerido fórmulas que permiten estimarlo en función de la velocidad de fricción y la longitud de Monin–Obukhov, pero resulta difícil saber si estos procedimientos representan una mejoría concreta en la estimación de los coeficientes de dispersión comparados con los métodos tradicionales ya descritos. Por esta razón algunos autores de modelos gaussianos y la EPA consideran el empleo de las curvas de Pasquill–Gifford y las fórmulas de Briggs como métodos "por defecto", pero recomiendan que para modelaciones que requieran mayor precisión, σ_y y σ_z se estimen directamente a partir de datos medidos en terreno para el problema particular tratado. Estos datos son las desviaciones standard de la dirección del viento en dirección horizontal (para σ_y) y en dirección vertical (para σ_z), en un punto próximo a la salida de la chimenea. Otros refinamientos al cálculo de σ_y y σ_z incluyen la contribución a la dispersión, tanto horizontal como vertical, debido al ingreso de aire a la pluma, inducido por la flotación, y el incremento de la dispersión horizontal producido por cambios en la dirección del viento dentro del rango de alturas abarcado por la pluma^[31].

4.5.3 Difusión Sobre Terreno Irregular

Una de las limitaciones más serias de los modelos gaussianos es el hecho de que las ecuaciones básicas como (4.64) y (4.65) y las relaciones empíricas para los

coeficientes de dispersión han sido derivadas para terrenos planos y horizontalmente homogéneos, donde se ha supuesto una distribución de viento uniforme. La aplicación del método en zonas de topografía complicada, con colinas u otros obstáculos que puedan alterar significativamente aquel campo de flujo simplificado, está sujeta por tanto a un margen de error bastante mayor. Esta dificultad ha sido afrontada introduciendo correcciones que consideren la distorsión de la trayectoria seguida por la pluma a medida que se aproxima al terreno que se interpone a su paso. Los primeros modelos gaussianos para terreno irregular suponían que durante condiciones inestables o neutras la pluma era deflectada sobre el terreno en una cantidad igual a su altura efectiva original, pero no lo era en absoluto en condiciones estables. En un modelo de este tipo, cuando la pluma impacta sobre la ladera de un cerro, en condiciones estables, la concentración en el punto de impacto resulta igual a la concentración en la pluma calculada como si el cerro no estuviese en ese lugar, dando origen a concentraciones sobrestimadas en dichas zonas. Modelos posteriormente aplicados por la EPA eran similares, pero no permitían a la pluma aproximarse más allá de una distancia mínima a la ladera, antes de ser deflectada alrededor del obstáculo. Una descripción más plausible^[11] se obtuvo suponiendo que durante condiciones inestable o neutras la pluma se elevaba por encima del obstáculo una distancia tal que la altura de su eje central sobre el obstáculo era igual a la mitad de la altura del obstáculo sobre el eje original de la pluma. Si la altura del obstáculo era menor que la altura efectiva de la pluma, la cantidad de deflexión correspondía a la mitad de la altura de aquél. En condiciones estables se suponía que la deflexión ocurría alrededor del obstáculo en lugar de sobre él.

Los modelos actualmente empleados por la EPA constituyen un perfeccionamiento de la última descripción en el párrafo anterior, especialmente para el comportamiento en condiciones estables. En esta situación, diversas teorías y observaciones muestran que por debajo de la cima de una colina el flujo tiende a moverse en planos horizontales debido a la fuerte estratificación. En consecuencia, a cada nivel el aire se mueve alrededor de la colina como si ella fuese un cilindro vertical infinito con una sección transversal igual a la de la colina a esa altura. Sin embargo, este patrón de flujo se interrumpe sobre la cima, en donde resultaría una distribución de presión singular si el flujo se moviese alrededor de las líneas de contorno del terreno. Esto significa que existe una región en la parte superior de la colina donde el flujo sobre la superficie se eleva por sobre la cima en lugar de rodear los contornos. El espesor vertical de esta región es^[15] aproximadamente \bar{u}_0/N , donde \bar{u}_0 es la velocidad

del viento (supuesta uniforme) flujo arriba de la colina, y N depende de la temperatura media \bar{T}_0 , el gradiente de temperatura potencial y la aceleración de gravedad, a través de

$$N = \left(\frac{g}{\bar{T}_0} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right)^{1/2} \quad (4.74)$$

(N es conocida como la frecuencia de Brunt-Väisälä, y corresponde a la mayor frecuencia a la cual pueden existir ondas internas de gravedad). Por lo tanto, si h_c es la altura máxima de la colina (sobre el nivel de la base de una chimenea que actúa como origen de las coordenadas), la pluma que esta chimenea emita pasará por sobre la colina en lugar de impactar sobre ella, aún en condiciones estables, cuando la altura efectiva de la pluma sea mayor que la altura crítica $h_{cr} = h_c - \bar{u}_0/N$. Así, esta altura crítica es empleada por modelos gaussianos para separar las dos regiones de comportamiento. En condiciones estables, cuando la altura de la pluma es menor o igual que la altura crítica (que se calcula con la velocidad del viento a la altura de la salida de la chimenea) se considera que impacta directamente sobre la ladera, y si es mayor, la altura local de la pluma sobre el terreno, h_a , es ajustada mediante

$$h_a = \begin{cases} c(h_p - h_{cr}) & ; h_p \leq h_t \\ h_p - h_{cr} - (1 - c)(h_t - h_{cr}) & ; h_p > h_t \end{cases} \quad (4.75)$$

donde h_p es la altura de la pluma y h_t la altura local del terreno. c es una constante que determina la cuantía de la corrección en la trayectoria de la pluma, y puede variar desde $c = 0$ para una pluma que se mantiene a nivel constante (respecto al origen), hasta $c = 1$ en el caso de una pluma que reproduzca exactamente la forma del terreno, manteniéndose siempre a una altura constante sobre él. Este parámetro depende de la clase de estabilidad y de la forma del terreno, por lo que idealmente debería determinarse sobre la base de información disponible para el área en particular sobre la que se aplica el modelo. Generalmente no se cuenta con tal información, y se supone un valor de 0,5 para todas las clases de estabilidad.

Adicionalmente, el algoritmo convencional de los modelos gaussianos, que utiliza fuentes imágenes bajo la superficie para simular la reflexión del polutante en el suelo, debe modificarse al ser usado sobre terreno irregular, ya que en este caso dicho procedimiento puede sobrestimar las concentraciones a nivel del suelo, e incluso

producir distribuciones no factibles físicamente. Tal es el caso de una pluma que impacta sobre la ladera de una colina, donde el método de imágenes daría lugar a una distribución tal que en la cercanía al punto de impacto la concentración a lo largo del eje de la pluma aumentaría en la dirección flujo abajo, en contradicción con la segunda ley de la termodinámica. Para evitar esta situación, las concentraciones calculadas en esta zona son reajustadas por un factor de corrección, obtenido por exploración de los valores generados por el método de imágenes para la concentración integrada en dirección transversal al eje de la pluma, en diferentes alturas y distancias al punto de impacto o de máxima aproximación al terreno. El factor de corrección se determina entonces de modo que una vez alcanzada una concentración integrada mínima, las concentraciones flujo abajo no puedan aumentar sobre este valor^[31].

El flujo en torno a una colina tal como se describió previamente no se mantiene en el lado de sotavento de aquélla, puesto que allí el flujo se separa dando origen a una zona de recirculación y a vórtices que se desprenden, estableciéndose un patrón de flujo complejo, altamente turbulento, con flujos secundarios determinados fuertemente por las características locales del terreno. Estos efectos persisten flujo abajo de la colina (u otro obstáculo) sobre una distancia considerable, en algunos casos de hasta 30 veces su altura, y debido a su complejidad y dependencia de la topografía en particular analizada, no son considerados por los modelos de plumas gaussianas sobre terreno irregular. Por consiguiente, un modelo de este tipo se emplea preferentemente para el cálculo de concentraciones en las zonas a barlovento de los accidentes del terreno (es decir, donde la pendiente de éste sea siempre creciente al alejarse de la fuente), y los resultados obtenidos en las zonas a sotavento, más allá de las cimas de las colinas, se consideran menos confiables. De igual modo la modelación gaussiana debe emplearse con cautela si la fuente está situada a sotavento de un obstáculo importante al flujo de aire, puesto en esa región los efectos anteriormente mencionados generan un campo de turbulencia muy diferente de aquel sobre el cual se basan las estimaciones de σ_y y σ_z . Hunt *et al.* [13] mencionan algunos casos donde se ha observado esta influencia, por ejemplo, el de una chimenea con una altura efectiva de 400 [m] situada a 6 [km] a sotavento de un cordón transversal de cerros de 500 [m] de altura, para la cual, durante periodos cortos, las concentraciones a nivel del suelo eran incrementadas por un factor 5 y la pluma abatida sobre el suelo debido a grandes vórtices desprendidos desde los cerros.

Además, no sólo en estas circunstancias sino en general, al utilizar un modelo gaussiano sobre terreno irregular, se deberían emplear coeficientes de dispersión

diferentes a los de Pasquill–Gifford o de Briggs, convencionalmente usados. A partir de varios experimentos^[11] se ha predicho que los coeficientes de dispersión deberían ser de 5 a 10 veces mayores que los de Pasquill–Gifford, si el terreno es muy irregular, y de 2 a 3 veces mayores si el desnivel es moderado. No obstante, se precisa todavía mucha más investigación para refinar estas predicciones.

4.5.4 Modelación de Fuentes Lineales

Para determinar la concentración de contaminantes, debido a las emisiones de los vehículos, en las inmediaciones de carreteras o calles con tráfico intenso, se suelen tratar éstas como si fuesen fuentes lineales uniformes, con una tasa de emisión promedio Q_L por unidad de longitud, estimada en base a la intensidad del flujo vehicular, y a los factores de emisión para los diversos tipos de vehículos que circulan. Los modelos gaussianos se aplican también en estos casos, integrando la ecuación para una fuente puntual a lo largo de la carretera. El esquema más simple en este sentido es como el que se muestra en la figura 4.4. El camino se divide en tramos rectos, y cada elemento de longitud dy a lo largo de él, actúa como una fuente puntual a nivel del suelo (o a una altura h si se trata de una vía elevada). La contribución de esta fuente puntual a la concentración en puntos situados flujo abajo de la carretera está dada por la ecuación (4.64), donde la razón de emisión Q es ahora $Q_L dy$. La influencia total del tramo AB se obtiene entonces por integración en toda su longitud. Este tramo es perpendicular al viento, de modo que al integrar, x permanece constante y por lo tanto σ_y y σ_z también, resultando

$$c_{AB}(x, y, z) = \frac{F}{2\pi\sigma_y} \int_{y_1}^{y_2} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) dy = \frac{F}{2\sqrt{2}\pi} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{y_2}{\sqrt{2}\sigma_y}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y_1}{\sqrt{2}\sigma_y}\right) \right] \quad (4.76)$$

con

$$F = \frac{Q_L}{\bar{u}\sigma_z} \left\{ \exp\left[-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\} \quad (\text{para el caso de la figura, } h=0).$$

El tramo siguiente BC es oblicuo al viento, por lo que se debe integrar numéricamente empleando funciones en x para σ_y y σ_z , o bien la misma solución (4.76)

se puede emplear de forma aproximada, dividiendo el tramo en un número suficiente de tramos equivalentes perpendiculares al viento, como se indica en la figura. En cualquier caso, la concentración total en un punto dado se obtiene sumando las concentraciones producidas por cada tramo del camino. Evidentemente, todas las limitaciones señaladas para los modelos gaussianos de fuentes puntuales rigen también para estas fuentes lineales, en especial las que se relacionan con la no uniformidad de la superficie y del campo de flujo. Pueden obtenerse resultados aceptables para una carretera en campo abierto, o en zonas urbanas con edificaciones de baja altura (si lo que interesa en este caso es la concentración en puntos distantes de la calle), pero en calles rodeadas por edificaciones elevadas e irregulares, el método puede resultar inaplicable incluso para puntos distantes, debido a los campos de flujo y turbulencia altamente perturbados, como se describió en la sección anterior.

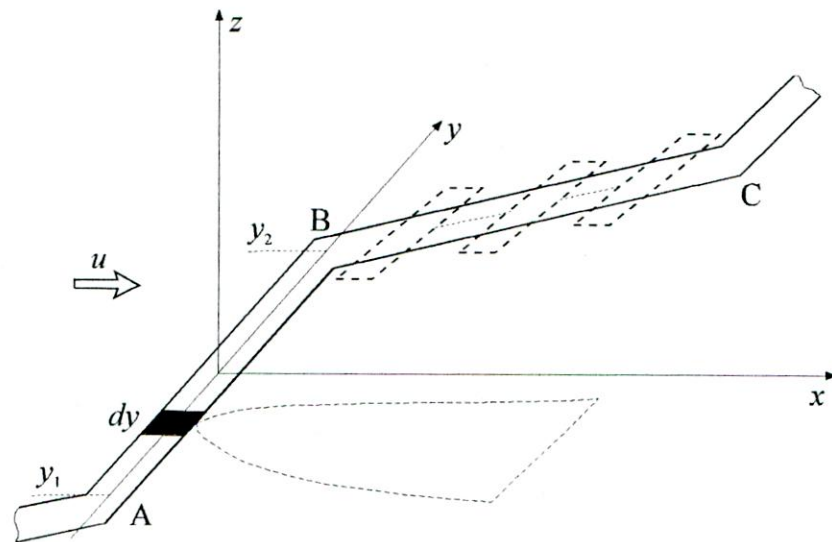


Figura 4.4 Fuente lineal obtenida por integración de fuentes puntuales de espesor dy .

4.6 Conclusión

En este capítulo se ha presentado un resumen de los principales enfoques que se han desarrollado para predecir la difusión turbulenta de sustancias en la capa límite atmosférica, al margen de los modelos de clausura de segundo orden. Es posible apreciar que los tratamientos van desde ideas teóricas básicas, como la teoría

estadística, que se vale sólo de conceptos tomados de la teoría clásica de la turbulencia, hasta métodos esencialmente empíricos como los modelos de plumas gaussianos. En una posición intermedia entre estos extremos se ubican la teoría de similaridad y la teoría K. En algunas situaciones estos métodos se complementan, como en los casos en los que la teoría K se sirve de funciones determinadas por la teoría de similaridad para calcular los coeficientes de difusión, o métodos gaussianos que basan sus coeficientes de dispersión (horizontal) en predicciones de la teoría estadística.

Ninguna de estas teorías parece bastar por sí misma para dar una descripción del proceso de difusión con una generalidad suficiente para aceptar un rango amplio de condiciones de borde. Ya se vio que la teoría estadística resulta aplicable principalmente al estudio de la difusión horizontal, mientras que la teoría de similaridad se concentra fundamentalmente en la difusión vertical. En ambos casos las hipótesis simplificadoras en torno a la uniformidad horizontal de la superficie y del campo de flujo constituyen una limitación importante para su utilización en problemas de geometría complicada. Estas hipótesis provienen, por una parte, de la necesidad de restringir el análisis a un nivel de complejidad abordable, y por otra, del tipo de problema al que tales teorías se han orientado. La aproximación estadística se desarrolló primordialmente como un método de investigación teórico del cual deducir leyes de comportamiento general, por lo cual se dan por conocidas características del campo de turbulencia tales como escalas temporales y espaciales, espectro de energía, varianza de las fluctuaciones turbulentas, etc. las cuales deberán provenir de otras teorías. Por su parte, la teoría de similaridad se originó en el campo de la meteorología, y su interés central está en los flujos verticales de momentum, calor y sustancias (principalmente el vapor de agua), puesto que a escala sinóptica o a mesoescala, la gran diferencia en la magnitud de las escalas horizontal y vertical a las que se describen los fenómenos, conduce a la utilización de modelos para difusión vertical, mientras que el transporte en la dirección horizontal se considera principalmente por convección.

Los modelos gaussianos han tenido una amplia aplicación como solución práctica a las restricciones que aquí se mencionan, permitiendo un tratamiento tridimensional del problema, y su popularidad se debe principalmente a la simplicidad de los cálculos requeridos, con el consiguiente ahorro de tiempo de computación. No obstante, la exactitud de este tipo de modelos es reconocidamente baja, incluso para terrenos planos horizontalmente homogéneos. Se considera^[25] que en tales circunstancias una precisión con un factor 2 es todo lo que puede esperarse en la mayoría de los casos, sin embargo, para topografías más complicadas los errores pueden ser considerablemente

mayores. Varios estudios sobre terreno irregular^[11] han mostrados diferencias en orden de magnitud entre valores de concentración predichos y los observados.

Gran parte del error mencionado se debe a la forma demasiado simplificada en que se trata el campo del flujo, el cual se toma como invariante incluso sobre distancias de decenas de kilómetros. Modelos de plumas no gaussianos^[3], consideran la variación vertical de la velocidad y la difusividad, pero mantienen la suposición de uniformidad horizontal. Es obvio que a medida que la topografía del terreno se torna más irregular, la velocidad y dirección del viento dependen más fuertemente de la geometría local de la superficie, que del patrón general de circulación que podría inferirse de observaciones meteorológicas en puntos aislados. Una estimación más precisa de la concentración de contaminante en esta situación se puede obtener resolviendo directamente la ecuación de transporte que la rige, en lugar de basar el cálculo en un proceso de dispersión determinado por el viento en el punto donde se encuentra la fuente. En este sentido, la teoría K, expresada en la ecuación de transporte (4.42) es el medio más adecuado de los analizados para este fin.

En muchos casos donde se recurre a la solución numérica de la ecuación (4.42), simultáneamente con la solución del campo de flujo, se utilizan modelos simplificados para los coeficientes de difusión de momentum, calor y masa, tales como los dados por la ecuación (4.51) y siguientes, los que permiten calcularlos explícitamente a partir de las propiedades del flujo medio. Sin embargo, para campos de flujo complejos, son bien conocidas las deficiencias de los modelos algebraicos de difusividades turbulentas, tales como el no tomar en cuenta los procesos de convección y difusión de la turbulencia misma, y su no validez dentro de toda la región del flujo considerado. En consecuencia, para una modelación como la abordada en este trabajo, donde la viscosidad turbulenta proviene de un modelo diferencial de dos ecuaciones ($k-\epsilon$), es preferible la determinación indirecta de los coeficientes de difusión de calor y masa a partir de dicha viscosidad. Al desarrollar modelos numéricos en este sentido es usual relacionar la difusividad vertical K_z de masa con la viscosidad turbulenta, mediante^[28]

$$K_z = \frac{v_t}{\sigma_c} \quad (4.77)$$

donde σ_c es un número de Schmidt turbulento, y v_t la viscosidad cinemática turbulenta. Una relación análoga puede establecerse para la difusividad térmica, en base a un número de Prandtl turbulento σ_h . Para condiciones estables o neutras estos números, de acuerdo a lo expuesto en la sección 4.3, toman valores en torno a 1, como se desprende

de la ecuación (4.40). La desviación de la isotropía se introduce mediante factores de modificación para las difusividades horizontales. Las fórmulas de Kurz, utilizadas por Iványi y Mersich [16] muestran ser adecuadas:

$$K_x = K_y = C_K K_z \quad (4.78)$$

con

$C_K = 5,0$ para condiciones estables

$C_K = 2,2$ para condiciones neutras

$C_K = 1,0$ para condiciones inestables

Un procedimiento similar adoptan Kotake y Sano [18].

5 Formulación Numérica

5.1 Ecuaciones de la Modelación

Los principios fundamentales de la modelación, que incluyen la conservación de momentum, energía, masa y sustancias químicas, y las ecuaciones del modelo $k-\varepsilon$ para la energía cinética turbulenta y su razón de disipación, se resumen en el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \bar{u}_j \bar{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{ef} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{ef} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \bar{\rho} g \delta_{i3} \quad (5.1a)$$

$i = 1, 2, 3$

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \bar{u}_i) = S_m \quad (5.1b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \bar{u}_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{ef}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + G - \bar{\rho} \varepsilon - \frac{g}{T} \bar{\rho} K_h^{(3)} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_3} \quad (5.1c)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \bar{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{ef}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + C_1 \frac{\varepsilon}{k} G - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (5.1d)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{T}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} K_{h,ef}^{(i)} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{C_p} \frac{d\bar{p}}{dt} + \frac{S_h}{C_p} \quad (5.1e)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \bar{c}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{c}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} K_{c,ef}^{(i)} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \right) + S_c \quad (5.1f)$$

$$\bar{\rho} = \frac{\bar{p}}{R\bar{T}} \quad (5.1g)$$

$$\text{con } \mu_{ef} = \mu + \mu_t \quad ; \quad \mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5.2a)$$

$$K_{h,ef}^{(i)} = \alpha + K_h^{(i)} \quad ; \quad \bar{\rho} K_h^{(i)} = C_K^{(i)} \frac{\mu_t}{\sigma_h} \quad (5.2b)$$

$$K_{c,ef}^{(i)} = D + K_c^{(i)} \quad ; \quad \bar{\rho} K_c^{(i)} = C_K^{(i)} \frac{\mu_t}{\sigma_c} \quad (5.2c)$$

y $C_1 = 1,44$; $C_2 = 1,92$; $C_\mu = 0,09$; $\sigma_k = 1,0$; $\sigma_\epsilon = 1,217$. σ_h puede estimarse en base a la ecuación (4.40) según el grado de estabilidad, y $\sigma_c \approx \sigma_h$.

En las ecuaciones de energía (5.1e) y de concentración (5.1f), los flujos turbulentos de calor, $\overline{u'_i T'}$, y de substancia, $\overline{u'_i c'}$, se han reemplazado por sus expresiones en función de los gradientes de temperatura y concentración media y las difusividades turbulentas, y agrupado con los respectivos flujos laminares en un único término, introduciendo difusividades efectivas de calor y masa, definidas en (5.2b) y (5.2c) como la suma de las difusividades turbulentas y sus correspondientes difusividades laminares, en analogía con la definición de la viscosidad efectiva. $C_K^{(i)}$ corresponde a los coeficientes de anisotropía en (4.78) para cada dirección. De igual modo, el flujo turbulento de calor en la fuente de k por flotación se ha puesto en términos del gradiente medio de temperatura vertical. El superíndice (i) en las difusividades turbulentas se utiliza para señalar un valor distinto en cada dirección, pero no constituye un índice vectorial.

La ecuación (5.1f) se ha escrito para la concentración de una única especie química. Evidentemente de haber más de un componente transportado se tendrán tantas ecuaciones de la forma (5.1f) como especies estén presentes. Cuando existe transformación química entre estas especies, dichas ecuaciones están conectadas entre sí a través de sus correspondientes términos fuentes. En este trabajo no se pretende abordar este aspecto, por lo que basta con plantear la ecuación de concentración para un polutante general. Se ha incluido además, junto con las ecuaciones de conservación, la ecuación de estado de gas ideal, (5.1g), la cual conecta el campo de temperatura con el campo de flujo a través de la densidad (como ya se discutió, la conexión entre la densidad y la presión es muy débil a números de Mach bajos, por lo que si bien en esta ecuación aparece también la presión, ésta podría reemplazarse por una presión de referencia \bar{p}_0 promediada dentro del campo de flujo).

5.2 Discretización de la Ecuaciones

El sistema de ecuaciones así formado es consistente, y puede resolverse numéricamente para un conjunto dado de condiciones de contorno. La resolución numérica se efectúa aquí mediante la técnica de diferencias finitas. Ya que las

ecuaciones de conservación tienen la misma estructura es conveniente expresarlas en la forma general[†]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma^{(i)} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S \quad (5.3)$$

donde ϕ es la variable dependiente, S el término fuente asociado a ϕ , y $\Gamma^{(i)}$ corresponde al (o los) coeficiente(s) de difusión. Así, $\Gamma^{(i)} = \mu_{ef}$ para $\phi = u, v, w$; $\Gamma^{(i)} = \mu_{ef} / \sigma_k$ para $\phi = k$; $\Gamma^{(i)} = \rho K_{h,ef}^{(i)}$ para $\phi = T$; etc. La ecuación de continuidad también puede tomarse como un caso particular de (5.3), haciendo $\phi = 1$, $\Gamma^{(i)} = 0$ y $S = S_m$ (aunque esto es sólo para abreviar el desarrollo de la discretización de (5.1), pues la ecuación de continuidad se resuelve en forma especial, como se explica en la sección (5.6)).

Para la discretización espacial de la ecuación (5.3) se aplica el método de volúmenes de control finitos. El dominio de solución se divide en celdas contiguas (o volúmenes de control), cada una rodeando un nodo, en el cual se calcula el valor de la variable ϕ , como se muestra en la figura 5.1. Integrando la ecuación diferencial (5.3) sobre cada uno de estos volúmenes de control se obtienen las ecuaciones de diferencias que relacionan el valor de ϕ en cada nodo con los valores en los nodos vecinos.

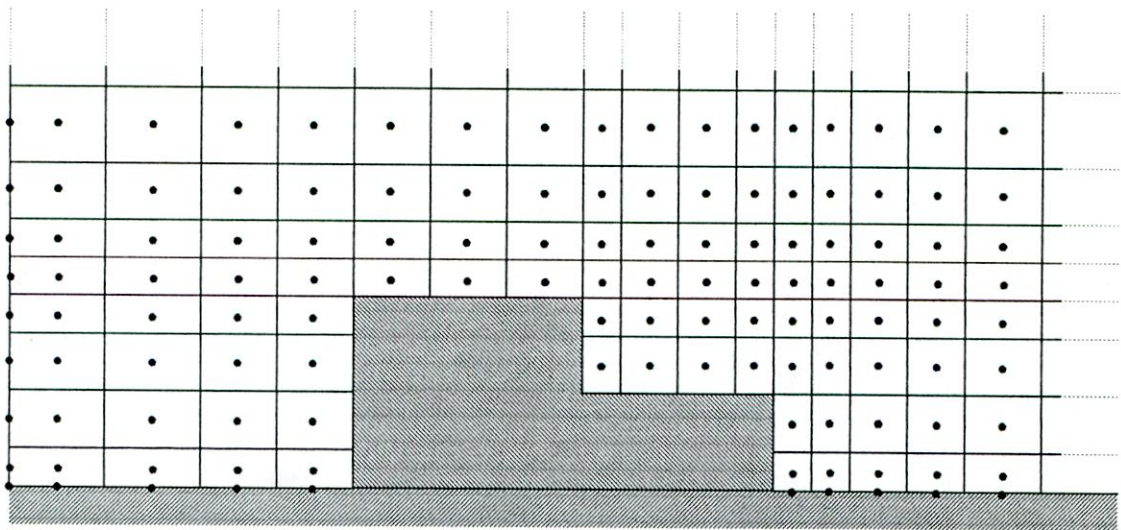


Figura 5.1 Discretización del dominio de solución en volúmenes de control finitos.

Comparado con la discretización convencional de diferencias finitas mediante

[†] Para evitar una notación demasiado complicada en los desarrollos que siguen se omitirá el símbolo $\bar{(\)}$ de promedio temporal en las variables, entendiéndose que para todas ellas se resuelven sólo las componentes medias.

series de Taylor, este procedimiento tiene la ventaja de asegurar la conservación global de la variable transportada. En la formulación por series de Taylor o similares, las derivadas en la ecuación diferencial para un nodo específico, son reemplazadas por sus correspondientes formas en diferencias, resultando una ecuación que satisface la ley de conservación en estos puntos discretos. Sin embargo, esto no garantiza que la conservación se mantenga en todo el dominio, debido a que no se exige la continuidad del flujo de ϕ entre nodos adyacentes, y por consiguiente la suma de las ecuaciones de diferencias sobre todos los nodos no necesariamente producirá un balance de los flujos de la propiedad entrando y saliendo del dominio de solución. Tal balance se asegura sólo si el número de nodos es muy grande (rigurosamente, si el espaciado entre nodos tiende a cero). La formulación en volúmenes de control en cambio, fuerza a los flujos de la propiedad a través de las caras de cada celda a ser iguales vistos desde ambos lados, por lo que el balance integral de la propiedad sobre cualquier grupo de celdas, y sobre todo el dominio, queda garantizado incluso para una discretización gruesa, y no sólo en el límite con un número muy grande de nodos.

La nomenclatura empleada se explica en la figuras 5.2 y 5.3, donde se representa un volumen de control general, con su nodo asociado P , y sus vecinos E , W , N , S , T y B . Las posiciones en las fronteras de la celda se denotan por las respectivas letras minúsculas. Cuando estos símbolos aparecen como subíndice, indican que la cantidad se evalúa en el nodo o frontera al que se hace referencia. Asimismo, para evitar confusión, en las ecuaciones directamente referidas a la malla de discretización donde aparezcan cantidades vectoriales, no se utilizará la convención de suma sobre el índice repetido.

Se ha adoptado la práctica de considerar a los volúmenes de control como las unidades básicas de discretización, por lo que la malla se construye definiendo las posiciones de las fronteras de los mismos. Las posiciones de los nodos se deducen a continuación de la discretización del dominio de solución ubicándolos en los centros de los volúmenes de control. Por lo tanto, cuando los tamaños de éstos no son uniformes, las fronteras no quedan situadas en el punto medio entre nodos adyacentes. Un procedimiento alternativo es el de definir primero la malla de nodos y calcular luego las posiciones de las fronteras de modo que se sitúen en el punto medio entre los nodos. Aunque esto simplifica algunos cálculos a efectuar para la interpolación de propiedades en estas fronteras, se requiere un deducción particular para las ecuaciones discretizadas en los nodos de los contornos del dominio de solución, y además resulta más complicado el hacer coincidir las fronteras de los volúmenes de control con

contornos físicos del problema (como obstáculos en el campo de flujo), para evitar discontinuidades de las condiciones de contorno dentro de un volumen de control. El procedimiento adoptado es por lo tanto el más adecuado para un programa computacional como el que se desarrolla aquí, el cual debe ser capaz de tratar problemas con formas generales para los contornos.

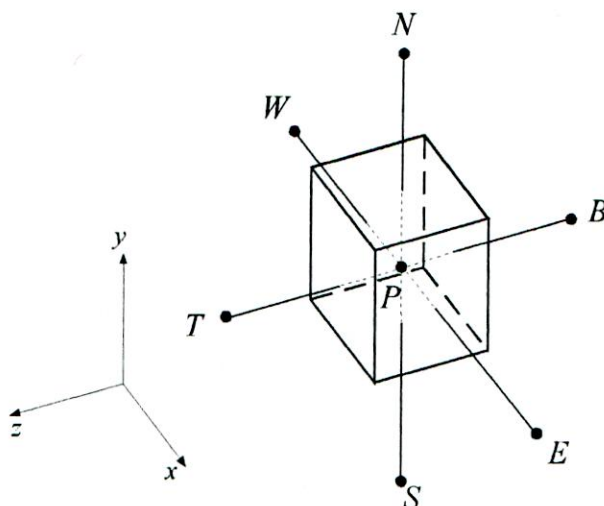


Figura 5.2 Volumen de control en torno al nodo P .

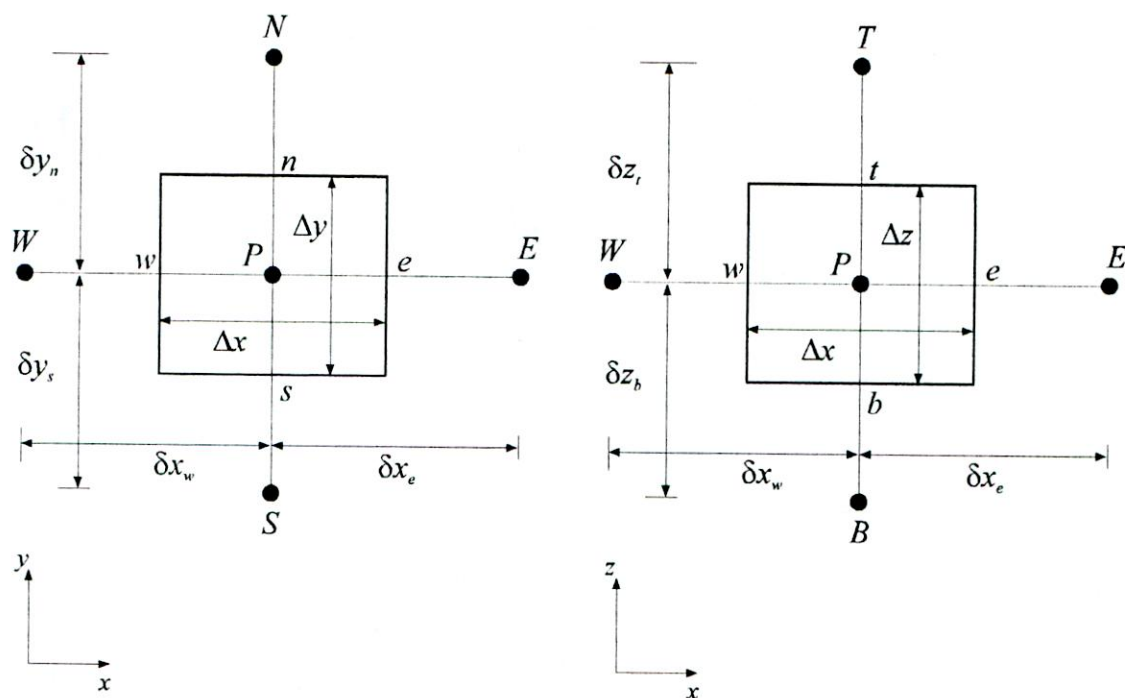


Figura 5.3 Vistas laterales del volumen de control.

Se definirá F_i como el flujo total de transporte de ϕ (convección + difusión):

$$F_i = \rho u_i \phi - \Gamma^{(i)} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (5.4)$$

por lo que la ecuación (5.3) se puede escribir como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial F_i}{\partial x_i} = S \quad (5.5)$$

La ecuación de discretización se deduce ahora integrando (5.4) en el volumen de la celda, y en el tiempo, desde un instante t arbitrario hasta un instante posterior $t + \Delta t$. Suponiendo que los valores de las variables en el nodo P prevalecen sobre todo el volumen de control, la integración del primer término en (5.4) resulta en

$$\int_V \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) dt dV = (\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0) \Delta V \quad (5.6)$$

donde ΔV es el volumen de la celda, y el superíndice 0 designa cantidades evaluadas en el instante anterior (t), mientras que las variables sin superíndice corresponden a los nuevos valores al avanzar el tiempo un incremento Δt .

Para la integración en volumen y tiempo de los demás términos de (5.6) se tiene

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_V \frac{\partial F_i}{\partial x_i} dV dt = \int_t^{t+\Delta t} \sum_{i:x,y,z} D(F_i) \Delta A_i dt \quad (5.7)$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_V S dV dt = \int_t^{t+\Delta t} (S_P \Delta V) dt \quad (5.8)$$

donde se define $D(F_i)$ como la diferencia de los flujos F_i evaluados en caras opuestas del volumen de control, y ΔA_i es el área de la cara normal a la dirección i :

$$D(F_x) = (F_x)_e - (F_x)_w \quad ; \quad \Delta A_x = \Delta y \Delta z \quad (5.9a)$$

$$D(F_y) = (F_y)_n - (F_y)_s \quad ; \quad \Delta A_y = \Delta x \Delta z \quad (5.9b)$$

$$D(F_z) = (F_z)_t - (F_z)_b \quad ; \quad \Delta A_z = \Delta x \Delta y \quad (5.9a)$$

Las integrales en t de (5.7) y (5.8) requieren suponer alguna forma de variación en el tiempo de las variables contenidas en F_i y S_p . Aunque las soluciones presentadas en este trabajo se obtuvieron para problemas en estado estacionario, el programa computacional se desarrolló para resolver también problemas en estado transiente, a fin de otorgarle suficiente generalidad. Existen numerosos esquemas de discretización temporal, algunos de los cuales, para lograr una aproximación de orden más alto, utilizan información para más de dos niveles de tiempo. En este caso se considera suficiente la discretización basada en los dos niveles de tiempo t y $t + \Delta t$. Una forma general de representar a la mayoría de los métodos de esta clase es por medio de la relación

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi_p dt = [\alpha \phi_p + (1 - \alpha) \phi_p^0] \Delta t \quad (5.10)$$

que expresa la variación de la variable entre t y $t + \Delta t$ como una combinación lineal del valor que toma en estos dos instantes. Al emplear formas de este tipo para las integrales en (5.7) y (5.8) se llega a la ecuación discretizada

$$(\rho_p \phi_p - \rho_p^0 \phi_p^0) \Delta V + \sum_{i:x,y,z} [\alpha D(F_i) + (1 - \alpha) D(F_i^0)] \Delta A_i \Delta t = [\alpha S_p + (1 - \alpha) S_p^0] \Delta V \Delta t \quad (5.11)$$

Para algunos valores particulares del factor de ponderación α la ecuación se reduce a alguno de los esquemas más comúnmente empleados: con $\alpha = 1$ se tiene el método totalmente implícito, con $\alpha = 0,5$ el método de Crank–Nicolson, y con $\alpha = 0$ el método totalmente explícito. En el programa se ha implementado el primero de estos métodos, de modo que la ecuación discretizada queda como

$$(\rho_p \phi_p - \rho_p^0 \phi_p^0) \frac{\Delta V}{\Delta t} + \sum_{i:x,y,z} D(F_i) \Delta A_i = S_p \Delta V \quad (5.12)$$

De modo análogo se puede integrar la ecuación de continuidad y llegar a

$$(\rho_p - \rho_p^0) \frac{\Delta V}{\Delta t} + \sum_{i:x,y,z} D(\rho u_i) \Delta A_i = S_{mp} \Delta V \quad (5.13)$$

Multiplicando (5.13) por ϕ_p y restándola de (5.11) se obtiene

$$(\phi_p - \phi_p^0) \frac{\rho_p^0 \Delta V}{\Delta t} + \sum_{i:x,y,z} [D(F_i) - D(\rho u_i) \phi_p] \Delta A_i = (S_p - S_{mp} \phi_p) \Delta V \quad (5.14)$$

De acuerdo a la definición (5.4), para el cálculo de los flujos totales F_i en las fronteras del volumen de control, es necesario evaluar la variable ϕ y sus derivadas en dichas posiciones. Esto implica suponer una función de variación espacial de ϕ entre nodos adyacentes, para lo cual existen también varios esquemas posibles. En general, el valor de ϕ en una frontera dada será un promedio ponderado de los valores calculados en los nodos entre los que se ubica, mientras que la derivada será aproximada como un múltiplo de la diferencia entre esos valores. Así, para la configuración generalizada mostrada en la figura 5.4, el flujo F_i a través de la frontera k situada entre el nodo P y su vecino K en la dirección positiva de la coordenada x_i , se puede calcular como

$$(F_i)_k = (\rho u_i)_k [\beta_k \phi_p + (1 - \beta_k) \phi_K] - \gamma_k (\phi_K - \phi_p) \quad ; \quad K : E, N, T \quad (5.15)$$

donde los coeficientes β_k y γ_k son normalmente funciones de la geometría de la malla, los coeficientes de difusión $\Gamma^{(i)}$, y otros parámetros. Los esquemas de discretización difieren a este nivel básicamente en el tipo de funciones empleadas para β_k y γ_k .

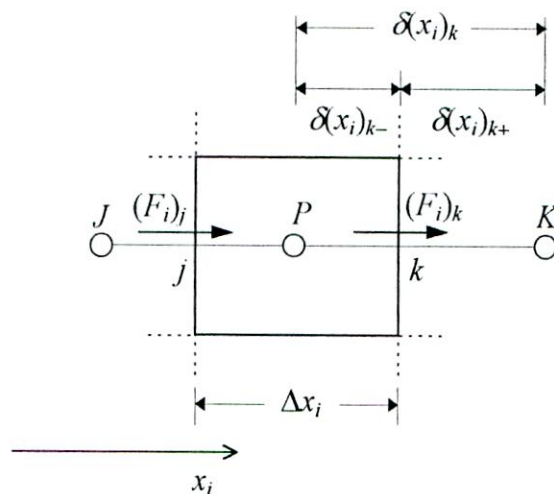


Figura 5.4 Flujos totales a través de las caras j y k del volumen de control.

Una expresión similar puede plantearse para el flujo $(F_i)_j$ en la frontera opuesta

$$(F_i)_j = (\rho u_i)_j [\beta_j \phi_j + (1 - \beta_j) \phi_P] - \gamma_j (\phi_P - \phi_j) \quad ; \quad J: W, S, B \quad (5.16)$$

de manera que las diferencias $D(F_i)$ que aparecen en la ecuación (5.14) se pueden llevar a la forma

$$D(F_i) = -\psi_K \phi_K - \psi_J \phi_J + \psi_P \phi_P \quad (5.17)$$

donde

$$\psi_K = \gamma_k - (1 - \beta_k) (\rho u_i)_k \quad (5.18a)$$

$$\psi_J = \gamma_j + \beta_j (\rho u_i)_j \quad (5.18b)$$

$$\psi_P = \psi_K + \psi_J + [(\rho u_i)_k - (\rho u_i)_j] = \psi_K + \psi_J + D(\rho u_i) \quad (5.18c)$$

Aplicando estos resultados en la ecuación (5.14) para cada una de las direcciones en la suma se obtiene la ecuación general de discretización

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_T \phi_T + a_B \phi_B + b \quad (5.19)$$

con

$$a_E = [\gamma_e - (1 - \beta_e) (\rho u)_e] \Delta A_x \quad (5.20a)$$

$$a_W = [\gamma_w + \beta_w (\rho u)_w] \Delta A_x \quad (5.20b)$$

$$a_N = [\gamma_n - (1 - \beta_n) (\rho v)_n] \Delta A_y \quad (5.20c)$$

$$a_S = [\gamma_s + \beta_s (\rho v)_s] \Delta A_y \quad (5.20d)$$

$$a_T = [\gamma_t - (1 - \beta_t) (\rho w)_t] \Delta A_z \quad (5.20e)$$

$$a_B = [\gamma_b + \beta_b (\rho w)_b] \Delta A_z \quad (5.20f)$$

$$a_P^0 = \rho_P^0 \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (5.20g)$$

$$b = S_P \Delta V + a_P^0 \phi_P^0 \quad (5.20h)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B + a_P^0 + S_{mP} \Delta V \quad (5.20i)$$

La ecuación (5.19) relaciona el valor de la variable ϕ en el nodo central P con los valores en los nodos vecinos, por medio de los coeficientes $a_C = \{a_E, \dots, a_B\}$, y con la fuente y el valor anterior de ϕ en el nodo mediante la constante b (en lo sucesivo a_C denota cualquiera de los seis coeficientes hacia los nodos vecinos, y c la

correspondiente frontera del volumen de control en esa dirección). Para problemas como los descritos por la ecuación (5.3), en los que el valor de la variable en un nodo sólo puede influir en el valor de los nodos vecinos por procesos de convección y difusión, se requiere que en la ecuación discretizada los coeficientes a_c y a_p tengan todos el mismo signo, para que la ecuación entregue resultados físicamente verosímiles. Esta uniformidad de signos garantiza que un incremento de ϕ en un nodo tienda a producir, con la restantes condiciones inalteradas, un incremento en los nodos vecinos, y no una disminución. Los coeficientes se determinan, por lo tanto, de modo que sean siempre positivos.

La ecuación (5.19) planteada para cada nodo da origen a un sistema de ecuaciones algebraicas que substituye a la ecuación diferencial original. Ya que las ecuaciones diferenciales (5.1) están conectadas entre sí, se resuelven secuencialmente los sistemas de ecuaciones para cada una de las variables, y el proceso es iterado hasta lograr convergencia de todas ellas. Por otra parte, tales sistemas son tratados como lineales, por lo que al resolverlos sus coeficientes permanecen constantes, y sólo se recalculan en cada una de estas iteraciones globales.

Para el cálculo de los coeficientes se deben elegir las funciones para los parámetros β y γ . La posibilidad más simple en este sentido la da el esquema de diferencias centradas, el cual supone una variación lineal de ϕ entre nodos adyacentes. En tal caso, los coeficientes a_c en las ecuaciones (5.20) se calculan con

$$\beta_c = \frac{(\delta x_i)_{c+}}{(\delta x_i)_c} \quad \text{y} \quad \gamma_c = \frac{\Gamma_c^{(i)}}{(\delta x_i)_c} \quad ; \quad c: e, w, n, s, t, b \quad (5.21)$$

(las distancias $(\delta x_i)_{c+}$ se definen en la figura 5.4. Ya que el nodo P está en el centro de la celda se cumple que $(\delta x_i)_{j+} = (\delta x_i)_{k-} = \Delta x_i/2$).

Puede advertirse que dependiendo de las dimensiones $\delta(x_i)$ del volumen de control, de los flujos convectivos ρu_i a través de sus contornos, y de los coeficientes de difusión $\Gamma^{(i)}$, los coeficientes a_c pueden hacerse negativos. La influencia de estos parámetros puede sintetizarse en el número de Peclet, para cada frontera c :

$$\text{Pe}_c = \frac{(\rho u_i)_c (\delta x_i)_c}{\Gamma_c^{(i)}} \quad (5.22)$$

en términos del cual los coeficientes para los nodos generales K y J de la figura 5.4

quedan dados por

$$a_K = \gamma_k [1 - (1 - \beta_k) \text{Pe}_k] \Delta A_i \quad (5.23a)$$

$$a_J = \gamma_j [1 + \beta_j \text{Pe}_j] \Delta A_i \quad (5.23b)$$

Para el esquema de diferencias centradas definido por las expresiones (5.21) se tiene

$$a_K = \frac{\Gamma_k^{(i)}}{(\delta x_i)_k} \left[1 - \frac{\Delta x_i}{2(\delta x_i)_k} \text{Pe}_k \right] \Delta A_i \quad (5.24a)$$

$$a_J = \frac{\Gamma_j^{(i)}}{(\delta x_i)_j} \left[1 + \frac{\Delta x_i}{2(\delta x_i)_j} \text{Pe}_j \right] \Delta A_i \quad (5.24b)$$

y se cumple que $a_K > 0$ para $\text{Pe}_k < 2(\delta x_i)_k/\Delta x_i$ y $a_J > 0$ para $\text{Pe}_j > -2(\delta x_i)_j/\Delta x_i$. Un criterio general al respecto es entonces demandar que $|\text{Pe}| < 2\delta x_i/\Delta x_i$ en las fronteras de todos los volúmenes de control. Cuando las fronteras de estas celdas se definen en el punto medio entre nodos vecinos, es $\beta = 1/2$ y se tiene el rango típico de $|\text{Pe}| < 2$ para el cual se considera aplicable el método de diferencias centradas. Esto restringe severamente el empleo de diferencias centradas para problemas con convección, ya que el único modo de mantener el número de Peclet dentro de los límites permitidos es utilizando mallas de discretización muy finas.

Una primera solución a esta dificultad la proporciona el esquema de diferencias "flujo arriba" (método *upwind*), el cual calcula los flujos F_i con

$$\beta_c = \begin{cases} 1 & ; \text{ si } (\rho u_i)_c > 0 \\ 0 & ; \text{ si } (\rho u_i)_c < 0 \end{cases} \quad ; \quad \gamma_c = \frac{\Gamma_c^{(i)}}{(\delta x_i)_c} \quad (5.25)$$

de modo que los coeficientes de la ecuación de discretización quedan dados por

$$a_k = \begin{cases} \frac{\Gamma_k}{(\delta x_i)_k} \Delta A_i & ; \text{ Pe}_k > 0 \\ \frac{\Gamma_k}{(\delta x_i)_k} (1 - \text{Pe}_k) \Delta A_i & ; \text{ Pe}_k < 0 \end{cases} \quad (5.26a)$$

$$a_j = \begin{cases} \frac{\Gamma_j}{(\delta x_i)_j} (1 + \text{Pe}_j) \Delta A_i & ; \text{Pe}_j > 0 \\ \frac{\Gamma_j}{(\delta x_i)_j} \Delta A_i & ; \text{Pe}_j < 0 \end{cases} \quad (5.26b)$$

y por consiguiente no se tornan negativos para ningún número de Peclet. El fundamento de este método está en el hecho de que a medida que $|\text{Pe}|$ aumenta, prevalece la convección sobre el efecto de difusión, por lo que el valor de la variable en la frontera c está dominado por el valor que toma en el nodo flujo arriba de la misma. Por medio del parámetro β_c en (5.25) se iguala entonces el valor de ϕ en la frontera al que tiene flujo arriba, y se anula la influencia del nodo flujo abajo. En estas circunstancias, la variación de ϕ entre nodos adyacentes tiene un comportamiento exponencial, y su derivada evaluada en la frontera es, para $|\text{Pe}|$ elevado, mucho menor que lo que predice una función lineal. El método *upwind* sin embargo mantiene la misma forma lineal para calcular el flujo difusivo que la usada por las diferencias centradas, produciendo una sobreestimación de tal flujo.

El desarrollo de esquemas de diferenciación más precisos ha sido guiado por la solución de la ecuación (5.4) para el caso unidimensional estacionario y sin fuentes, en el cual la ecuación de transporte se reduce a

$$\frac{dF_x}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\rho u \phi - \Gamma^{(x)} \frac{d\phi}{dx} \right) = 0 \quad (5.27)$$

la cual, para $\Gamma^{(x)}$ constante (y dado que ρu es constante en este caso por continuidad), puede resolverse en forma exacta. Con las condiciones $\phi(x_P) = \phi_P$ y $\phi(x_E) = \phi_E$ la solución resultante es

$$\phi(x) = \phi_P + (\phi_E - \phi_P) \frac{\exp(\text{Pe}_e(x - x_P) / \delta x_e) - 1}{\exp(\text{Pe}_e) - 1} \quad (5.28)$$

Al utilizar esta función para calcular ϕ_e y $(d\phi/dx)_e$ se obtiene para el flujo total en la frontera e :

$$(F_x)_e = (\rho u)_e \phi_P - \frac{(\rho u)_e}{\exp(\text{Pe}_e) - 1} (\phi_E - \phi_P) \quad (5.29)$$

y análogamente para la frontera opuesta w :

$$(F_x)_w = (\rho u)_w \phi_w - \frac{(\rho u)_w}{\exp(\text{Pe}_w) - 1} (\phi_p - \phi_w) \quad (5.30)$$

Comparando estas expresiones con las funciones generales (5.15) y (5.16) se observa que es posible definir un esquema de diferenciación para las tres direcciones haciendo

$$\beta_c = 1 \quad ; \quad \gamma_c = \frac{(\rho u)_c}{\exp(\text{Pe}_c) - 1} \quad (5.31)$$

en los coeficientes a_c , el cual, para el caso unidimensional particular descrito, entrega la solución exacta[†], y en general para problemas multidimensionales proporciona una aproximación mucho mejor para el comportamiento de la variable que el método *upwind*.

Los coeficientes se pueden calcular entonces como

$$a_K = \frac{\Gamma_k^{(i)}}{(\delta x_i)_k} \Delta A_i \Psi(\text{Pe}_k) \quad (5.32a)$$

$$a_J = \frac{\Gamma_j^{(i)}}{(\delta x_i)_j} \Delta A_i \Psi(-\text{Pe}_j) \quad (5.32b)$$

con

$$\Psi(\text{Pe}) = \frac{\text{Pe}}{\exp(\text{Pe}) - 1} \quad (5.33)$$

A pesar de sus cualidades este método es poco empleado en su forma original debido al mayor tiempo de computación que implican las funciones exponenciales. Por otra parte, ya que el método es exacto sólo para el caso unidimensional particular descrito, el utilizar la función exacta $\Psi(\text{Pe})$ no se justifica en otros casos. En tal situación es preferible aproximar la función $\Psi(\text{Pe})$ de algún modo que sea computacionalmente eficiente.

[†] Aunque en la deducción se supuso Γ constante, las funciones obtenidas son todavía la solución exacta en el caso en que Γ sea diferente en los volúmenes de control colindantes en los que se aplican, en tanto se considere uniforme su valor dentro de ellos, y el valor en la interfaz se calcule según la ecuación (5.53).

Un método de este tipo comúnmente empleado es el esquema híbrido, el cual aproxima $\Psi(\text{Pe})$ por tres tramos rectos:

$$\Psi(\text{Pe}) = \begin{cases} -\text{Pe} & ; \text{Pe} < -2 \\ 1 - \text{Pe}/2 & ; |\text{Pe}| \leq 2 \\ 0 & ; \text{Pe} > 2 \end{cases} \quad (5.34)$$

Insertando esta función en las ecuaciones (5.32) se puede observar que el método híbrido coincide con el de diferencias centradas para $|\text{Pe}| \leq 2$, mientras que fuera de este rango se reduce a un forma similar al método *upwind* dado por (5.25), pero ahora con $\gamma_c = 0$, de manera que el flujo difusivo es anulado para $|\text{Pe}| > 2$, eliminándose el principal defecto de aquel método. Aunque estrictamente la expresión $1 - \text{Pe}/2$ corresponde a la de diferencias centradas cuando la interfaz está en el punto medio entre los nodos, el método híbrido es aplicable para cualquier ubicación de ella, ya que la calidad del ajuste de la función (5.34) a la forma exacta (5.33) no depende de tal ubicación.

Si bien el esquema híbrido da buenos resultados en la mayoría de las aplicaciones, la desviación respecto a la función exacta no resulta despreciable en torno a $|\text{Pe}| = 2$, y además puede ser demasiado pronto anular completamente el flujo difusivo para valores de $|\text{Pe}|$ inmediatamente mayores que 2. Un método aún más preciso es el de ley de potencia de Patankar [24], que utiliza la aproximación

$$\Psi(\text{Pe}) = \begin{cases} -\text{Pe} & ; \text{Pe} < -10 \\ (1 + 0,1\text{Pe})^5 - \text{Pe} & ; -10 \leq \text{Pe} < 0 \\ (1 - 0,1\text{Pe})^5 & ; 0 \leq \text{Pe} \leq 10 \\ 0 & ; \text{Pe} > 10 \end{cases} \quad (5.35)$$

Para $|\text{Pe}| > 10$ esta función coincide con la del esquema híbrido, mientras que en el rango intermedio las aproximaciones lineales son reemplazadas por una función que se ajusta estrechamente a la función exacta, y cuyo costo computacional es todavía razonable. Este es el esquema de discretización finalmente adoptado en este trabajo. Aunque el método puede ser mejorado para problemas multidimensionales introduciendo correcciones en la función de interpolación^[6], el esquema resultante

conduce a un incremento substancial en el número de cálculos a efectuar y es poco práctico. Por lo tanto, los coeficientes a_C para la ecuación de discretización (5.19) son calculados mediante las ecuaciones (5.32) con

$$\Psi(Pe) = \max\left(0, (1 - 0,1|Pe|)^5\right) + \max(0, -Pe) \quad (5.36)$$

que es una forma compacta para la función (5.35).

5.3 Modificaciones a la Ecuación de Discretización

Las expresiones dadas por las ecuaciones (5.20) para los coeficientes a_P y b de la ecuación de discretización son modificadas al construirse el sistema de ecuaciones a resolver por tres procesos: la linealización del término fuente, la eliminación del error en conservación de masa y la introducción de coeficientes de relajación.

5.3.1 Linealización del Término Fuente

Ya que se pretende que el sistema de ecuaciones sea lineal, cuando la fuente S depende de ϕ de un modo no lineal, sólo es posible representar tal dependencia por una función linealizada

$$S = S_1 + S_2\phi \quad (5.37)$$

y resolver el sistema en forma iterativa, hasta una aproximación suficiente del sistema no lineal (en realidad se aprovecha el hecho de que la resolución del sistema debe ser iterativa de cualquier forma, debido a la conexión no lineal entre las diferentes variables del sistema completo de ecuaciones diferenciales). Los coeficientes S_1 y S_2 pueden depender a su vez de ϕ y ya que se toman como constantes, se evalúan con el valor de ϕ obtenido en la iteración anterior. Aunque siempre es posible calcular directamente S en el nodo P , en su forma no lineal, y usar tal valor como constante al evaluar el término b , la linealización (5.37) acelera la convergencia a la solución ya que se aprovecha parte de la información sobre la dependencia de S con respecto a ϕ .

Al utilizar la función (5.37) para S evaluado en P , los coeficientes a_P y b en la ecuación (5.19) cambian a

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B + a_p^0 - S_{2p}\Delta V + S_{mp}\Delta V \quad (5.38)$$

$$b = S_{1p}\Delta V + a_p^0 \phi_p^0 \quad (5.39)$$

Ya que $S_{2p}\Delta V$ se resta al valor anterior de a_p , y dado que a_p no puede ser negativo, sólo se admiten linealizaciones tales que S_2 sea siempre negativo, de modo de asegurar la estabilidad numérica. Cuando esto no es posible se toma simplemente $S_2 = 0$ y $S_1 = S_p$.

Para las ecuaciones (5.1) de la modelación sólo las fuentes para k y ε se linealizan con $S_2 \neq 0$, para un volumen de control general dentro del campo de flujo. Las demás variables no aparecen explícitamente en sus respectivos términos fuentes (excepto para ciertas condiciones de contorno). Se tiene entonces:

para k :

$$S_1 = G - \frac{g}{T} \rho K_h^{(3)} \frac{\partial T}{\partial x_3} \quad (5.40a)$$

$$S_2 = - \frac{C_\mu \rho^2 k}{\mu_{ef}} \quad (5.40b)$$

para ε :

$$S_1 = C_1 G \frac{\varepsilon}{k} \quad (5.41a)$$

$$S_2 = - C_2 \rho \frac{\varepsilon}{k} \quad (5.41b)$$

5.3.2 Corrección por Fuente de Masa Aparente

El término S_m en la ecuación de continuidad hace referencia a la fuente de masa que puede eventualmente existir en un punto dado. La inclusión de estas fuentes es motivada en este caso, más que por razones de modelación física, por necesidad computacional. Por medio de estas fuentes es posible especificar directamente el ingreso de sustancias al dominio de solución, en lugar hacerlo mediante un flujo dado como condición de contorno. En este último caso, se prescribe como condición de contorno la velocidad del efluente que transporta a la sustancia, en las fronteras de los volúmenes de control a través de las cuales ingresa tal efluente al dominio de solución,

conjuntamente con la concentración que en él tiene la sustancia. De esta manera, los flujos vinculados a una emisión, tanto de masa total como de contaminante, quedan especificados como condiciones de contorno para las ecuaciones de momentum y concentración, en las caras de los volúmenes de control en los que tienen lugar, y no como una fuente de masa en el interior de los mismos. Teóricamente este procedimiento es preferible, ya que el ingreso de sustancias al campo es dado al programa computacional tal como sería especificado en las condiciones de contorno analíticas. No obstante, si el área de entrada del efluente es mucho menor que las dimensiones del dominio de solución, se requiere una discretización demasiado fina para lograr que esta área sea representable como la cara de un volumen de control, de modo que el flujo de sustancia en cuestión sólo puede ser dado a través del término fuente S_c para la concentración, asociado al cual se tendrá una fuente de masa S_m . Esto equivale a no especificar cómo y dónde exactamente tiene lugar en un volumen de control el ingreso de sustancia, sino sólo informar al programa computacional que "dentro" de ese volumen de control ocurre tal ingreso. Ya que el método no considera las variaciones de una variable dentro de un volumen de control, ambos procedimientos coinciden numéricamente, y la diferencia se da en el término de la ecuación de discretización donde aparece la masa ingresada. En un caso será en el coeficiente a_c que contiene el transporte convectivo a través de la cara del volumen de control, en el otro caso será en el término fuente, pero en ambos la contribución a los balances de sustancia y de masa total en el volumen de control será la misma.

El análisis anterior es más bien formal, ya que en la mayoría de los casos el flujo másico que introduce el contaminante a un volumen de control dado es mucho menor que los flujos de masa por convección en las caras del mismo (puesto que cuando se recurre a estas fuentes de masa, el tamaño del volumen de control es mucho mayor que el área de entrada de contaminantes). Por lo tanto, $S_{mP} \Delta V$ es considerablemente menor que los coeficientes a_c en la ecuación discretizada, y su efecto numérico puede despreciarse. No obstante, se ha incluido el término S_m para mayor generalidad del programa computacional. Mucho más importante desde el punto de vista numérico es la fuente de masa aparente que se produce durante el proceso de solución, debido a que durante la mayor parte de éste el campo de flujo no satisface la ecuación de continuidad. Al deducir la ecuación de discretización se supuso que esto sí ocurría, cuando se resta de (5.12) la ecuación de continuidad integrada en el volumen de control en la forma (5.13). Durante el proceso de iteración el lado derecho de esa ecuación no será el valor teórico $S_{mP} \Delta V$ sino algún valor distinto, por lo que puede

escribirse como

$$(\rho_P - \rho_P^0) \frac{\Delta V}{\Delta t} + \sum_{i:x,y,z} D(\rho u_i) \Delta A_i = S_{mP} \Delta V + S_m^* \quad (5.42)$$

donde S_m^* representa el error numérico en la conservación de masa, y actúa como una fuente aparente de masa en el volumen de control. Al restar esta ecuación de (5.12) en lugar de (5.13) se obtiene

$$(\phi_P - \phi_P^0) \frac{\rho_P^0 \Delta V}{\Delta t} + \sum_{i:x,y,z} [D(F_i) - D(\rho u_i) \phi_P] \Delta A_i = (S_P - S_{mP} \phi_P) \Delta V - S_m^* \phi_P \quad (5.43)$$

El último término del lado derecho es una fuente falsa de la variable ϕ , derivada de la fuente falsa de masa en la celda. De este modo el error en la conservación de masa se propaga a la conservación de todas las demás propiedades, y el proceso de iteración puede resultar divergente. Para evitar esto se debe remover la fuente falsa de la ecuación (5.43), sumando un término de corrección que la anule. Ya que ϕ_P no se conoce antes de resolver la ecuación, el mejor término de corrección posible es $S_m^* \tilde{\phi}_P$, con $\tilde{\phi}_P$ el valor obtenido en la iteración anterior. Por lo tanto, la ecuación de discretización debe obtenerse de

$$(\phi_P - \phi_P^0) \frac{\rho_P^0 \Delta V}{\Delta t} + \sum_{i:x,y,z} [D(F_i) - D(\rho u_i) \phi_P] \Delta A_i = (S_P - S_{mP} \phi_P) \Delta V - S_m^* (\phi_P - \tilde{\phi}_P) \quad (5.43)$$

Se deduce que la modificación consiste en sumar las cantidades S_m^* y $S_m^* \tilde{\phi}_P$ a los coeficientes a_P y b anteriormente obtenidos. Sin embargo, S_m^* puede resultar negativo en algunos volúmenes de control, dando lugar a la posibilidad de un coeficiente a_P también negativo, lo que tiene un efecto mucho peor que el error que se intenta remover. En tales casos la ecuación de discretización no se modifica. Por consiguiente, a_P y b para la ecuación (5.19) se calculan como

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B + a_P^0 - S_{2P} \Delta V + S_{mP} \Delta V + \max(S_m^*, 0) \quad (5.44)$$

$$b = S_{1P} \Delta V + a_P^0 \phi_P^0 + \max(S_m^*, 0) \tilde{\phi}_P \quad (5.45)$$

donde S_m^* se obtiene de la ecuación (5.42) en cada iteración.

5.3.3 Coeficientes de Relajación

Debido a la naturaleza marcadamente no lineal del sistema de ecuaciones diferenciales que se resuelve, es necesario incorporar para cada una de ellas un coeficiente de relajación en su ecuación de discretización. El cambio que experimentaría ϕ_p entre dos iteraciones globales sucesivas sería, al resolver la ecuación discretizada en su forma original

$$\Delta\phi_p = \frac{1}{a_p}(a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S + a_T\phi_T + a_B\phi_B + b) - \tilde{\phi}_p \quad (5.46)$$

donde $\tilde{\phi}_p$ es como antes el valor resultante en la iteración anterior. Se introduce ahora un coeficiente de relajación ω , de modo que el nuevo valor de ϕ_p esté dado por

$$\phi_p = \tilde{\phi}_p + \omega\Delta\phi_p \quad (5.47)$$

La ecuación de discretización a resolver toma entonces la forma

$$\frac{1}{\omega}a_p\phi_p = a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S + a_T\phi_T + a_B\phi_B + b - \frac{1-\omega}{\omega}a_p\tilde{\phi}_p \quad (5.48)$$

5.4 Interpolación de los Coeficientes de Difusión

En el cálculo de los coeficientes de la ecuación discretizada se necesita el valor de los coeficientes de difusión $\Gamma^{(i)}$, evaluados en las fronteras del volumen de control. Los valores de estos coeficientes sólo se conocen en los nodos, por lo que se precisa algún tipo de interpolación para sus valores en los puntos intermedios. Es usual emplear simplemente una interpolación lineal, de modo que para la posición k entre los nodos P y K

$$\Gamma_k^{(i)} = \eta\Gamma_P^{(i)} + (1-\eta)\Gamma_K^{(i)} \quad (5.49)$$

con

$$\eta = \frac{(\delta x_i)_{k+}}{(\delta x_i)_k} \quad (5.50)$$

Aunque este procedimiento es aceptable en muchos casos, tiene el inconveniente de no permitir discontinuidades abruptas en el valor de $\Gamma^{(i)}$ entre P y K .

Una interpolación mejor puede obtenerse imponiendo la condición de continuidad del flujo difusivo en la interfaz k . Si se supone que $\Gamma_P^{(i)}$ y $\Gamma_K^{(i)}$ son uniformes sobre sus respectivos volúmenes de control, el flujo difusivo J (por unidad de área) que atraviesa la interfaz se puede aproximar por

$$J = -\Gamma_P^{(i)} \frac{\phi_k - \phi_P}{(\delta x_i)_{k-}} = -\Gamma_K^{(i)} \frac{\phi_K - \phi_k}{(\delta x_i)_{k+}} \quad (5.51)$$

$\Gamma_k^{(i)}$ se calcula entonces de modo que el mismo flujo difusivo pueda obtenerse como

$$J = -\Gamma_k^{(i)} \frac{\phi_K - \phi_P}{(\delta x_i)_k} \quad (5.52)$$

combinando las ecuaciones (5.51) y (5.52) se llega a

$$\Gamma_k^{(i)} = \frac{(\delta x_i)_k \Gamma_P^{(i)} \Gamma_K^{(i)}}{(\delta x_i)_{k+} \Gamma_P^{(i)} + (\delta x_i)_{k-} \Gamma_K^{(i)}} \quad (5.53)$$

Esta formulación permite especificar directamente condiciones de contorno que signifiquen una discontinuidad en las propiedades del medio, como por ejemplo, obstáculos dentro del campo de flujo, que pueden tratarse como regiones donde la viscosidad tiende a infinito. La ecuación (5.53) da la forma correcta para el flujo difusivo en la interfaz incluso si la difusividad en el nodo del contorno es infinita. Así, para definir una región donde la variable tome un valor constante ϕ_c , se debe asignar a los volúmenes de control que forman dicha región valores de difusividad muy grandes ($\sim 10^{30}$). Luego basta con hacer $\phi = \phi_c$ en cualquier nodo dentro de esa región para que el valor se propague a todos los nodos que la integran. Si P está en un volumen de control adyacente a la región de $\phi = \phi_c$, la difusividad interpolada en la interfaz será

$$\Gamma_k^{(i)} = \frac{(\delta x_i)_k \Gamma_P^{(i)}}{(\delta x_i)_{k-}} \quad (5.54)$$

y el flujo difusivo se reduce a la forma correcta (para un perfil lineal)

$$J = \Gamma_P^{(i)} \frac{\phi_P - \phi_c}{(\delta x_i)_{k-}} \quad (5.55)$$

La interpolación lineal (5.49) no permite definir difusividades infinitas, y en ese caso

se debe anular el coeficiente a_K hacia en el nodo K , y traspasar el flujo difusivo al término fuente de la ecuación.

Por otra parte, para contornos impermeables al flujo de ϕ , basta con asignar difusividad cero al nodo en el contorno, lo cual anula $\Gamma_k^{(i)}$ y J . La interpolación lineal, en cambio aún daría un flujo difusivo no nulo.

5.5 Solución de las Ecuaciones Discretizadas

Al plantear una ecuación de discretización para la variable general ϕ , en cada uno de los nodos de la malla, se obtiene un sistema lineal de ecuaciones que puede resolverse por los métodos convencionales. Los métodos directos (es decir, que no precisan iteración), como la eliminación gaussiana, no resultan prácticos en este caso debido a que para el número de ecuaciones a resolver, la cantidad requerida de operaciones y de capacidad de almacenamiento es enorme (se emplean más de 24.000 volúmenes de control). Además, el almacenamiento completo de la matriz de coeficientes del sistema de ecuaciones es ineficiente, por cuanto esta matriz se caracteriza por contener muy pocos elementos no nulos, en proporción a su tamaño, los cuales tienden a concentrarse hacia la diagonal. Aunque es posible manipular la matriz de modo de minimizar la demanda de almacenamiento, ésta resultaría todavía excesiva para el tamaño de los sistemas que se pretenden resolver, y no se reduce el número de operaciones necesarias.

Se debe recurrir por lo tanto a métodos iterativos, los cuales no necesitan almacenar ningún elemento nulo de la matriz, y requieren una menor cantidad de operaciones. Por otra parte, ya que la conexión entre las ecuaciones para las diferentes variables se hace en forma iterativa, no se justifica un esfuerzo computacional desmedido para resolver un sistema de ecuaciones cuyos coeficientes son sólo aproximados, y deben ser recalculados de una iteración a otra. A estas iteraciones del ciclo completo de resolución de cada una de las variables del sistema (5.1) se las denominará aquí como iteraciones globales, mientras que por iteraciones locales se designarán aquellas realizadas para obtener la solución del sistema lineal para alguna de estas variables en particular. Una iteración global completa consta por tanto de la resolución, a su vez iterativa, de los sistemas de ecuaciones discretizadas para cada variable de la modelación.

Existen numerosos métodos, profusamente tratados en la literatura, para resolver iterativamente sistemas lineales. El método adoptado en este trabajo es uno de los más empleados para este tipo de problemas, y es conocido como método línea-a-línea o iteración Gauss–Seidel por línea. La idea básica es resolver sólo para los nodos a lo largo de una línea de la malla, considerando temporalmente como constantes a los valores de la variable en los demás nodos vecinos. Así, para una línea en dirección x se tiene

$$-a_W\phi_W + a_P\phi_P - a_E\phi_E = a_N\tilde{\phi}_N + a_S\tilde{\phi}_S + a_T\tilde{\phi}_T + a_B\tilde{\phi}_B + b \quad (5.56)$$

donde $\tilde{\phi}_N$, $\tilde{\phi}_S$, etc. corresponden a los valores de ϕ más recientemente calculados en estas posiciones. Las ecuaciones de discretización expresadas en esta forma configuran un sistema tridiagonal para los valores de ϕ a lo largo de la línea, que puede ser resuelto por el algoritmo TDMA. Para esto conviene reemplazar la notación de volumen de control en (5.56) por el índice i que denota la i -ésima posición a lo largo de la línea. De este modo la ecuación (5.56) puede escribirse como

$$-c_i\phi_{i-1} + d_i\phi_i - e_i\phi_{i+1} = f_i \quad (5.57)$$

donde la correspondencia entre los coeficientes c_i , d_i , e_i y f_i con los términos en (5.56) es obvia. Si $i = 1$ e $i = N_x$ designan los nodos en los contornos del dominio de solución para ambos extremos de la línea, los valores de ϕ_i en los nodos interiores $i = 2, 3, \dots, N_x - 1$ se obtienen mediante la relación recursiva

$$\phi_i = P_i\phi_{i+1} + Q_i \quad ; \quad i = N_x - 1, N_x - 2, \dots, 2 \quad (5.58)$$

donde P_i y Q_i se calculan a su vez mediante la recursiones

$$P_i = \frac{e_i}{d_i - c_i P_{i-1}} \quad ; \quad i = 2, 3, \dots, N_x - 1 \quad (5.59)$$

$$Q_i = \frac{f_i + c_i Q_{i-1}}{d_i - c_i P_{i-1}} \quad ; \quad i = 2, 3, \dots, N_x - 1 \quad (5.60)$$

con la condiciones de inicio $P_1 = 0$ y $Q_1 = \phi_1$ Esto último corresponde a una condición de contorno en la cual se prescribe el valor de ϕ en el nodo de contorno (condición de

Dirichlet). Para condiciones que prescriben el valor de la derivada, el coeficiente c_2 es cero, y no se precisa un valor para Q_1 .

Este procedimiento se aplica a cada línea en x , avanzando en dirección y hasta cubrir un plano xy completo. Luego la dirección de barrido se invierte y las mismas líneas se resuelven en orden reverso hasta regresar a la primera línea resuelta. A continuación el proceso se repite resolviendo por líneas en y , y barriendo el plano en dirección x en ambos sentidos. Las ecuaciones son en este caso

$$-a_S\phi_S + a_P\phi_P - a_N\phi_N = a_E\tilde{\phi}_E + a_W\tilde{\phi}_W + a_T\tilde{\phi}_T + a_B\tilde{\phi}_B + b \quad (5.61)$$

Se pasa luego al siguiente plano xy en la dirección z , repitiéndose el mismo procedimiento. De este modo se avanza resolviendo todos los planos xy para ambos sentidos de barrido en z , lo cual completa una iteración. La resolución en ambos sentidos para las tres direcciones tiene por objeto permitir que la información de las condiciones de contorno se propague hacia el interior del campo con la misma rapidez para todas ellas.

5.6 Determinación del Campo de Flujo

Las ecuaciones (5.1) son analíticamente suficientes para calcular el campo de flujo. No obstante, es bien conocida la condición especial que se presenta con las ecuaciones de momentum y de continuidad para bajos números de Mach, debido por una parte, al gradiente de presión en las fuentes de momentum, y por otra parte, a la débil conexión que se establece entre la presión y la densidad, la cual pasa a ser una función básicamente de la temperatura. Luego, al tratar con casos donde el campo de flujo se puede considerar isotérmico, la densidad se torna constante y la ecuación de continuidad se reduce a la condición de divergencia cero:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (5.62)$$

Este hecho representa una dificultad para resolver iterativamente las ecuaciones (5.1) para una variable a la vez, ya que la ecuación de continuidad en la forma (5.62) no contiene una variable dependiente adicional a las de las ecuaciones de momentum, sino que actúa como una condición de compatibilidad para el campo de velocidades. No se

cuenta entonces con una ecuación explícita para calcular la presión, sino que la distribución de presiones está implícita en la conexión entre las ecuaciones de momentum y de continuidad, puesto que el campo de presión correcto dará origen a un campo de velocidades que satisface la ecuación de continuidad.

Aunque teóricamente este problema sólo debería existir si la densidad es absolutamente constante, aún persiste si la densidad cambia debido fundamentalmente a variaciones de temperatura. Cuando ésta es variable, la ecuación de continuidad contiene las derivadas de la densidad, de manera que en principio esta ecuación puede acoplarse a las de momentum, y resolverla para la densidad como variable dependiente, obteniéndose luego la presión a partir de una ecuación de estado con (5.1g). Sin embargo, la utilización de la densidad como una variable dependiente principal del sistema de ecuaciones no resulta conveniente desde el punto de vista numérico, debido a la diferencia en órdenes de magnitud entre los gradientes de densidad y los de presión. Así, para una ecuación de estado como (5.1g) se tiene

$$p = \frac{c^2}{\gamma} \rho \quad (5.63)$$

siendo c la velocidad del sonido y γ el cociente entre los calores específicos a presión y volumen constantes. Para un flujo casi incompresible las variaciones de c son pequeñas, y por lo tanto las diferencias espaciales finitas de p y ρ pueden relacionarse como

$$\Delta p = \frac{c^2}{\gamma} \Delta \rho \quad (5.64)$$

Debido al elevado valor del coeficiente de proporcionalidad c^2/γ , la evaluación de los gradientes de presión con una precisión suficiente para su utilización en las ecuaciones de momentum implica el cálculo de los gradientes de densidad con una precisión no siempre obtenible en un computador, de modo que los errores de truncación en la representación numérica de la densidad se amplifican al evaluar el gradiente de presión.

Por lo anterior, el tomar a la densidad como una variable dependiente principal no resulta conveniente. Otra alternativa la constituyen los métodos de vorticidad, los cuales eliminan la presión de las ecuaciones de momentum aplicándoles el operador rotacional. El resultado en tres dimensiones, es una ecuación de transporte para el vector de vorticidad, que substituye a la de momentum. Adicionalmente se introducen

dos funciones de corriente^[18] que determinan el vector de velocidad. Aunque este método prescinde del cálculo de la presión, la complejidad del problema no disminuye (e incluso puede aumentar), puesto que ahora es necesario resolver ecuaciones diferenciales para las funciones de corriente, calcular a partir de ellas las componentes de velocidad y resolver las ecuaciones para las tres componentes del vector de vorticidad. Adicionalmente, la especificación de condiciones de contorno en términos de vorticidad y funciones de corriente resulta más complicada que cuando se hace directamente en función de las velocidades.

Por lo tanto, el cálculo directo del campo de presión es la alternativa más ventajosa. Para esto es necesario derivar alguna ecuación o procedimiento que permita obtener la presión, en base a la información implícita en las ecuaciones de momentum y continuidad. Una posibilidad en este sentido, es aplicar el operador de divergencia a la ecuación de momentum, e insertar en la forma resultante la ecuación de continuidad. Con esto se llega a una ecuación para la presión en la forma de una ecuación de Poisson, que puede resolverse junto con las de momentum. Sin embargo, la discretización de esta ecuación no está exenta de problemas, debido a que no se puede asegurar que los flujos de masa implícitos en los términos de velocidad que aparecen, sean diferenciados en forma conservativa, como ocurre con las otras ecuaciones de transporte, y además algunos términos que aparecen tanto en esta ecuación como en las de momentum, pueden quedar diferenciados en forma inconsistente, afectando la precisión y la estabilidad de la solución.

Un procedimiento que ha demostrado conectar eficientemente las ecuaciones de momentum y continuidad es el método SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) de Patankar y Spalding [24]. Este es método que se aplica en este trabajo, y su descripción se da en 5.6.2.

5.6.1 Mallas Desplazadas

La evaluación numérica del gradiente de presión para un volumen de control en torno a un nodo P como el de la figura 5.4, implica calcular la diferencia entre los valores de presión en caras opuestas del mismo: $p_k - p_j$. Esta cantidad (multiplicada por el área de las caras) representa la fuerza neta que la presión ejerce sobre el volumen de control en la dirección x_i , y el grado de precisión que pueda lograrse en su evaluación tiene una incidencia importante en la exactitud de la solución para el campo de

velocidades.

La diferencia $p_k - p_j$ debe formularse en función de las presiones almacenadas en los nodos, lo cual, al aplicar una interpolación lineal para p_k y p_j conduce a

$$p_k - p_j = (1 - f_k)p_K - f_j p_J - (1 - f_k - f_j)p_P \quad (5.65)$$

con $f_k = (\delta x_i)_{k+}/(\delta x_i)_k$ y $f_j = (\delta x_i)_{j+}/(\delta x_i)_j$. Se observa que el coeficiente que multiplica a p_P es la resta de los que multiplican a p_K y p_J , y para la situación que generalmente se da, en que la geometría de la malla varía sólo gradualmente de un volumen de control al siguiente, dicho término resulta mucho menor que los otros dos, de modo que $p_k - p_j$ pasa a ser función esencialmente de las presiones en los nodos K y J . El caso extremo se tiene cuando las fronteras k y j quedan en el punto medio entre los nodos, para el cual la expresión (5.65) se reduce a $p_k - p_j = (p_K - p_J)/2$. Esto significa que el gradiente de presión se calcula con la diferencia entre las presiones en nodos alternados de la malla, y no entre nodos adyacentes, lo que implica que el grado de resolución que se tiene para la representación Δp es inferior al de la malla misma, afectándose adversamente la precisión del cálculo.

Una situación similar se presenta con la discretización de la ecuación de continuidad, donde es necesario evaluar las diferencias de velocidad en las caras del volumen de control. Si las velocidades son almacenadas en los nodos P, E, W , etc., su interpolación en las posiciones e, w , etc., dará origen al cálculo de diferencias de velocidad entre nodos alternados de la malla.

Debido a lo anterior, se utiliza un sistema de mallas desplazadas, que se muestra en la figura 5.5. La presión y las demás variables escalares son calculadas y almacenadas en el nodo P , mientras que las componentes u, v y w de la velocidad se calculan cada una en una malla desplazada en la dirección correspondiente. Para el grupo completo de variables en cierta posición se tienen por lo tanto cuatro volúmenes de control parcialmente traslapados: la celda centrada en P (VC_c), y una celda propia para cada una de las componentes de la velocidad (VC_u, VC_v y VC_w).

Con esto se logra que los gradientes de presión para la ecuación de momentum integrada en estos volúmenes de control desplazados, queden calculados con diferencias entre nodos adyacentes, ya que como puede verse en la figura, las fronteras entre las que debe tomarse la diferencia de presiones en las celdas para las velocidades coinciden ahora con las posiciones P, E, W , etc., en las que se almacena la presión. De

igual modo, para la integración de la ecuación de continuidad en el volumen de control VC_c se dispone de las velocidades directamente en las fronteras del mismo, y las diferencias de velocidad resultan también evaluadas entre posiciones adyacentes.

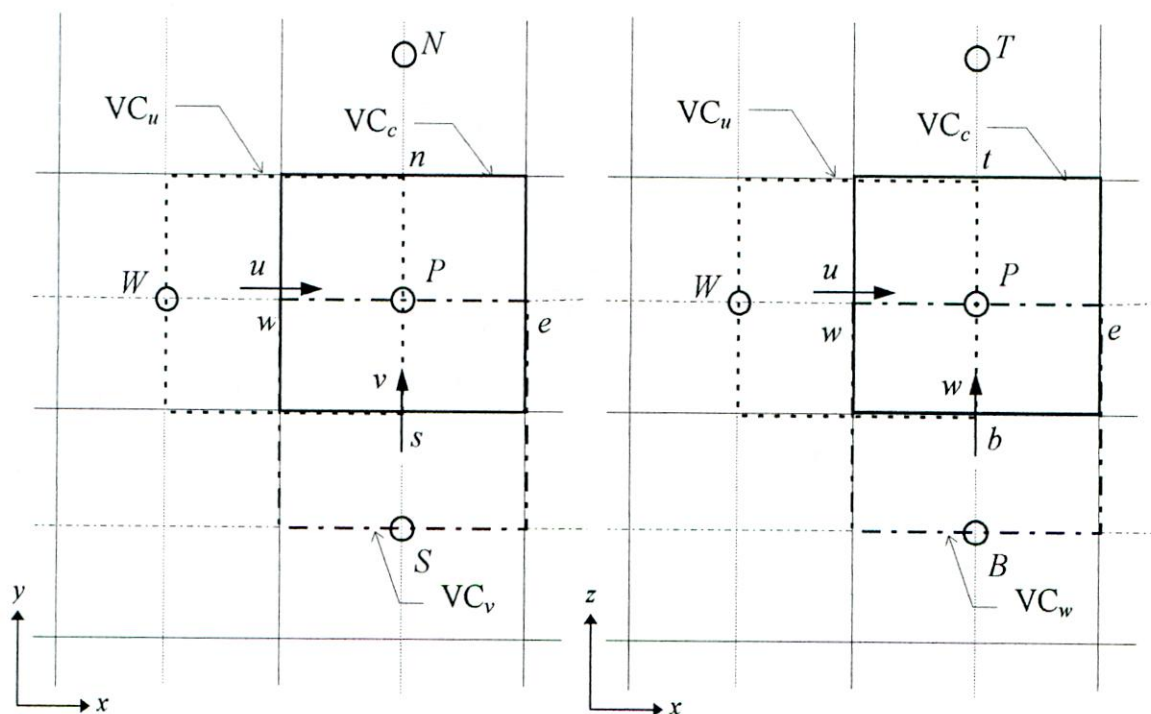


Figura 5.5 Mallas desplazadas para las componentes de velocidad.

5.6.2 Método SIMPLE

El método SIMPLE obtiene el campo de flujo a partir de una estimación inicial del campo de presión, mediante correcciones iterativas de las velocidades y la presión hasta lograr que se cumplan las ecuaciones de momentum y continuidad.

La discretización de las ecuaciones de momentum sigue las mismas líneas que lo expuesto en 5.2 y 5.3, con la diferencia que para cada una se emplea una malla desplazada. Por lo tanto, en las ecuaciones de discretización el nodo central corresponde en estos casos a alguna de las posiciones intermedias e , w , n , s , t o b . Así, para la ecuación de discretización de u en torno a la posición e se obtiene

$$a_e^u u_e = \sum_{vec} a_{vec}^u u_{vec} + b - (p_E - p_P) \Delta A_x \quad (5.66)$$

donde la suma se refiere a las seis posiciones vecinas que rodean a e . El término b contiene como antes la integración en volumen de las fuentes, excepto el gradiente de presión, el que se ha escrito explícitamente en el último término de (5.66). Del mismo modo, las ecuaciones de discretización para v en torno a n , y para w en torno a t son

$$a_n^v v_n = \sum_{vec} a_{vec}^v v_{vec} + b - (p_N - p_P) \Delta A_y \quad (5.67)$$

$$a_t^w w_t = \sum_{vec} a_{vec}^w w_{vec} + b - (p_T - p_P) \Delta A_z \quad (5.68)$$

Ya que el campo de presión no es conocido, se supone un campo estimativo p^* , y las ecuaciones (5.66) a (5.68) son resueltas con esta presión supuesta, de manera que sus soluciones son sólo estimaciones u^* , v^* , w^* , para las velocidades:

$$a_e^u u_e^* = \sum_{vec} a_{vec}^u u_{vec}^* + b - (p_E^* - p_P^*) \Delta A_x \quad (5.69a)$$

$$a_n^v v_n^* = \sum_{vec} a_{vec}^v v_{vec}^* + b - (p_N^* - p_P^*) \Delta A_y \quad (5.69b)$$

$$a_t^w w_t^* = \sum_{vec} a_{vec}^w w_{vec}^* + b - (p_T^* - p_P^*) \Delta A_z \quad (5.69c)$$

El valor de p^* debe ser corregido de modo que las velocidades satisfagan la ecuación de continuidad. Para esto se introduce un término de corrección de presión p' , tal que el campo de presión correcto se obtenga como

$$p = p^* + p' \quad (5.70)$$

Este cambio de presión producirá a su vez velocidades corregidas

$$u = u^* + u' \quad (5.71a)$$

$$v = v^* + v' \quad (5.71b)$$

$$w = w^* + w' \quad (5.71c)$$

donde u' , v' , w' son los correspondientes términos de corrección.

Restando las ecuaciones (5.69a) de (5.66), (5.69b) de (5.67) y (5.69c) de (5.68) se tiene

$$a_e^u u'_e = \sum_{vec} a_{vec}^u u'_{vec} - (p'_E - p'_P) \Delta A_x \quad (5.72a)$$

$$a_n^v v'_n = \sum_{vec} a_{vec}^v v'_{vec} - (p'_N - p'_P) \Delta A_y \quad (5.72b)$$

$$a_i^w w'_i = \sum_{vec} a_{vec}^w w'_{vec} - (p'_T - p'_P) \Delta A_z \quad (5.72c)$$

No es conveniente intentar resolver inmediatamente estas ecuaciones para las correcciones de velocidad, puesto que en las sumas sobre las posiciones vecinas, las correcciones de velocidad contenidas en ellas involucran a su vez sus propios vecinos, de modo que la ecuación final de corrección de velocidad contendrá las correcciones de presión para todos los nodos de la malla, tornándose excesivamente complicada. De hecho, tal tratamiento equivaldría a una resolución directa del campo de flujo, que obtendría las velocidades y presión correctas en un sólo paso, sin necesidad de iteración. Ya que de todos modos el acoplamiento entre estas ecuaciones y las restantes ecuaciones de transporte debe hacerse en forma iterativa, es preferible simplificar las ecuaciones (5.72) y obtener sólo valores aproximados para las correcciones de presión y velocidad, las cuales tenderán hacia la solución exacta a medida que la iteración progrese. Por lo tanto, al omitir las sumas sobre los vecinos en las ecuaciones (5.72) se obtiene

$$u'_e = \frac{\Delta A_x}{a_e^u} (p'_P - p'_E) \quad (5.73a)$$

$$v'_n = \frac{\Delta A_y}{a_n^v} (p'_P - p'_N) \quad (5.73b)$$

$$w'_i = \frac{\Delta A_z}{a_i^w} (p'_P - p'_T) \quad (5.73c)$$

y el cálculo de las correcciones de velocidad es directo una vez obtenida la corrección de presión. Es posible deducir una ecuación para esta variable a partir de la ecuación de continuidad. La forma discretizada de ésta corresponde a la ecuación (5.13), la cual expandida queda

$$(\rho_P - \rho_P^0) \frac{\Delta V}{\Delta t} + [(\rho u)_e - (\rho u)_w] \Delta A_x + [(\rho v)_n - (\rho v)_s] \Delta A_y + [(\rho w)_t - (\rho w)_b] \Delta A_z = S_{mP} \Delta V \quad (5.74)$$

Si ahora se substituyen las velocidades en (5.74) por sus expresiones en términos de la corrección de presión:

$$u_e = u_e^* + \frac{\Delta A_x}{a_e^u} (p'_P - p'_E) \quad ; \quad u_w = u_w^* + \frac{\Delta A_x}{a_w^u} (p'_W - p'_P) \quad (5.75a)$$

$$v_n = v_n^* + \frac{\Delta A_y}{a_n^v} (p'_P - p'_N) \quad ; \quad v_s = v_s^* + \frac{\Delta A_y}{a_s^v} (p'_S - p'_P) \quad (5.75b)$$

$$w_t = w_t^* + \frac{\Delta A_z}{a_t^w} (p'_P - p'_T) \quad ; \quad w_b = w_b^* + \frac{\Delta A_z}{a_b^w} (p'_B - p'_P) \quad (5.75c)$$

se llega después de agrupar convenientemente los términos a la ecuación de discretización para p' :

$$a_P p'_P = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + a_T p'_T + a_B p'_B + b \quad (5.76)$$

donde

$$a_E = \rho_e \frac{(\Delta A_x)^2}{a_e^u} \quad (5.77a)$$

$$a_W = \rho_w \frac{(\Delta A_x)^2}{a_w^u} \quad (5.77b)$$

$$a_N = \rho_n \frac{(\Delta A_y)^2}{a_n^v} \quad (5.77c)$$

$$a_S = \rho_s \frac{(\Delta A_y)^2}{a_s^v} \quad (5.77d)$$

$$a_T = \rho_t \frac{(\Delta A_z)^2}{a_t^w} \quad (5.77e)$$

$$a_B = \rho_b \frac{(\Delta A_z)^2}{a_b^w} \quad (5.77f)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B \quad (5.77g)$$

$$b = (\rho_p^0 - \rho_p) \frac{\Delta V}{\Delta t} + [(\rho u^*)_w - (\rho u^*)_e] \Delta A_x + [(\rho v^*)_s - (\rho v^*)_n] \Delta A_y \\ + [(\rho w^*)_b - (\rho w^*)_t] \Delta A_z + S_{mP} \Delta V \quad (5.77h)$$

La secuencia de cálculos para resolver el campo de flujo consta entonces básicamente de los siguientes pasos:

1. Inicializar el campo de presión con una distribución estimada p^* .
2. Resolver las ecuaciones de momentum (5.69) para obtener u^* , v^* y w^* .
3. Resolver la ecuación (5.76) para la corrección de presión p' .
4. Calcular la presión corregida p sumando p' a p^* .
5. Calcular las velocidades u , v y w corregidas según las ecuaciones (5.75).
6. Resolver las ecuaciones de transporte para las otras variables que influyen en el campo de flujo: k , ε y T .
7. Volver al paso 2 y repetir el proceso tomando la presión corregida p como campo inicial p^* hasta lograr convergencia de todas las variables.

5.7 Condiciones de Contorno

Ya que la malla se define de modo que los nodos extremos queden exactamente sobre los contornos de dominio de solución, es directo especificar condiciones de contorno que prescriben valores de la variable en estos puntos. Los valores asignados a ellos permanecerán constantes durante todo el cálculo. Para condiciones de contorno que fijan el valor de la derivada de ϕ , se utiliza la práctica usual de anular, en la ecuación discretizada, el coeficiente que conecta a los nodos interiores con los nodos

en este contorno, e incluir en el término fuente el flujo difusivo cuando existe.

Además, se pueden establecer condiciones de contorno en el interior del campo (como por ejemplo, fijar velocidad cero en obstáculos o velocidades de descarga de chimeneas) asignando en la ecuación para estos volúmenes de control, un valor muy grande al coeficiente a_p , junto con un múltiplo igualmente grande del valor a fijar a la constante b . Así, si ϕ^* es el valor a asignar, se hace

$$a_p = 10^{30} \quad \text{y} \quad b = 10^{30} \phi^*$$

con lo que se consigue que b sea dominante en el lado derecho de la ecuación discretizada, la cual se reduce entonces a $\phi = \phi^*$. Por otra parte, puesto que la interpolación usada para los coeficientes de difusión Γ permite tratar correctamente discontinuidades en estos valores, es también posible establecer regiones dentro del campo de solución en las cuales $\Gamma = 10^{30}$. Con esto se propaga el valor fijado en un contorno exterior a todos los volúmenes de control que tengan esta propiedad. Los obstáculos al flujo, como edificios o colinas en las aplicaciones presentadas en el capítulo 7 se definieron de este modo, asignando un valor de 10^{30} a la viscosidad dentro de ellos. Este procedimiento resulta más eficiente que aplicar $a_p = 10^{30}$, ya que las viscosidades son asignadas a estas celdas sólo al principio del cálculo, mientras que con el segundo método es necesario cambiar en cada iteración los valores de a_p calculados en todas las celdas que integran las regiones sólidas por 10^{30} .

5.7.1 Funciones de Pared

Para puntos situados muy próximos a contornos sólidos es necesario introducir funciones de pared, para describir de mejor forma los gradientes que se dan en dichas posiciones, o porque las condiciones locales difieren de las que se dan en el flujo libre. El método $k-\varepsilon$, en la forma en que aparece en las ecuaciones (5.1), es aplicable sólo en regiones con elevados números de Reynolds turbulentos ($Re_t = \mu_t/\mu$), y no puede aplicarse directamente en la vecindad de paredes, donde los efectos viscosos no son despreciables. Al introducir estas funciones para los efectos de pared, se supone que^[29] la velocidad tangencial a la pared, u_{tg} , fuera de la subcapa laminar sigue la ley del perfil logarítmico

$$\frac{u_{tg}}{u_*} = \frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{z^+}{z_0^+} \right) \quad (5.78)$$

donde

$$z^+ = \frac{u_* z}{\nu} \quad (5.79)$$

con z la distancia a la pared y ν la viscosidad cinemática laminar. z_0^+ es el parámetro de rugosidad adimensionalizado en la forma (5.79). Para la subcapa laminar ($z^+ < 11,63$) el perfil de velocidad se considera lineal:

$$u_{lg} = u_* z^+ \quad (5.80)$$

Se supone adicionalmente que en estas zonas la turbulencia está en equilibrio local, de modo que la producción G iguala a la disipación ε . Dado que en G predomina el gradiente normal a la pared para la velocidad, se tiene

$$\mu_t \left(\frac{\partial u_{lg}}{\partial z} \right)^2 = \rho \varepsilon \quad (5.81)$$

Al reemplazar ε en función de la energía turbulenta k , se obtiene

$$\left(\mu_t \frac{\partial u_{lg}}{\partial z} \right)^2 = C_\mu \rho^2 k^2 \quad (5.82)$$

A su vez, $\mu_t(\partial u_{lg}/\partial z)$ es el esfuerzo de corte τ_w en la región próxima a la pared, de modo que k se aproxima a

$$k_c = \frac{\tau_w / \rho}{C_\mu^{1/2}} = \frac{u_*^2}{C_\mu^{1/2}} \quad (5.83)$$

De forma similar se obtiene para ε

$$\varepsilon_c = \frac{u_*^3}{\kappa z} \quad (5.84)$$

Combinando las ecuaciones (5.83) y (5.84), el esfuerzo de corte total en la pared, es para la capa límite turbulenta

$$\tau_w = \frac{\rho \kappa C_\mu^{1/4} k^{1/2}}{\ln(z^+ / z_0^+)} u_{lg} \quad (5.85)$$

Las componentes de este esfuerzo para las direcciones tangentes a la pared se obtienen por medio del ángulo que u_{tg} forma con respecto a esas coordenadas, y se incorporan como fuentes (negativas) a las ecuaciones de momentum en estas direcciones. Para la subcapa laminar se aplica directamente la ley de viscosidad de Newton.

El perfil lineal en la subcapa laminar rige sólo para superficies lisas, con^[4] $z_0^+ < 0,13$ aproximadamente. Para superficies de elevada rugosidad ($z_0^+ > 2$) es difícil plantear una subcapa laminar general, debido a que las velocidades se hallan muy perturbadas por los elementos de rugosidad, y el patrón de flujo a este nivel es específico para la superficie dada, dependiendo de la geometría y la distribución de los elementos de rugosidad. No obstante, fuera de esta capa sigue siendo válido el perfil logarítmico, por lo que basta con ubicar los nodos a una distancia suficiente de la pared para que se encuentren en la capa límite turbulenta. Perfiles de velocidad experimentales^[4] sugieren como límite inferior para esta capa la distancia a la pared en la que se alcanza $u_{tg}/u_* \approx 5$, lo que de acuerdo al perfil logarítmico equivale a $z \approx 7,4z_0$.

Para ε se establece el valor en los nodos adyacentes a las paredes directamente en base a la ecuación (5.84). Para la ecuación de k se reemplaza la viscosidad turbulenta en su fuente linealizada (5.40) en términos de las funciones de pared (5.78) y (5.83) con lo cual se llega a

$$S_2 = -\frac{1}{\kappa z} \rho C_\mu^{3/4} k^{1/2} \ln\left(\frac{z^+}{z_0^+}\right) \quad ; \text{ para } z^+ > 11,63 \quad (5.86a)$$

$$S_2 = -\frac{1}{z} \rho C_\mu^{3/4} k^{1/2} z^+ \quad ; \text{ para } z^+ \leq 11,63 \quad (5.86b)$$

En cuanto a la temperatura, se puede derivar una función de pared mediante argumentos similares a los conducentes al perfil logarítmico de velocidad. En la región próxima a la pared se puede postular que la diferencia de temperatura entre el fluido y la pared, $T - T_w$, depende de: a) el flujo de calor desde la pared, q_w (definido, por conveniencia, por unidad de área); b) la distancia desde la pared; c) propiedades del fluido: densidad ρ , calor específico C_p y conductividad térmica λ ; y d) el campo de velocidades, que a su vez depende de τ_w , z , ρ y ν . Por análisis dimensional se llega a la relación general

$$\frac{u_*(T - T_w)}{q_w / (\rho C_p)} = f\left(\frac{u_* z}{\nu}, \frac{\rho C_p \nu}{\lambda}\right) \quad (5.87)$$

donde el segundo grupo adimensional en la función es el número de Prandtl molecular. En la capa límite turbulenta los efectos moleculares no tienen gran influencia en el perfil de temperatura. En tal caso el gradiente de temperatura depende sólo de q_w , u_* y z , y el análisis dimensional da

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{-q_w / (\rho C_p)}{\kappa_T u_* z} \quad (5.88)$$

donde κ_T es una constante empírica, y el signo negativo se ha insertado debido a que q_w se definió como positivo cuando corresponde a calor transferido desde la pared. El término $-q_w / (\rho C_p u_*)$ tiene dimensiones de temperatura, y es llamado temperatura de fricción T_* , (tal como se definió a continuación de las ecuaciones (4.31)) en analogía con la velocidad de fricción u_* . Para condiciones turbulentas $q_w / (\rho C_p)$ corresponde a $\overline{u'_{nr} T'}$, siendo u_{nr} la componente de la velocidad normal a la pared.

Al suponer una analogía entre la transferencia turbulenta de momentum y de calor se puede establecer la relación

$$\frac{\partial T / \partial z}{\overline{u'_{nr} T'}} = \text{Pr}_t \frac{\partial u_{ig} / \partial z}{\overline{u'_{nr} u'_{ig}}} = \text{Pr}_t \frac{\partial u_{ig} / \partial z}{-\tau_w / \rho} \quad (5.89)$$

donde Pr_t es el número de Prandtl turbulento, que puede considerarse constante dentro de la capa límite. Se tiene entonces

$$\frac{dT}{T_*} = \frac{\text{Pr}_t}{u_*} du \quad (5.90)$$

Al integrar esta ecuación empleando las funciones (5.78) y (5.80) para el perfil de velocidad se obtiene la función de pared para la temperatura:

$$\frac{T - T_w}{T_*} = \text{Pr}_t z^+ \quad ; \quad \text{para } z < z_L^+ \quad (5.91a)$$

$$\frac{T - T_w}{T_*} = \text{Pr}_t \left[z_L^+ + \frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{z^+}{z_L^+} \right) \right] \quad ; \quad \text{para } z \geq z_L^+ \quad (5.91b)$$

donde z_L^+ es el valor de z^+ para el cual se tiene la transición de la subcapa laminar a la turbulenta. El valor adoptado para este parámetro es 11,63.

6 Programa Computacional

6.1 Descripción General

El programa computacional para la solución del campo de flujo y demás variables de la modelación se construyó como un programa general para resolver sistemas de ecuaciones de transporte de la forma (5.3), con el fin de permitir el análisis de problemas diversos sin necesidad de grandes modificaciones en el código. Por consiguiente, sus posibilidades de aplicación van más allá de los casos presentados en el capítulo 7, y ha sido probado para otras condiciones de borde, incluyendo flujos confinados y problemas de conducción de calor en sólidos, al desactivar la resolución del campo de flujo. En lo que sigue se da una descripción general de la estructura del programa y la función que cumplen sus componentes, los detalles concernientes a las definiciones de constantes y parámetros de control, argumentos de las subrutinas, etc., se dan en el código mismo.

El código está estructurado en tres bloques principales, todos escritos en lenguaje FORTRAN:

- el programa SKER3D.FOR (o TSKER3D.FOR)
- la subrutina USER
- la biblioteca de subrutinas SKER3D.LIB

SKER3D.FOR contiene la versión en estado estacionario de las ecuaciones de transporte. Soluciones en estado transiente son obtenidas por TSKER3D.FOR. Esta separación tiene por objeto optimizar el uso de la memoria, ya que sólo en el segundo caso se requieren matrices para retener el valor de las variables en el paso de tiempo anterior. En lo demás, el proceso que se sigue en ambos programas es esencialmente el mismo, con la diferencia obvia que TSKER3D contiene un ciclo para el avance de la integración en el tiempo, y los términos de discretización temporal en las ecuaciones. Luego, todo lo que se dice a continuación de SKER3D es válido también para TSKER3D.

Los tres módulos mencionados deben ser ligados para construir el programa ejecutable que resuelve un problema específico definido. SKER3D.FOR contiene el programa principal que controla la secuencia de cálculos, las subrutinas encargadas de resolver las ecuaciones de transporte, parte de las subrutinas para la salida de

resultados, y otras subrutinas auxiliares. Este programa es invariable para cualquier problema a resolver, de modo que no debe ser compilado en cada ocasión, sino que a su código objeto se liga la subrutina USER. Esta subrutina incluye las instrucciones que especifican el problema en particular a ser resuelto (variables a resolver, condiciones de contorno, geometría de la malla, etc.). A su vez, la mayoría de estas instrucciones corresponden a funciones proporcionadas por la biblioteca SKER3D.LIB, por lo que la definición de un problema dado consiste principalmente en disponer adecuadamente, dentro de USER, las llamadas a estas subrutinas para las operaciones que sean necesarias.

Después de la ejecución tres archivos de salida son generados:

- RESULT.SKE: es un archivo en código ASCII, que contiene los resultados finales de la iteración, para todas las variables cuya salida formateada haya sido especificada en USER.
- DATOS.SKE: es un archivo binario que contiene los resultados para todas las variables y propiedades del fluido. Este archivo puede ser leído al comienzo de otra ejecución, cuando así se ordene en USER, y los campos de las variables se inicializan con los resultados de una ejecución anterior.
- MONIT.SKE: en este archivo se escriben, para cada iteración, los residuos totales de las ecuaciones resueltas, y los valores de las variables en un nodo de monitoreo especificado, para controlar la convergencia de la solución.

Se ha podido implementar este programa en un computador personal, a pesar de las limitaciones de estos equipos para manejar programas extensos, utilizando un compilador y un administrador de memoria que permiten generar y cargar el código ejecutable en la memoria extendida. Ya que el programa fue escrito cifiéndose estrictamente al FORTRAN standard (77), podría ser instalado directamente en computadores mayores.

Adicionalmente el código incluye los programas PLOT y GPLOT que permiten representar los resultados gráficamente en el monitor (o generar un archivo para graficador) mediante campos vectoriales, para las velocidades, y líneas de contorno para las propiedades escalares (la diferencia entre ambos programas es únicamente el tamaño máximo de matrices que manejan). Los datos a graficar se toman también del

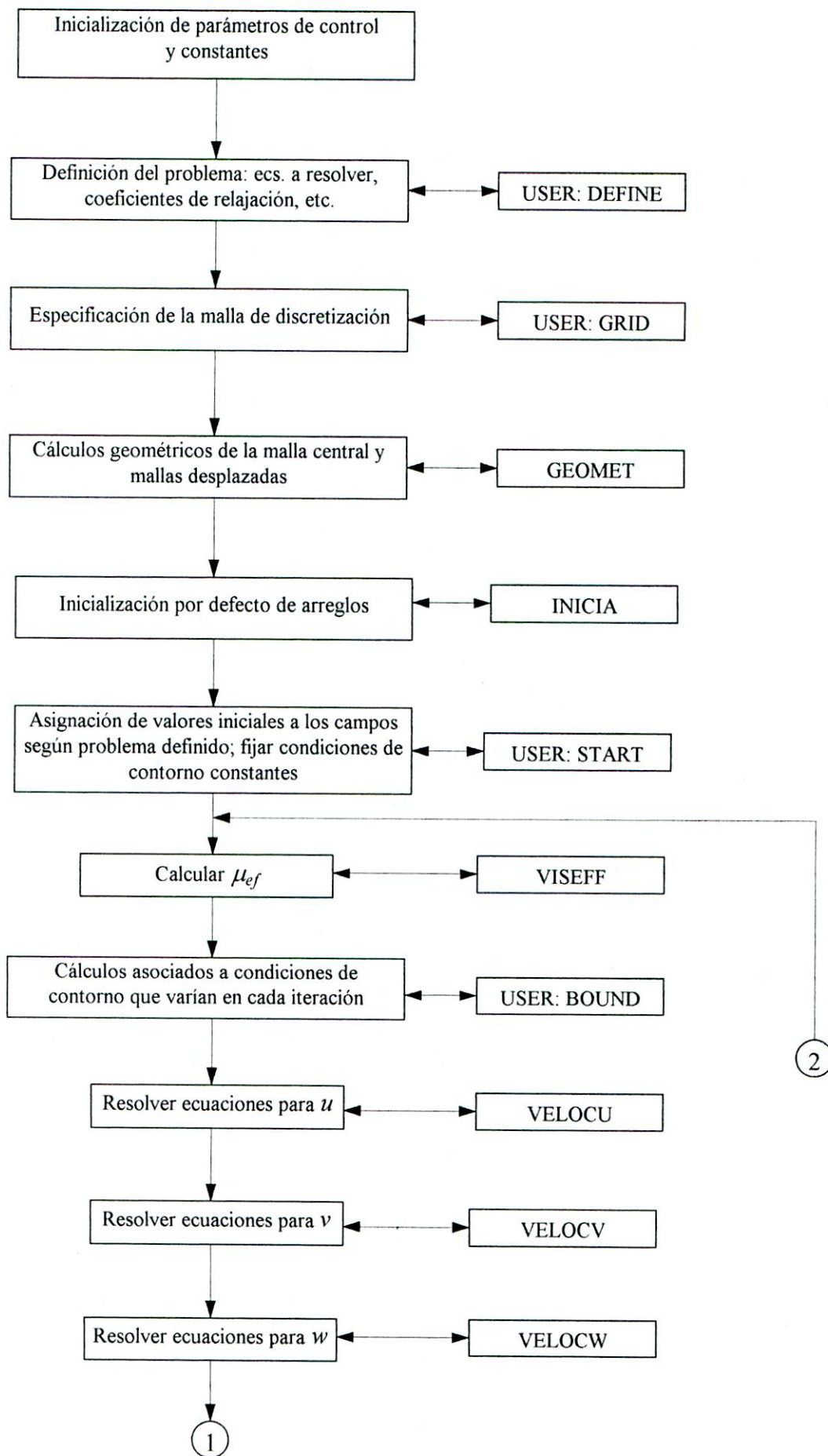
archivo binario de resultados DATOS.SKE. Los gráficos vectoriales en el capítulo 7 fueron generados por GPLOT.

6.2 Programa SKER3D

Un diagrama de flujo simplificado de SKER3D se halla en la figura 6.1, donde se han indicado las llamadas a algunas subrutinas del programa y a USER. Los procesos en que aparece USER (como USER:DEFINE) corresponden a diferentes puntos de entrada a esta subrutina, a través de instrucciones **ENTRY** de FORTRAN. Cada uno de estos puntos de entrada define una sección dentro de USER donde se especifican los comandos para una operación específica del proceso de resolución.

Las subrutinas de SKER3D son las siguientes:

- GEOMET: efectúa cálculos asociados a la geometría de la malla: distancias entre nodos, fracciones de traslape de las mallas desplazadas, coeficientes de interpolación lineal en base a las posiciones de las fronteras de las celdas con respecto a los nodos, etc.
- INICIA: inicializa los arreglos para las variables, propiedades y otras cantidades según valores por defecto.
- CALCPH: formula el sistema de ecuaciones discretizadas para cualquier variable ϕ que se resuelva sobre la malla central, y llama a SOLVE para resolverlo.
- DIFLOW: aplica el esquema de discretización de ley de potencia. Las subrutinas CALCPH, VELOCU, VELOCV y VELOCW utilizan a DIFLOW para calcular los coeficientes de sus sistemas de ecuaciones.
- PRHEAD: subrutina auxiliar para dar formato al archivo MONIT.SKE
- PRIMON: escribe los valores de las variables en el nodo de monitoreo al archivo MONIT.SKE.
- PRRSOR: escribe los valores de las sumas de residuos de todas las ecuaciones para cada variable, en el archivo MONIT.SKE.
- SIMPLE: formula el sistema de ecuaciones discretizadas para la corrección de presión p' , y luego de resolverlo mediante SOLVE, corrige la presión y las velocidades.



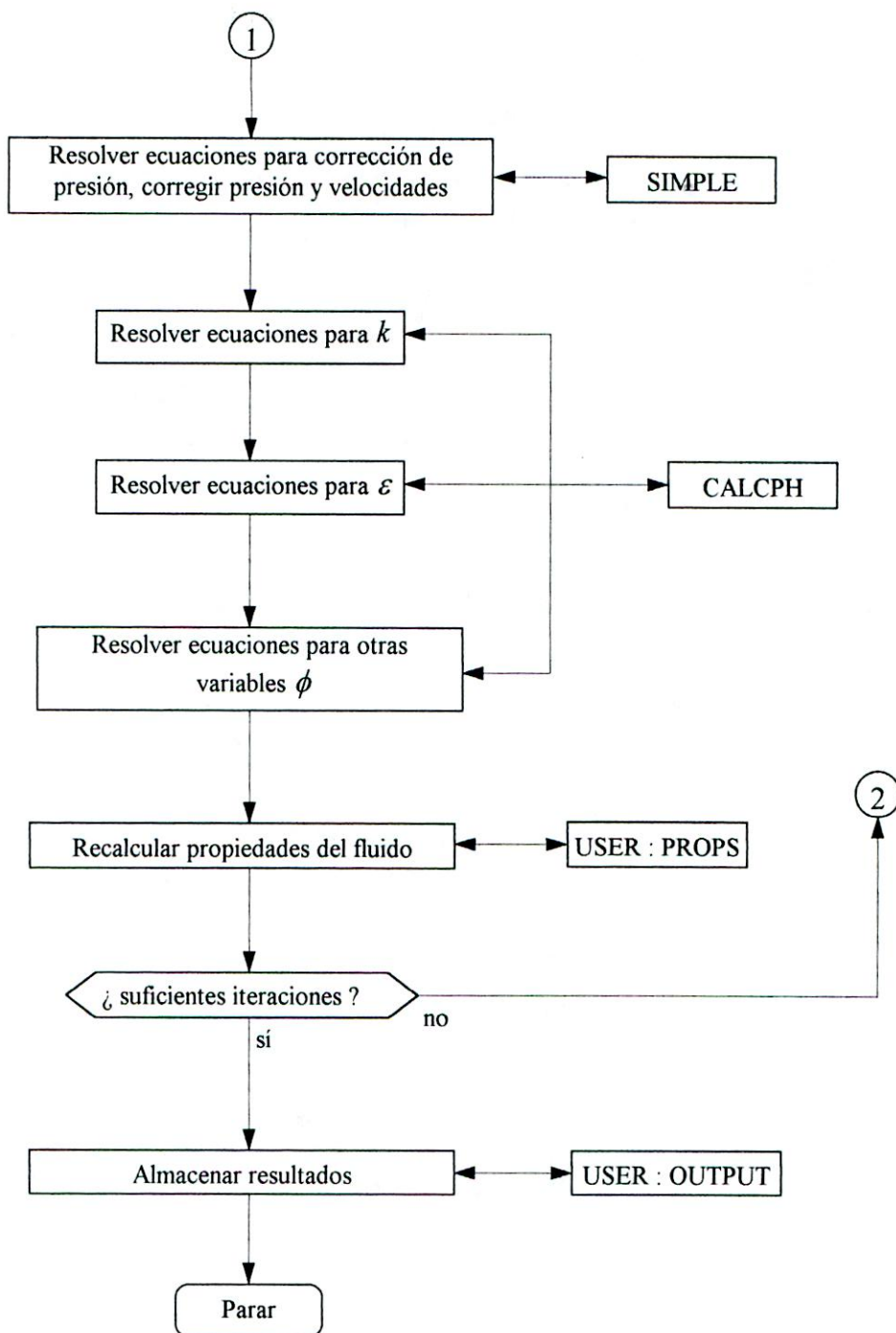


Figura 6.1 Diagrama de flujo básico del programa SKER3D

SOLVE: resuelve el sistema de ecuaciones mediante el método línea-a-línea y el algoritmo TDMA.

- VELOCU: formula el sistema de ecuaciones discretizadas para la componente u de la velocidad sobre la malla desplazada en x , y llama a SOLVE para resolverlo.
- VELOCV: formula el sistema de ecuaciones discretizadas para la componente v de la velocidad sobre la malla desplazada en y , y llama a SOLVE para resolverlo.
- VELOCW: formula el sistema de ecuaciones discretizadas para la componente w de la velocidad sobre la malla desplazada en z , y llama a SOLVE para resolverlo.
- WISEFF: calcula la viscosidad efectiva, sumando a la viscosidad laminar la viscosidad turbulenta obtenida en base a k y ε .

Para TSKER3D la secuencia dada en el diagrama de flujo se ejecuta para cada intervalo Δt de la integración en el tiempo. Las subrutinas en este programa tienen los mismos nombres, y se agrega sólo una más: MARCH, que transfiere los valores de las variables al final de las iteraciones para un paso de tiempo, a los arreglos que representan los valores iniciales para el siguiente intervalo de tiempo.

6.3 Subrutina USER

En la subrutina USER se incluyen todas las instrucciones que definen el problema a resolver, lo cual significa básicamente indicar qué variables se resolverán, definir las propiedades del medio, dar valores iniciales y condiciones de contorno. Para la mayoría de estas operaciones se han escrito subrutinas utilitarias, que se encuentran en la biblioteca SKER3D.LIB. USER consta de 8 secciones, cada una con su propia entrada desde el programa principal SKER3D, definida por un **ENTRY**. Éstas son:

- DEFINE: Aquí se indican las variables a resolver y a imprimir, mediante parámetros lógicos. Se definen los coeficientes de relajación para cada ecuación y la posición del nodo de monitoreo.
- GRID: Se define la malla de discretización, empleando las funciones UGRID o NUGRID de SKER3D.LIB.
- START: Se especifican si es necesario, valores iniciales para los campos de las variables, o bien se puede utilizar la función de lectura de resultados anteriores almacenados en DATOS.SKE. Las condiciones de contorno que definen un valor constante para la variable en los nodos de la periferia se

pueden introducir en esta sección. Se definen también aquí las regiones bloqueadas dentro del dominio, mediante viscosidad "infinita" (10^{30}).

- PROPS: se incluyen las leyes de variación para las propiedades del fluido.
- BOUND: puede contener cálculos para condiciones de contorno que varían de una iteración a la siguiente.
- OUTPUT: se dan las instrucciones para la salida de resultados, por medio de funciones de SKER3D tales como PRINT, PRINTC, WRIDAT.
- COEDIF: se define el modo de calcular los coeficientes de difusión Γ para cada variable del problema. En este punto se puede incluir la utilización de coeficientes de difusión distintos para cada dirección.
- PROMOD: se establecen, para cada variable, las condiciones de contorno que deben ser impuestas a través de los coeficientes de la ecuación discretizada, y el cálculo de los términos fuentes no incorporados en SKER3D.FOR. Las subrutinas VELOCU, VELOCV, VELOCW y CALCPH llaman a PROMOD después de construir sus sistemas de ecuaciones, de manera que en él se ejecuten las modificaciones finales de los coeficientes antes de resolver el sistema.

6.4 Biblioteca de Subrutinas SKER3D.LIB

Se han incluido en esta biblioteca, subrutinas para muchas de las operaciones que se requieren en USER, especialmente las de programación más compleja. También se han incorporado algunas operaciones simples pero que deben ser realizadas múltiples veces en USER (tales como transferir datos dentro de los arreglos). Las subrutinas más importantes contenidas son:

- DERIV0: establece condición de contorno de derivada cero.
- INIBLK: define una región sólida dentro del dominio de solución.
- NUGRID: genera una malla con distribución de nodos no uniforme.
- PEWU, PNSU, PTBU: aplican funciones de pared para la componente u de la velocidad, en paredes perpendiculares a las direcciones x , y o z respectivamente.

- PEWV, PNSV, PTBV: aplican funciones de pared para la componente v de la velocidad, en paredes perpendiculares a las direcciones x , y o z respectivamente.
- PEWW, PNSW, PTBW: aplican funciones de pared para la componente w de la velocidad, en paredes perpendiculares a las direcciones x , y o z respectivamente.
- PRINT: escribe resultados al archivo RESULT.SKE, para las variables que se especifiquen.
- PRINTC: escribe datos sobre la geometría de la malla al archivo RESULT.SKE.
- QWALL: aplica la función de pared para temperatura y calcula el flujo turbulento de calor desde la pared.
- READAT: lee el archivo de resultados DATOS.SKE e inicializa los campos de variables con esta información.
- SKBUOY: calcula la fuente de energía cinética turbulenta por flotación.
- SRCEP: calcula la fuente para la ecuación de disipación viscosa ε .
- SRCTK: calcula la fuente neta de energía cinética turbulenta k por generación mecánica y disipación viscosa.
- UGRID: genera una malla con distribución de nodos uniforme.
- VARREL: permite desactivar la resolución de algunas variables especificadas en DEFINE, y cambiar los coeficientes de relajación.
- WALLEP: establece condiciones de contorno para ε en los nodos adyacentes a paredes.
- WALLTK: establece condiciones de contorno para k en los nodos adyacentes a paredes.
- WRIDAT: escribe los resultados al archivo DATOS.SKE.

7 Aplicaciones

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en la modelación de tres casos en los que es necesario calcular concentraciones de polutantes en situaciones donde los modelos simplificados descritos en el capítulo 4 se ven limitados. Puesto que el programa computacional desarrollado es de carácter general, no hay en principio restricciones en cuanto al número de fuentes de contaminantes o la complejidad de la configuración geométrica, aparte del límite impuesto por la memoria y capacidad de cálculo del computador. Los casos aquí presentados se consideran suficientes para mostrar el potencial de aplicación de este tipo de modelación a problemas prácticos de evaluación de contaminación ambiental, pero no debe concluirse que las posibilidades de aplicación se circunscriben sólo a situaciones como las analizadas. Por otra parte, debido al volumen de datos que se obtiene de cada modelación, no es posible entregar, en un espacio razonable, resultados detallados para todas las variables y en la totalidad del dominio de solución. Los resultados presentados resumen las características principales de los campos obtenidos

Los cálculos se efectuaron con un procesador 486-DX4 a 100 [Mhz]. El tiempo de computación para cada uno de los resultados en los casos 1 y 2 que siguen fue de aproximadamente 1,3 horas. Las situaciones del caso 3 tomaron cada una alrededor de 1,8 horas de procesamiento.

7.1 Caso 1: Cruce de Calles Rodeado de Edificios

El primer caso se ilustra en la figura 7.1. Se tienen dos calles que se cruzan en ángulo recto. En torno al cruce existen cuatro edificios, de alturas desiguales (aunque estos bloques son referidos aquí como edificios 1, 2, 3 y 4, puede considerarse que, por su tamaño, representan más bien conjuntos de edificaciones de altura uniforme, cada uno ocupando una manzana). Los cuatro bloques miden 80 [m] en x y 120 [m] en y , y sus alturas son de 40 [m] para los edificios 1 y 4, y 20 [m] para los edificios 2 y 3. El sistema de coordenadas indicado es utilizado en las figuras que siguen para señalar la posición dentro del campo de solución de la zona parcial graficada en ellas. La posición de los edificios en el campo completo de solución se muestra a escala también en la figura 7.1. El campo completo abarca un área de 850×850 [m²] en xy y una

altura de 150 [m] en z . Este espacio se ha discretizado en una malla de $31 \times 31 \times 31$ nodos que se muestra en la figura 7.2 (y por lo tanto, de $29 \times 29 \times 29$ volúmenes de control, ya que los nodos en el primer y último plano en cada dirección se utilizan para la especificación de condiciones de contorno).

Las dos calles tienen un ancho de 12 [m], y la distancia entre sus bordes y los edificios que las rodean es de 3 [m] a cada lado. De acuerdo a la práctica usual en modelaciones de calles o carreteras con tráfico intenso, éstas son tratadas como fuentes superficiales de contaminantes. El contaminante en el que se basan los cálculos es el monóxido de carbono, si bien, dado que no se consideran transformaciones químicas ni otros mecanismos de remoción que dependan del tipo de contaminante, los resultados serían los mismos para cualquier contaminante químicamente inerte o cuyo tiempo de decaimiento sea mayor que los tiempos de transporte dentro de la región modelada. Por lo tanto, es posible efectuar los cálculos para una emisión unitaria de un polutante inerte generalizado. Se utiliza CO en este caso, o SO₂ en el caso 3, para tener concentraciones que sean directamente interpretables. Para ambas calles se toma un factor de emisión medio de CO de 15[g/km] por vehículo, y una intensidad de tráfico de 4000 [vehículos/hora].

La modelación se efectuó para estabilidad atmosférica neutra, en estado estacionario. Debido a que estas condiciones predominan la turbulencia mecánica el campo de temperatura se supuso constante en 20[°C]. Se obtuvieron resultados para cuatro direcciones del viento que ingresa al campo de modelación: 0°; 22,5°; 45° y 90° respecto al eje x . El aire ingresa por los planos en $x = 0$ o $y = 0$, dependiendo de la dirección mencionada. En estos planos de entrada se prescribe un perfil de velocidad para el viento según la función de potencia generalmente empleada, basada en la velocidad a 10 [m] de altura, con un exponente que depende de la clase de estabilidad atmosférica. Por lo tanto, las condiciones de contorno son las siguientes:

• en $x = 0$:

para $\alpha \neq 90^\circ$: (α : ángulo del viento respecto al eje x)

$$u = V_r \left(\frac{z}{z_r} \right)^p \cos \alpha \quad ; \quad v = V_r \left(\frac{z}{z_r} \right)^p \sin \alpha$$

con $V_r = 5$ [m/s], $z_r = 10$ [m], $p = 0,14$ (para clase neutra).

$$w = 0 \quad ; \quad k = 0 \quad ; \quad \varepsilon = 0 \quad ; \quad c = 0$$

para $\alpha = 90^\circ$:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 ; \quad \frac{\partial v}{\partial x} = 0 ; \quad \frac{\partial w}{\partial x} = 0 ; \quad \frac{\partial k}{\partial x} = 0 ; \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} = 0 ; \quad \frac{\partial c}{\partial x} = 0$$

• en $x = 850$ [m] :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 ; \quad \frac{\partial v}{\partial x} = 0 ; \quad \frac{\partial w}{\partial x} = 0 ; \quad \frac{\partial k}{\partial x} = 0 ; \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} = 0 ; \quad \frac{\partial c}{\partial x} = 0$$

• en $y = 0$:

para $\alpha \neq 0^\circ$:

$$u = V_r \left(\frac{z}{z_r} \right)^p \cos \alpha ; \quad v = V_r \left(\frac{z}{z_r} \right)^p \sin \alpha$$

con $V_r = 5$ [m/s], $z_r = 10$ [m], $p = 0,14$ (para clase neutra)

$$w = 0 ; \quad k = 0 ; \quad \varepsilon = 0 ; \quad c = 0$$

para $\alpha = 0^\circ$:

$$\frac{\partial u}{\partial y} = 0 ; \quad \frac{\partial v}{\partial y} = 0 ; \quad \frac{\partial w}{\partial y} = 0 ; \quad \frac{\partial k}{\partial y} = 0 ; \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} = 0 ; \quad \frac{\partial c}{\partial y} = 0$$

• en $y = 850$ [m] :

$$\frac{\partial u}{\partial y} = 0 ; \quad \frac{\partial v}{\partial y} = 0 ; \quad \frac{\partial w}{\partial y} = 0 ; \quad \frac{\partial k}{\partial y} = 0 ; \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} = 0 ; \quad \frac{\partial c}{\partial y} = 0$$

• en $z = 0$:

se aplican funciones de pared para u, v, w, k y ε ; $\frac{\partial c}{\partial z} = 0$

• en $z = 150$ [m] :

$$\frac{\partial u}{\partial z} = 0 ; \quad \frac{\partial v}{\partial z} = 0 ; \quad \frac{\partial w}{\partial z} = 0 ; \quad \frac{\partial k}{\partial z} = 0 ; \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = 0 ; \quad \frac{\partial c}{\partial z} = 0$$

Se utilizan además funciones de pared sobre las paredes y techos de todos los edificios.

En las figuras 7.3 a 7.7 se muestran proyecciones de los vectores de velocidad

sobre planos verticales xz , en diferentes zonas del campo de solución, para la condición de viento con $\alpha = 0^\circ$ (en todas las figuras, a menos que se indique algo distinto, los resultados corresponden a este ángulo). La sección en la figura 7.3 está tomada en $y = 250$ [m] que, como puede verse en el plano de la figura 7.1, corresponde a una posición aproximadamente en el punto medio del tramo de la calle 2 entre los edificios 3 y 4, antes de llegar al cruce con la calle 1 (avanzando en dirección y). Se observa la recirculación del viento en el interior de la calle, transversal a su eje, inducida por la depresión característica que se produce en la estela aerodinámica del edificio 3, y favorecida por el impacto del viento sobre la fachada del edificio 4, más alto. Esta clase de flujos secundarios tienen gran efecto sobre la distribución de contaminante en las calles, y puede provocar diferencias notables en los niveles de concentración que se alcanzan en lados opuestos de ellas. Es evidente que la circulación mostrada provocará un aumento de la concentración hacia el costado de la calle donde se sitúa el edificio 3. También se observa la inversión de la velocidad sobre el techo del edificio 3, indicando el desprendimiento de la capa límite.

La figura 7.4 muestra la zona de recirculación detrás del edificio 4, para el mismo nivel de y de la figura anterior. La cavidad se extiende hasta $x \approx 500$ [m], lo que corresponde a aproximadamente 5 veces la altura del edificio medida desde su cara a barlovento. Este valor se sitúa dentro del rango típico mencionado en la literatura^[22], que va desde 2,5 a 3 para edificios cúbicos, hasta 7 para edificios muy largos en la dirección transversal al viento.

Las figuras 7.5 a 7.7 presentan las velocidades para secciones en $y = 388$ [m] (aproximadamente el punto medio de la calle 2 más allá del cruce). Se observan fenómenos similares. En este caso el edificio 2 se halla inmerso en la zona de recirculación del edificio 1, y el flujo se re-adhiere a su techo. La recirculación provocada por el propio edificio 2 es claramente visible en la figura 7.7. La circulación transversal al interior de la calle aún existe, aunque con una intensidad menor, y así, la dirección del viento en el interior de la calle es, a este nivel en y , esencialmente paralela a la misma, como se aprecia en la figura 7.9. Ésta, y la figura 7.8 dan proyecciones del campo de velocidades en planos horizontales, mostrando el flujo alrededor de los edificios. Se aprecia la canalización del viento a lo largo de las calles. Ya que la calle 1 es paralela al viento esto parece obvio, pero para la calle 2, que es transversal a él, no sería simple predecir la magnitud del viento que se establece sin recurrir a cálculos de este tipo. La figura 7.8 muestra que el aire que choca con el edificio 4 y desciende hacia la calle 2 se distribuye hacia ambos extremos de ella, y

logra salir tanto por el cruce como por el comienzo de la calle. En el cruce convergen los flujos a lo largo de cada calle, y la corriente de la calle 1 es desviada en parte hacia el segundo tramo de la calle 2, de modo que en este tramo la velocidad longitudinal en la calle predomina sobre la circulación transversal. Además, en ambas calles se alcanzan velocidades más elevadas en los costados que dan hacia el edificio 2, debido a que el viento converge hacia él. En la figura 7.8 se advierte también la recirculación horizontal en la cavidad tras el edificio 4, para la cual el flujo vertical fue dado en la figura 7.4. Este complejo patrón de flujo tridimensional es característico.

Parte de la estructura del flujo en la tercera dirección se ilustra en las figuras 7.10 y 7.11, para dos secciones en el plano yz , tomadas en dos posiciones en la calle 1, que muestran la circulación débil que se produce, transversal a la dirección principal del viento, por la desviación lateral del aire que impacta sobre el edificio 4. El aire se desvía preferentemente hacia la zona detrás del edificio 1 como consecuencia de la menor presión que allí se registra.

Resultados para la energía cinética turbulenta se dan en las figuras 7.12 y 7.13, para secciones horizontales a diferentes alturas. Éstos y casi todos los demás gráficos de líneas de contorno se obtuvieron con un intervalo uniforme entre niveles, de modo que la densidad de líneas represente la intensidad del gradiente. El valor de dicho intervalo se indica en estos gráficos como el parámetro δ . Las mayores intensidades de turbulencia se producen en las zonas de recirculación detrás de los edificios, y en la región inmediatamente por encima de ellos, debido a los elevados esfuerzos de corte que se tienen sobre los techos. En la figura 7.13, para una sección a 3 [m] sobre los edificios más altos se aprecia claramente esto. Resultados para secciones a alturas mayores mostraron un decaimiento progresivo de la turbulencia. La figura 7.14 proporciona otra vista parcial del campo de energía de turbulenta, y de su intensificación sobre el techo y en la estela de los edificios.

La disipación de esta energía cinética turbulenta se muestra en las figuras 7.15 y 7.16, para las mismas alturas. La disipación se concentra fuertemente en la vecindad de las paredes y techos de los edificios, de modo que la energía turbulenta generada en esas zonas es disipada rápidamente. No ocurre lo mismo con la turbulencia en la estela de los edificios, donde la disipación es significativamente menor, y la turbulencia logra persistir una considerable distancia flujo abajo. Por consiguiente, la mayor difusividad turbulenta se tiene en esta zona, como se comprueba en las figuras 7.17 y 7.18, que muestran la viscosidad efectiva a estas mismas alturas.

Resultados para la concentración de CO en el interior de las calles se dan en las figuras 7.19 a 7.30. Todas las concentraciones, para éste y los demás casos están referidas a un metro cúbico normal. Los gráficos 7.19 a 7.24 son de curvas de isoconcentración para secciones verticales de la calle 2, en diferentes posiciones a lo largo de la misma. El intervalo horizontal que se indica para x entre 282 y 297 [m] corresponde a la distancia entre los centros de los volúmenes de control adyacentes a los edificios en cada costado (las paredes se ubican a 1,5 [m] hacia cada lado). Todas las alturas se dan en metros, y el intervalo de 0 a 20 [m] graficado es la parte de la sección que queda completamente encerrada entre edificios. Las posiciones en $y = 210$ [m], $y = 250$ [m] e $y = 310$ [m] corresponden al comienzo, la zona media y el final del primer tramo, al llegar al cruce. Lo mismo representan con respecto al segundo tramo las posiciones en $y = 348$ [m], $y = 388$ [m] e $y = 448$ [m]. En estas figuras el efecto de la circulación transversal del aire en la calle queda de manifiesto: el polutante es impelido hacia los costados de los edificios 1 y 3, y se producen diferencias de más de un orden de magnitud en las concentraciones a ambos lados de la calle. Ya que no se simula la turbulencia local que puede producir el movimiento de los vehículos, los resultados para los primeros metros de altura son sólo aproximados. No obstante se puede esperar que el comportamiento general de la concentración será el predicho, principalmente fuera de esta región de perturbación local.

Las figuras 7.25 a 7.30 presentan secciones transversales equivalentes para la calle 1, al principio, la zona media y el final de la calle[†]. Se produce un efecto similar, pero menos pronunciado, que el observado en la calle 2, producto de la componente transversal del viento que se aprecia en las figuras 7.10 y 7.11, de modo que la concentración se torna más uniforme a lo ancho de la calle. Sólo se desvía de la tendencia hacia una mayor concentración en el costado izquierdo la sección en la figura 7.28, que está tomada inmediatamente después del cruce. Allí el viento a lo largo de ambas calles converge sobre el edificio 2, y la concentración hacia el costado que éste ocupa aumenta. Las concentraciones máximas calculadas en estos puntos de las calles se resumen en la tabla 7.1. En la calle 2 la concentración aumenta continuamente en dirección y , siendo máxima hacia el final de la calle. Esto es atribuible al aire que fluye longitudinalmente, transportando hacia ese sector el polutante emitido en puntos anteriores de la calle. Además, parte de la emisión en el primer tramo de la calle 1 es desviada hacia el segundo tramo de la calle 2, cuando las

[†] Aquí y en lo que sigue, el final de las calles designa el término del tramo que transcurre entre edificios, pero las emisiones continúan luego de pasar estos puntos.

corrientes a lo largo de ambas calles se encuentran en el cruce, como lo indica la disminución de la concentración en la calle 1 y el aumento abrupto de la concentración en la calle 2 al pasar el cruce. Hacia el final de la calle 1 la concentración vuelve a aumentar y es allí donde se produce la máxima concentración de CO en la región modelada, para la dirección de viento $\alpha = 0^\circ$. Esto se debe a la disminución de la velocidad del flujo en ese sector causada por la recirculación que existe detrás de los edificios 2 y 4, por lo que el polutante tiende a acumularse allí, dificultándose su evacuación hacia la región flujo abajo del grupo de edificios.

Tabla 7.1 Máximas concentraciones de CO calculadas para diferentes posiciones a lo largo de las calles

Calle 1		Calle 2	
posición x [m]	c [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	posición y [m]	c [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
208	10.227	210	12.819
240	27.161	250	13.427
272	38.331	310	15.321
306	18.781	348	29.173
338	35.522	388	31.924
370	47.988	448	44.276

Los resultados para otras direcciones de ingreso del viento al dominio de solución muestran características similares a las ya presentadas, en cuanto a intensidades de turbulencia, presencia de recirculaciones y flujos secundarios, etc. En estos casos el aspecto más interesante es la influencia de la dirección del viento en los niveles de concentración que se alcanzan en las calles, los cuales, como se vio, están determinados por el patrón de flujo en torno a los edificios. Tal flujo, en el plano horizontal, se muestra en las figuras 7.31 y 7.32b, y las figuras 7.33 a 7.35 dan las concentraciones en los planos de salida de ambas calles para las nuevas direcciones de viento. Para $\alpha = 22,5^\circ$ se advierte que el vórtice de recirculación detrás del edificio 4 se

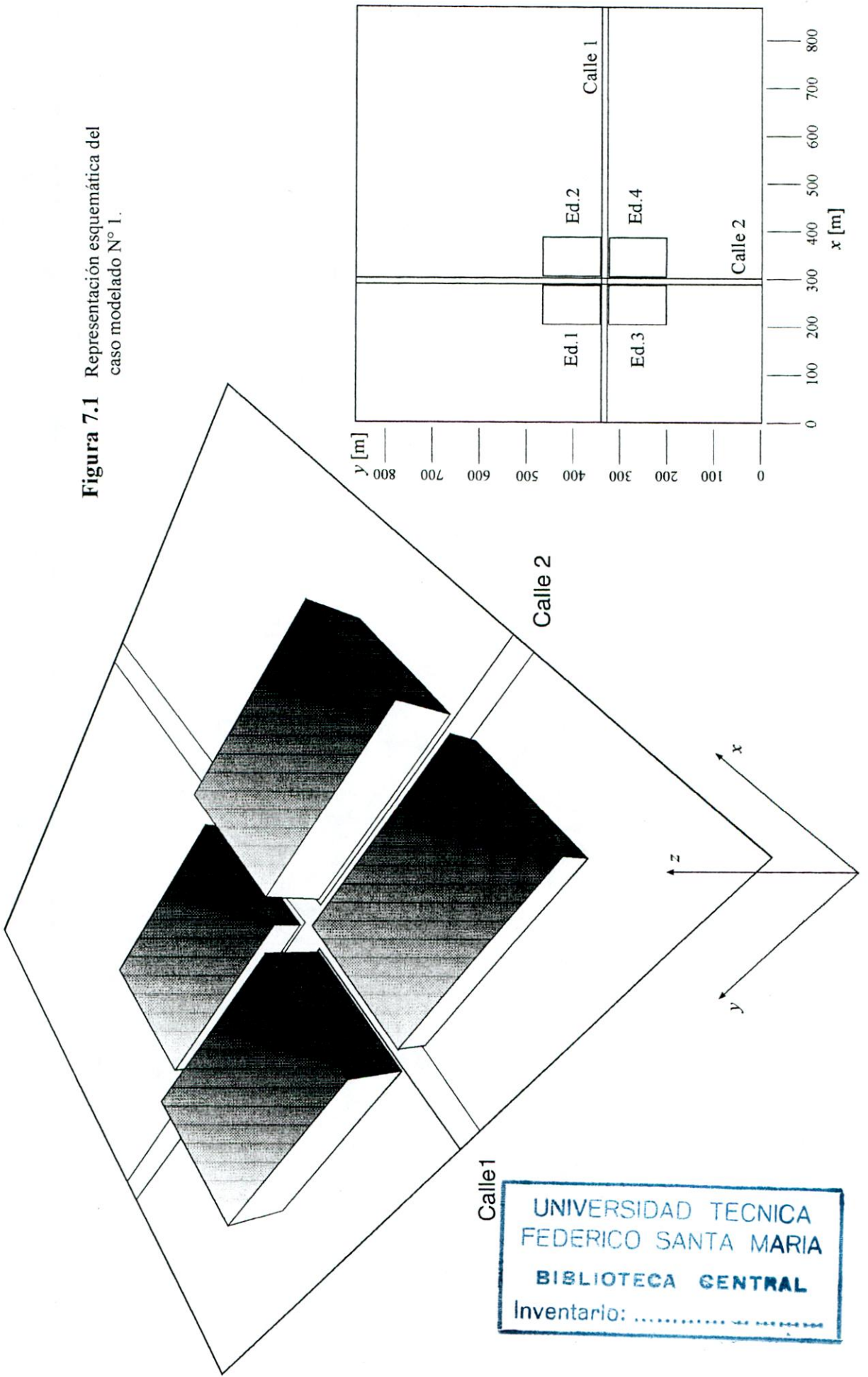
extiende ahora hasta la calle misma, lo que agrava el problema de falta de evacuación de contaminantes al final del segundo tramo de la calle 1. De hecho se tiene ahora en este punto una convergencia de aire que transporta al polutante tanto desde el tramo de la calle 1 entre edificios, como del tramo que le sigue, y la concentración consecuentemente aumenta respecto a la situación con $\alpha = 0^\circ$, como lo muestran las figuras 7.33 y la tabla 7.2. La concentración al final de la calle 2 también se incrementa, debido a la intensificación de la componente longitudinal del viento en ella, y a la tendencia de éste al estancamiento en ese lugar, hacia el costado del edificio 1, provocado por la recirculación que ahora existe también en la región más allá del segundo tramo de la calle 2. Tal estancamiento es todavía mayor para $\alpha = 45^\circ$, y así ocurre con la concentración. El punto más contaminado se ha trasladado a esta ubicación, mientras que en la calle 1 el aire consigue salir ahora por el costado del edificio 2.

La concentración máxima se produce con $\alpha = 90^\circ$ al final de la calle 2 debido, como en casos anteriores, a la acumulación del CO proveniente de las zonas flujo arriba. A pesar de ser paralela a la dirección del viento exterior, la velocidad a esta altura es incluso menor que la que se da en la calle transversal. Esto es originado por la zona de alta presión que se forma en la fachada del edificio 1 donde impacta el viento, el cual desciende hacia la calle (como se ve en la figura 7.32) y fluye luego principalmente en la dirección positiva de x , succionado por la zona de baja presión detrás del edificio 4. Así, esta corriente transversal frena el flujo de aire en la calle 2, impidiendo una adecuada ventilación.

Tabla 7.2 Concentraciones máximas al final de cada calle para diferentes direcciones del viento exterior

α	$x = 370[\text{m}]$ (final de la calle 1) $c [\mu\text{g}/\text{m}^3]$	$y = 448[\text{m}]$ (final de la calle 2) $c [\mu\text{g}/\text{m}^3]$
22,5°	54.933	51.100
45°	48.270	56.628
90°	28.329	98.634

Figura 7.1 Representación esquemática del caso modelado N° 1.



Calle1

UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA
BIBLIOTECA CENTRAL
Inventario:

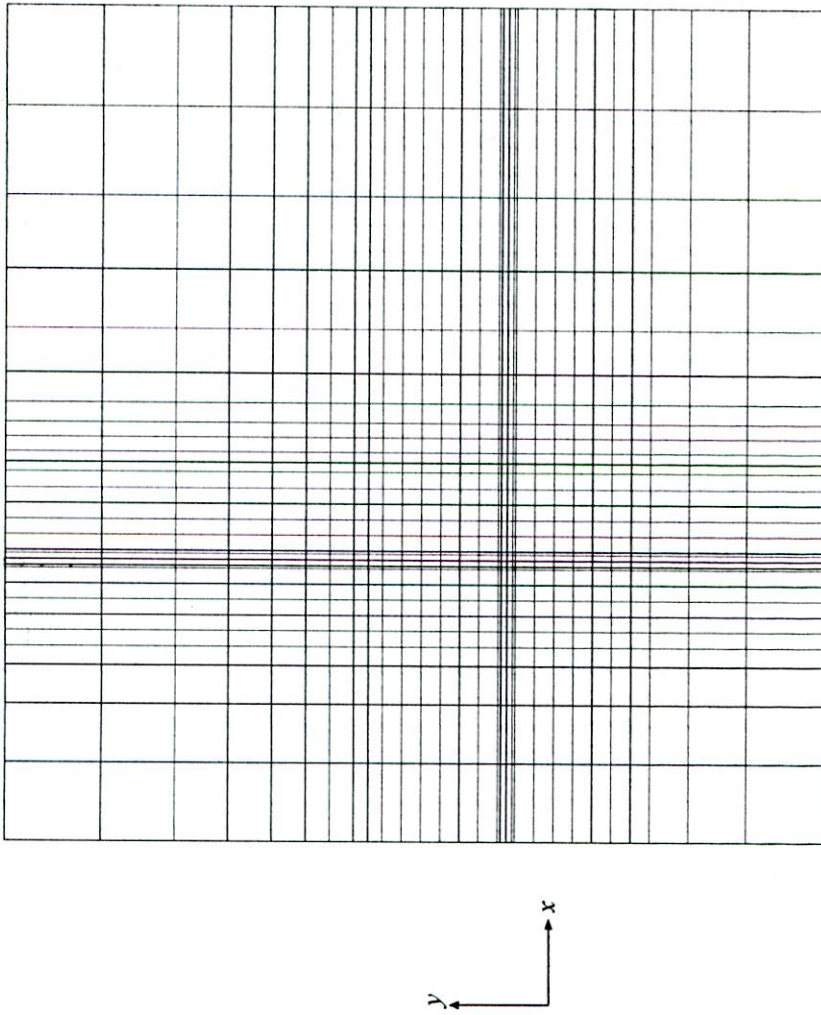


Figura 7.2a Vista superior de la malla de discretización para Caso 1.

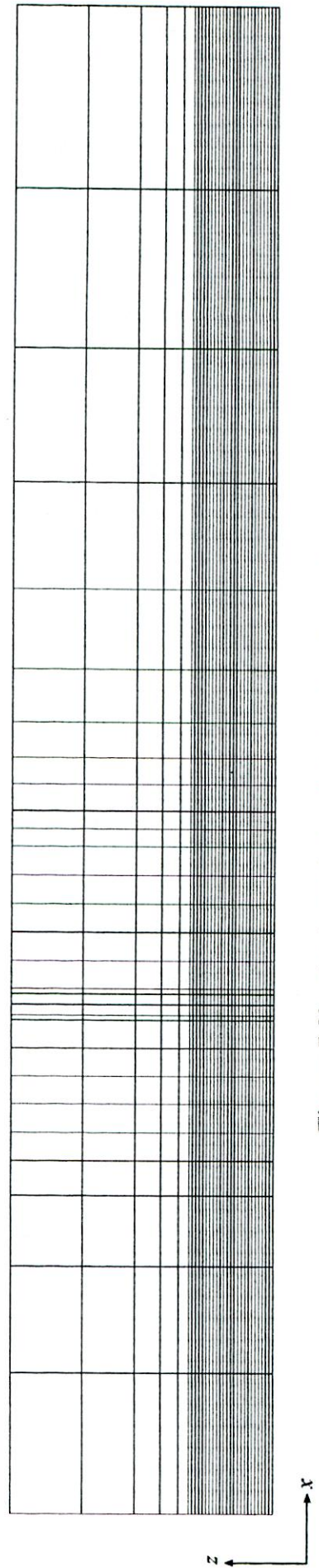


Figura 7.2b Vista lateral de la malla de discretización para Caso 1.

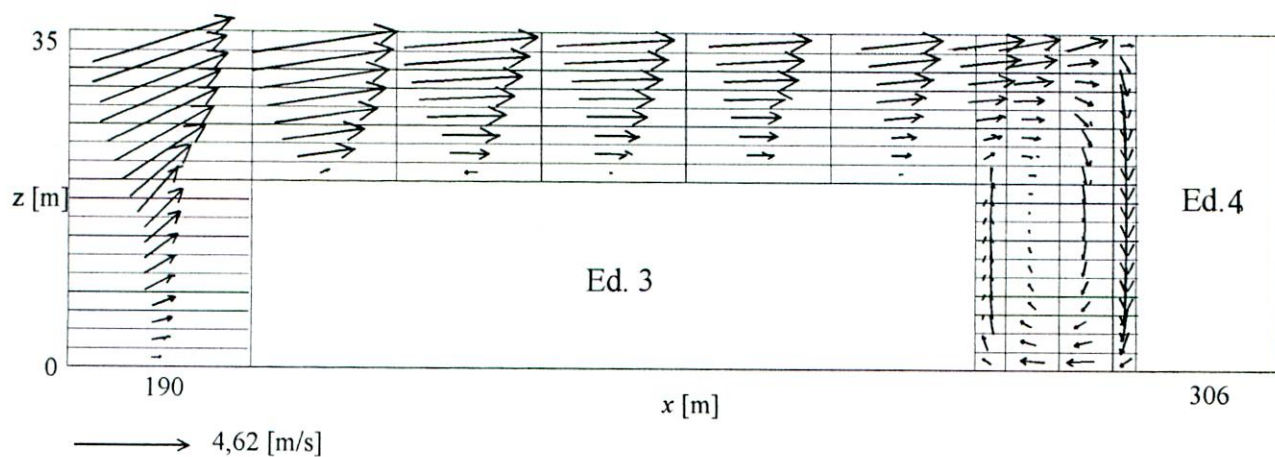


Figura 7.3 Vectores de velocidad en sección $y = 250$ [m].

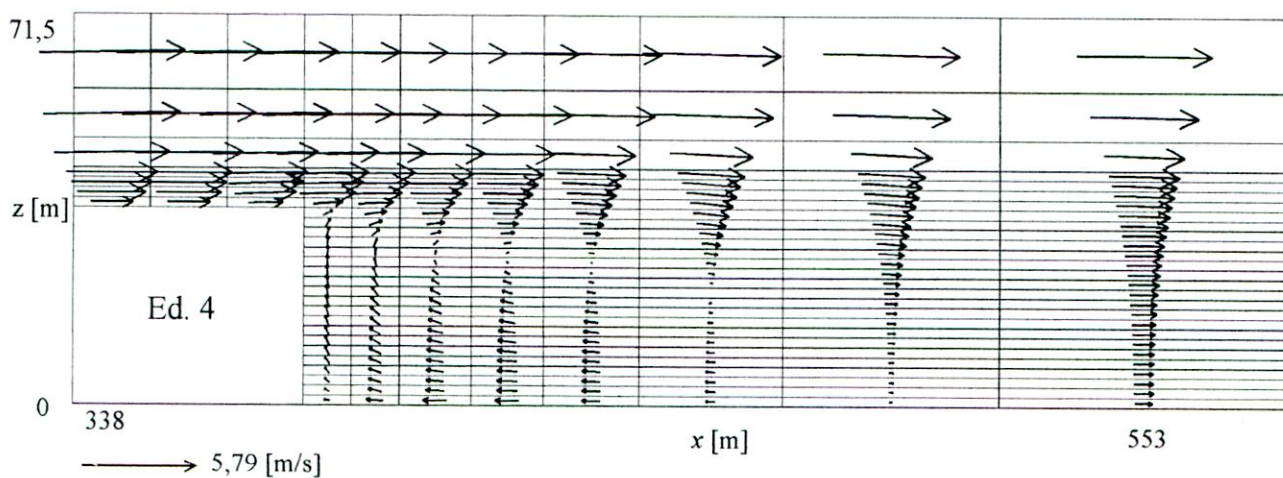


Figura 7.4 Vectores de velocidad en sección $y = 250$ [m].

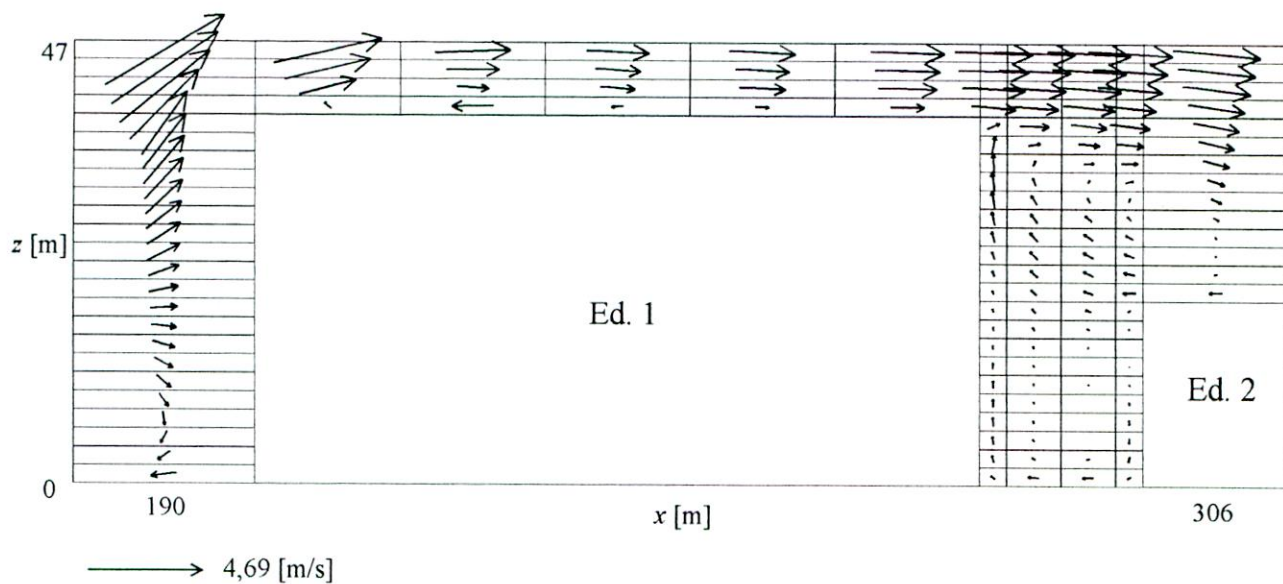


Figura 7.5 Vectores de velocidad en sección $y = 388$ [m].

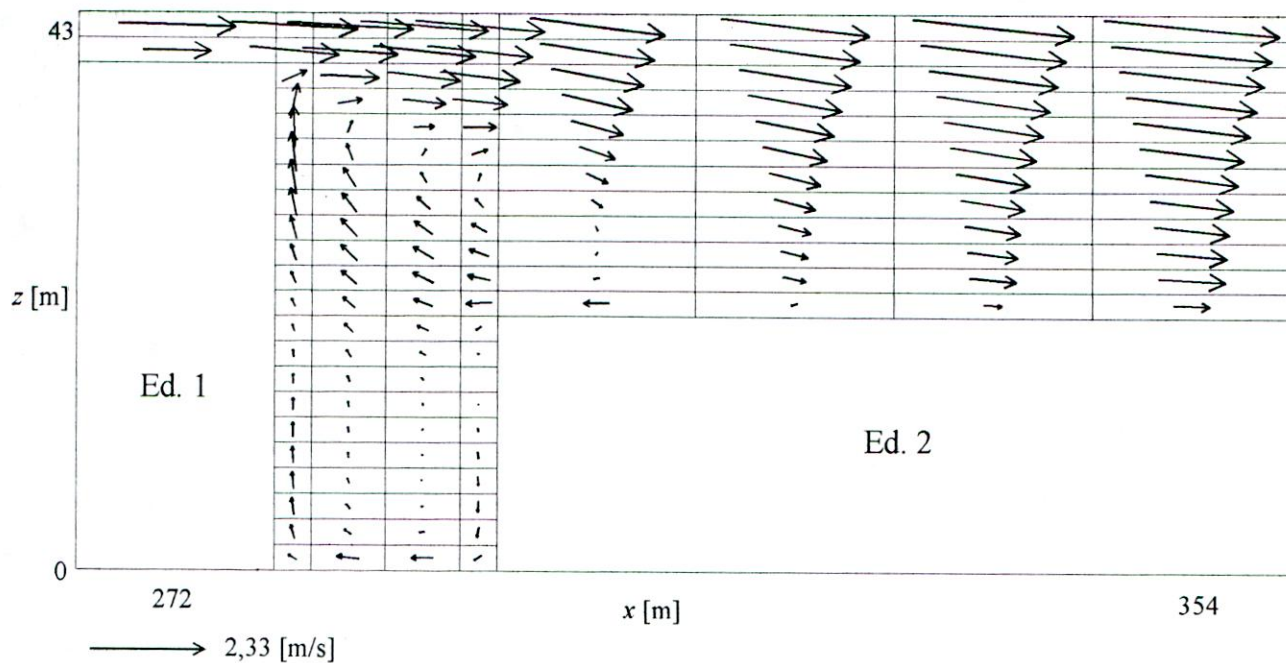


Figura 7.6 Vectores de velocidad en sección $y = 388$ [m]

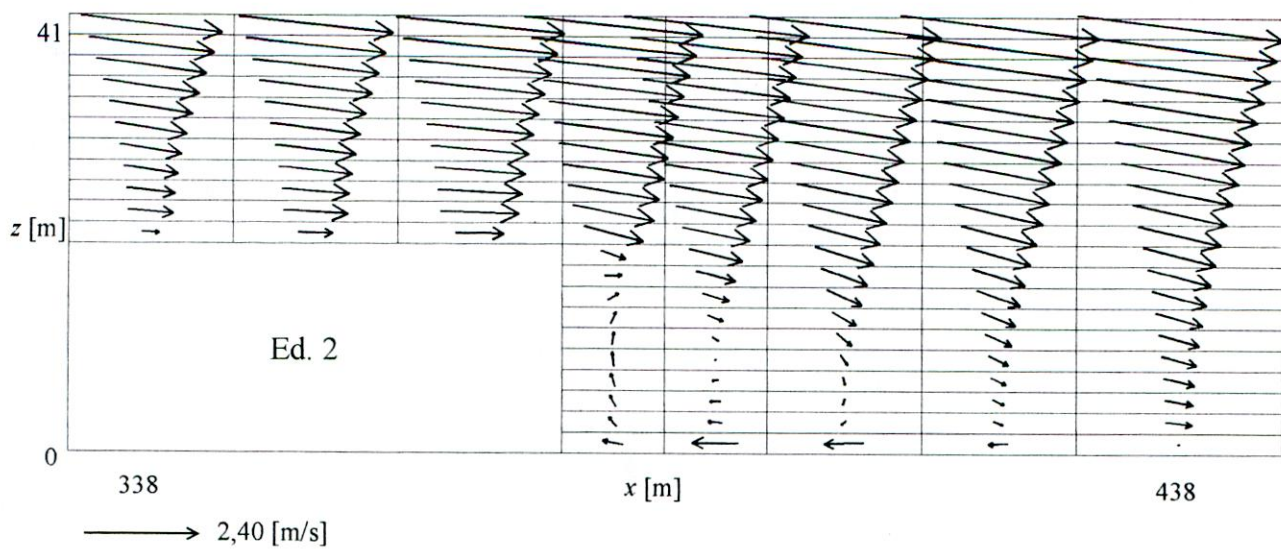


Figura 7.7 Vectores de velocidad en sección $y = 388$ [m]

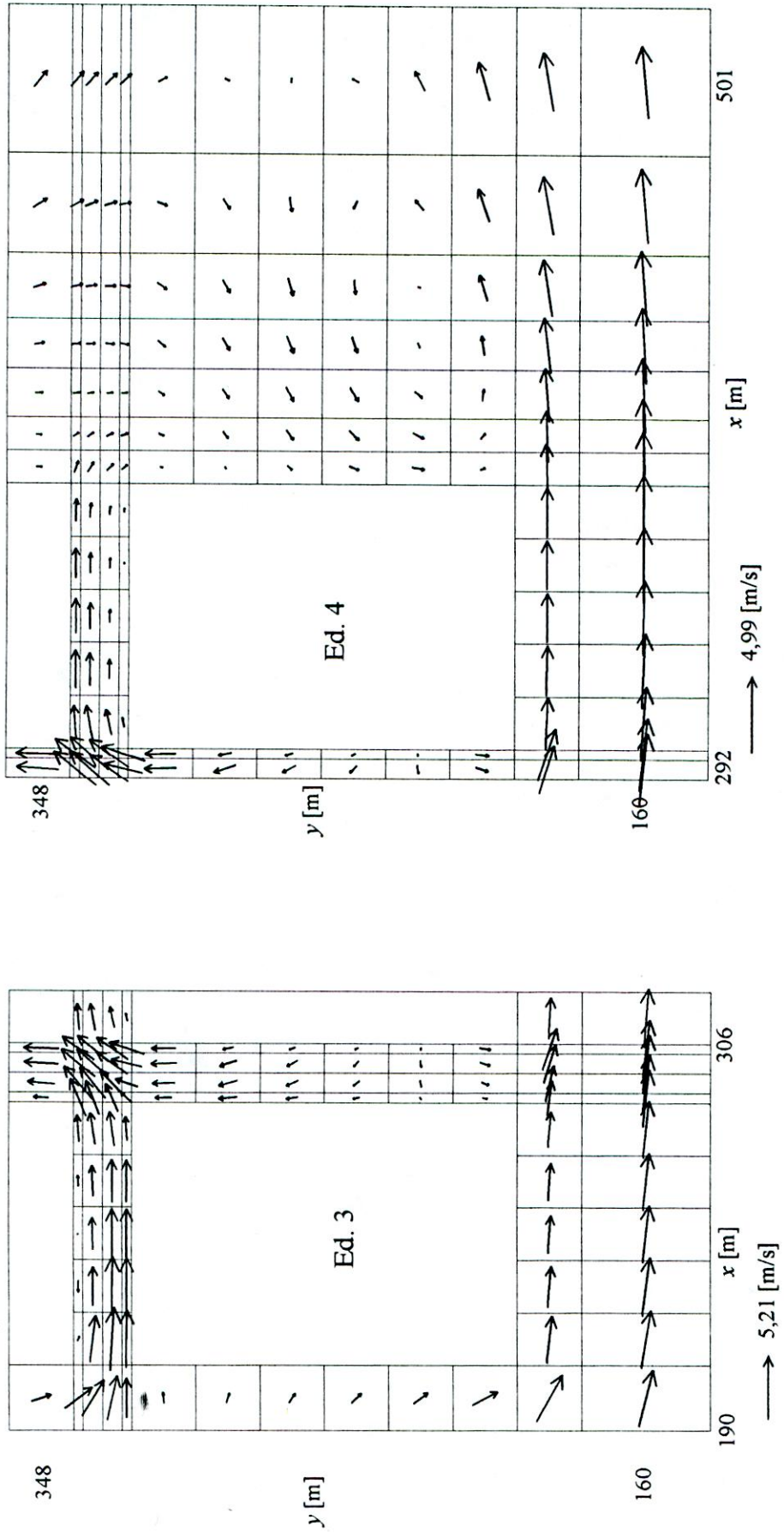


Figura 7.8 Vectores de velocidad para secciones en $z = 5$ [m]

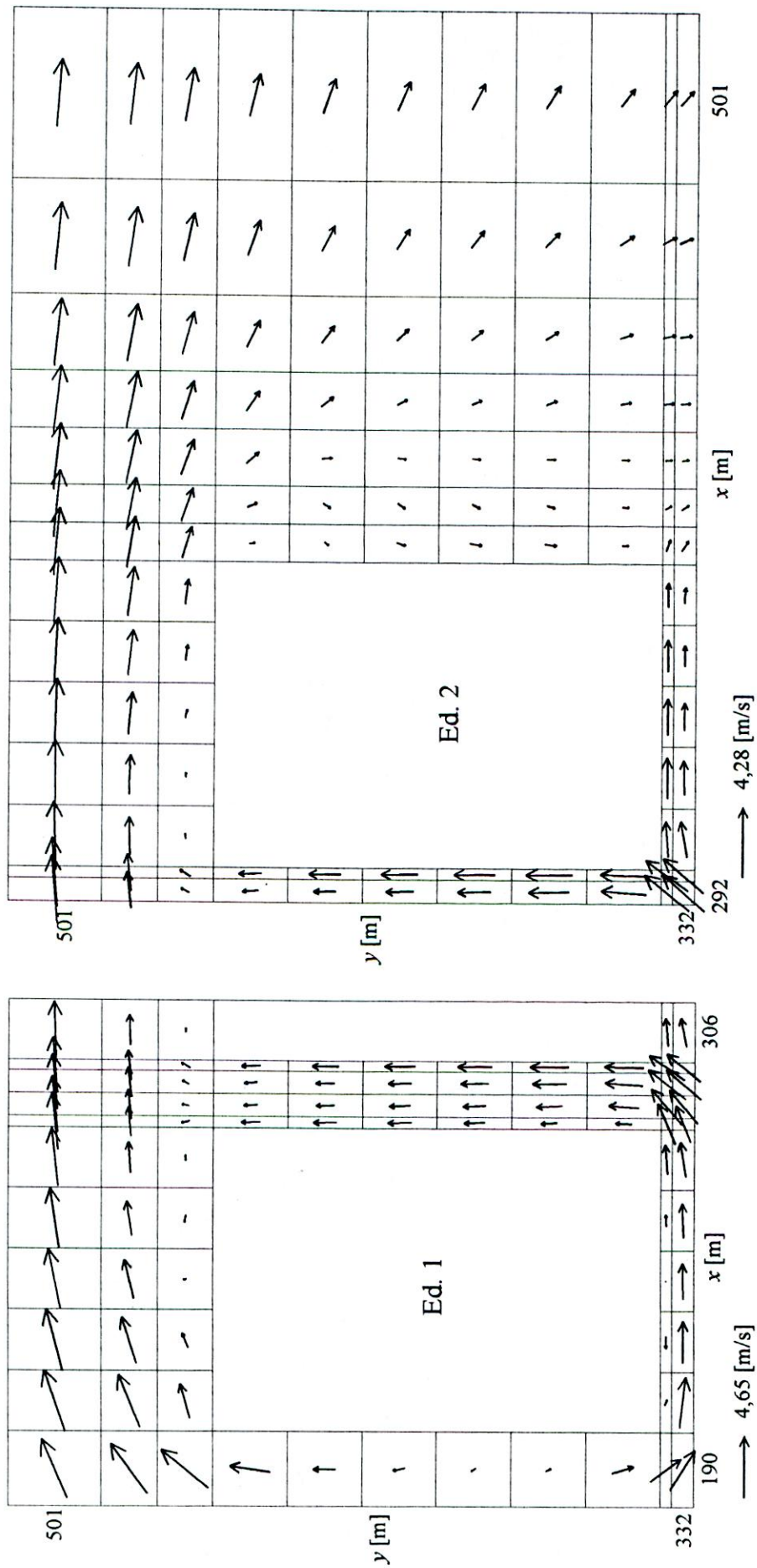


Figura 7.9 Vectores de velocidad para secciones en $y = 5$ [m]

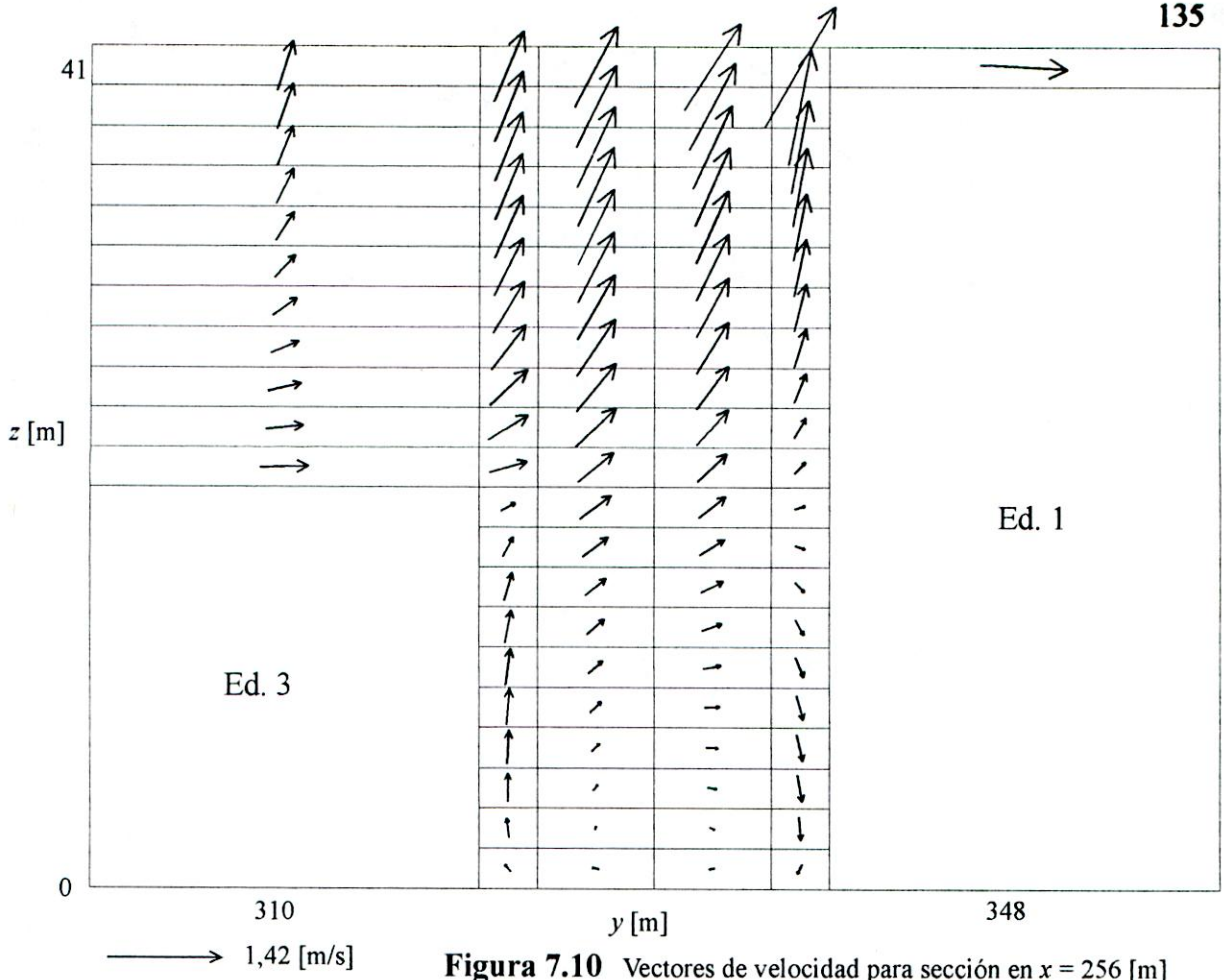


Figura 7.10 Vectores de velocidad para sección en $x = 256$ [m]

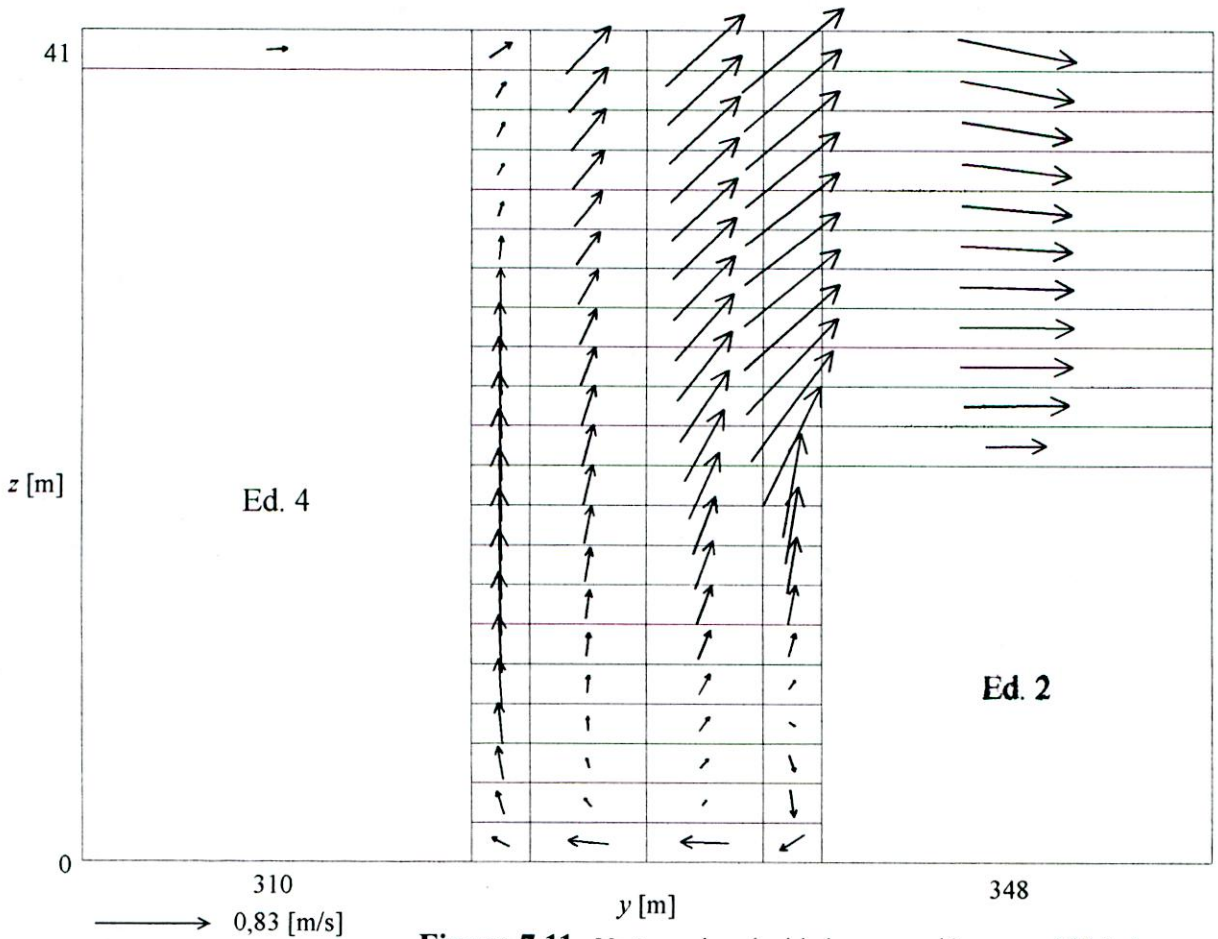


Figura 7.11 Vectores de velocidad para sección en $x = 322$ [m]

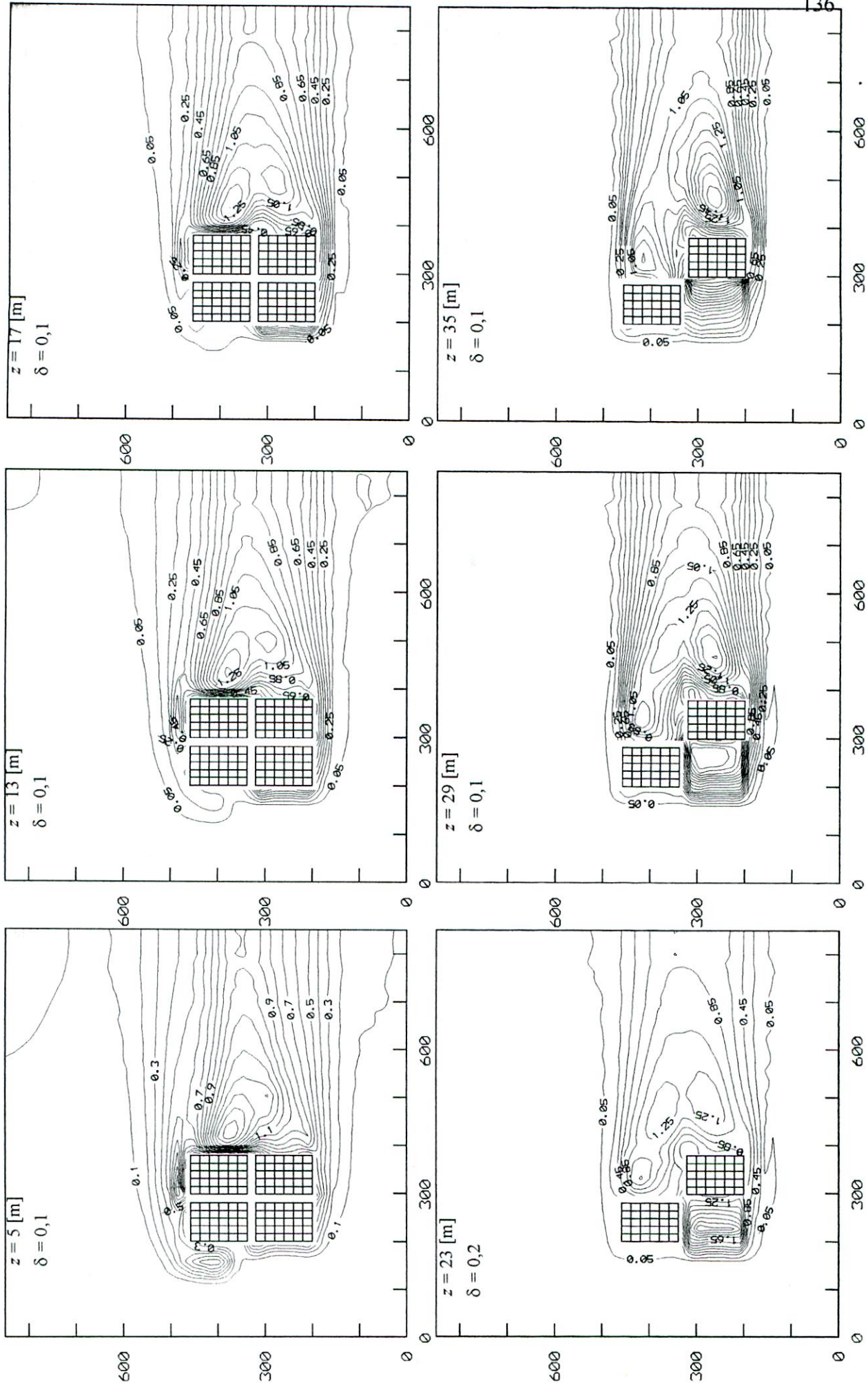


Figura 7.12 Energía cinética turbulenta [m^2/s^2], para diversas secciones a la altura z indicada.

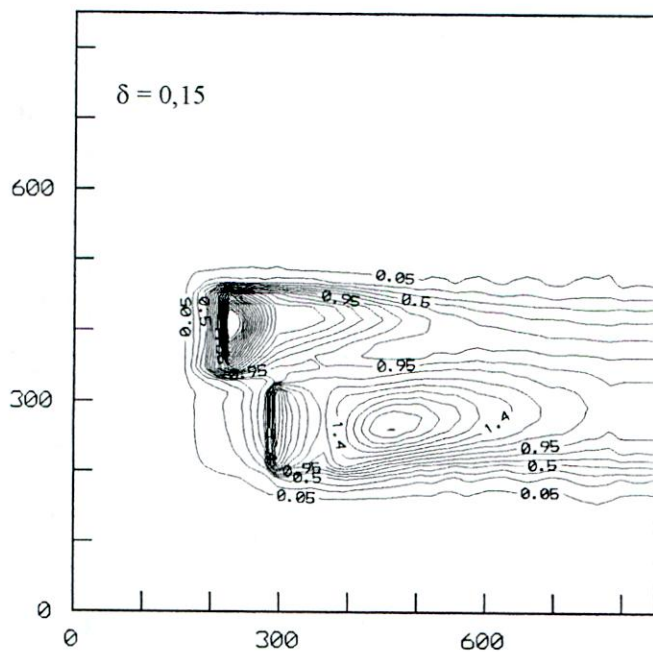


Figura 7.13 Energía cinética turbulenta [m^2/s^2], en sección xy para $z = 43$ [m]

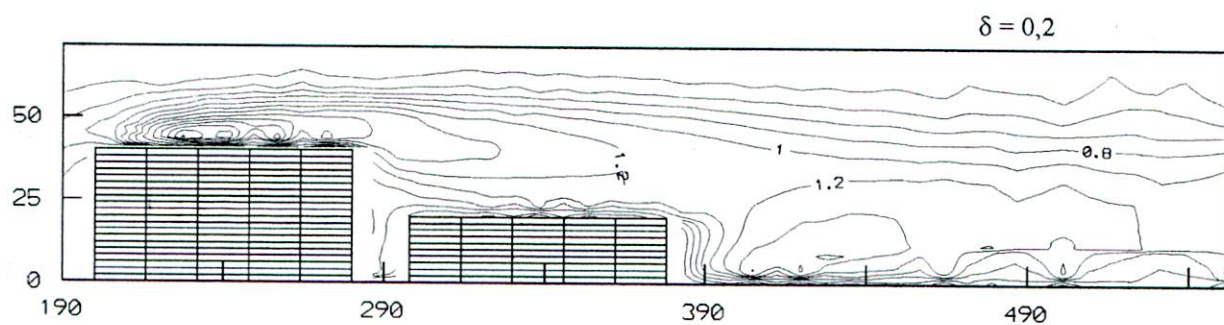


Figura 7.14 Energía cinética turbulenta [m^2/s^2], en sección xz para $y = 388$ [m]

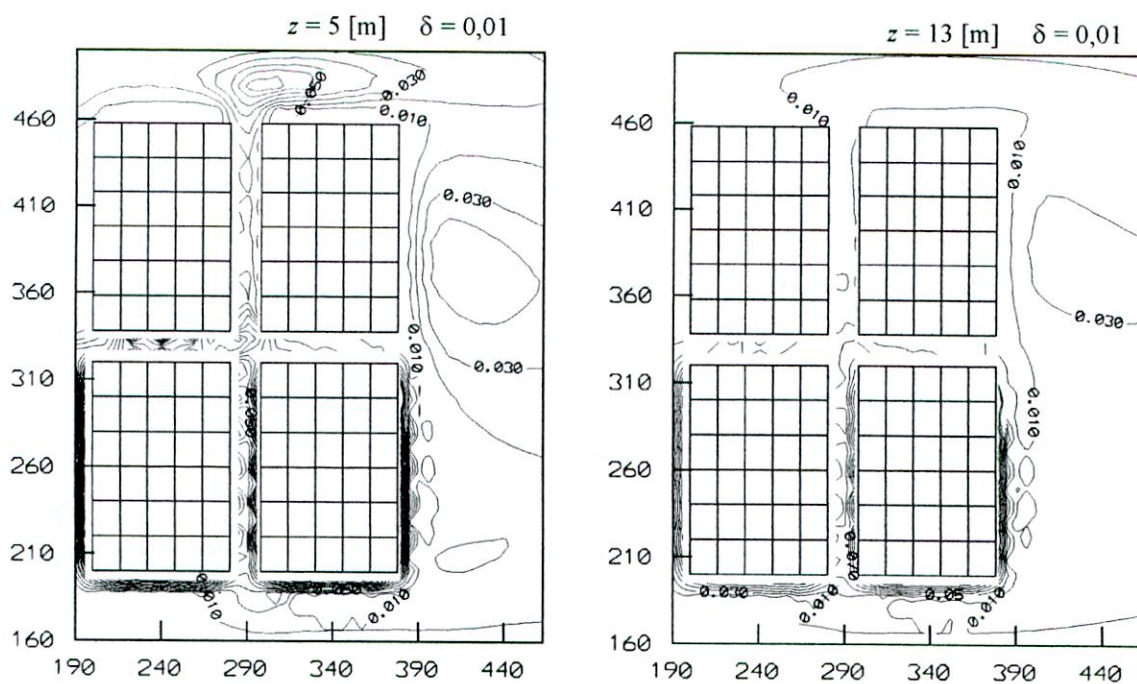


Figura 7.15 Razón de disipación de energía cinética turbulenta [m^2/s^3], para secciones xy a la altura z indicada

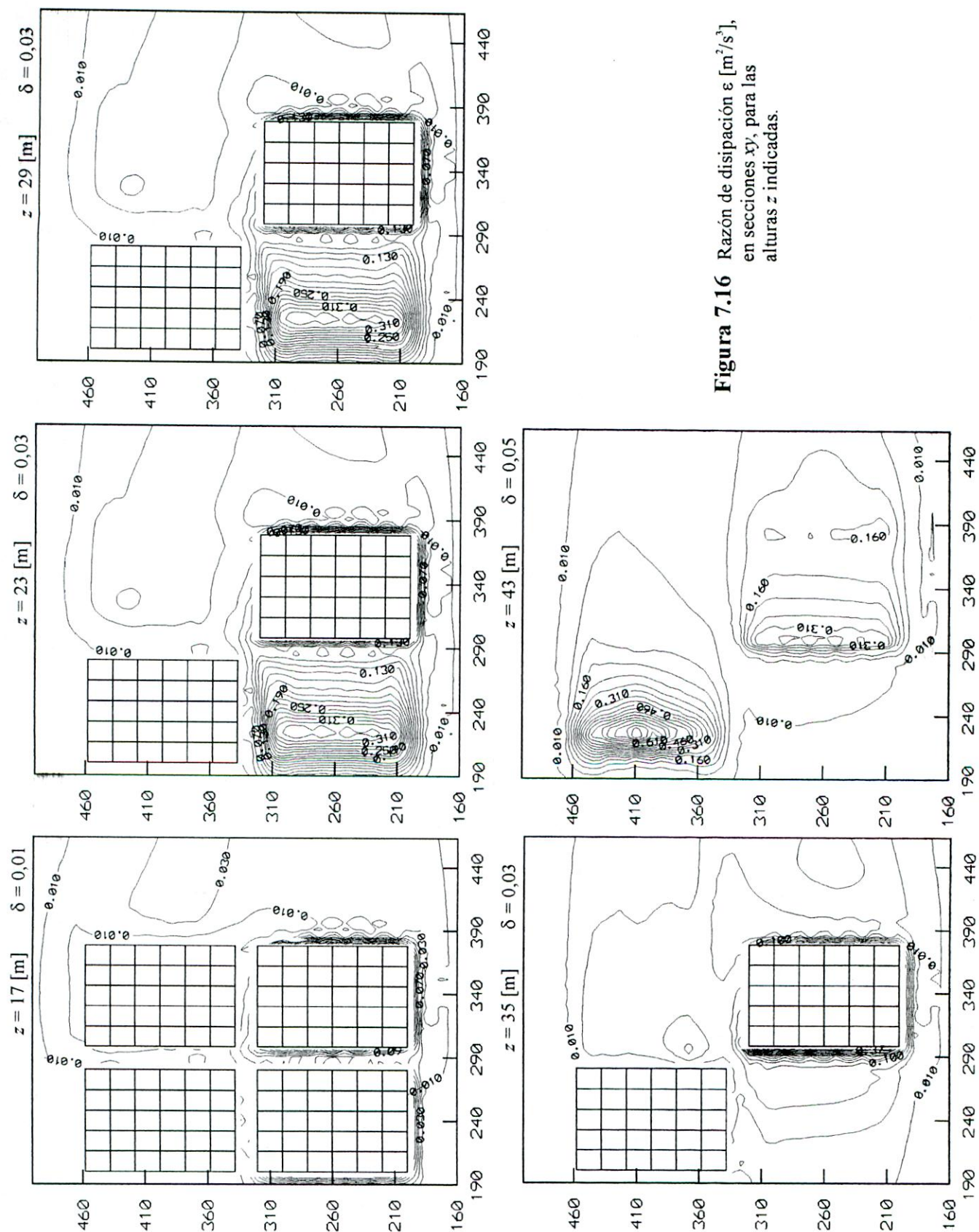


Figura 7.16 Razón de disipación ϵ [m^2/s^3], en secciones xy , para las alturas z indicadas.

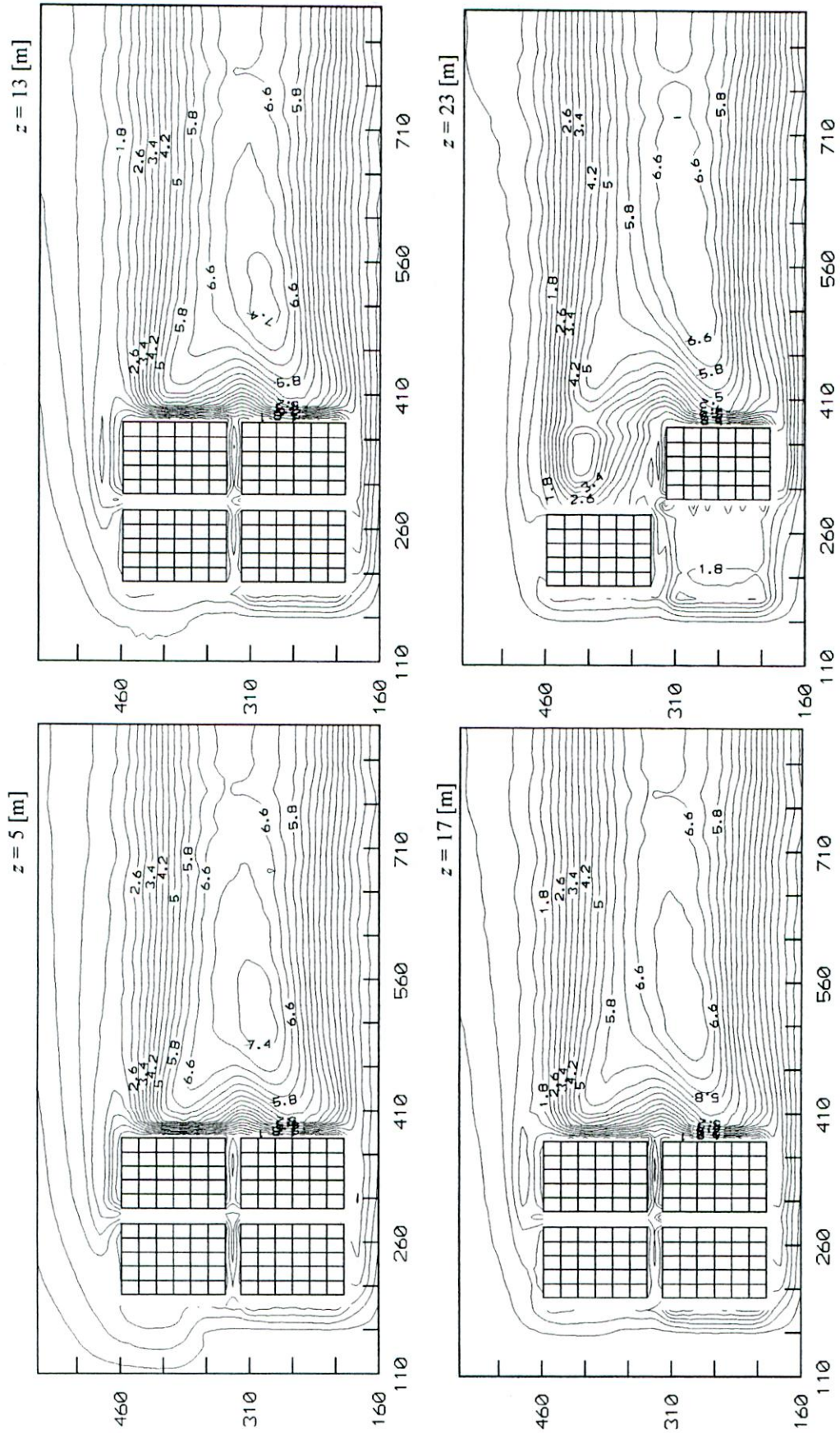


Figura 7.17 Viscosidad efectiva [kg/m s], en secciones xy para las alturas z indicadas $\delta = 0,4$ [kg/m s] en todos los gráficos

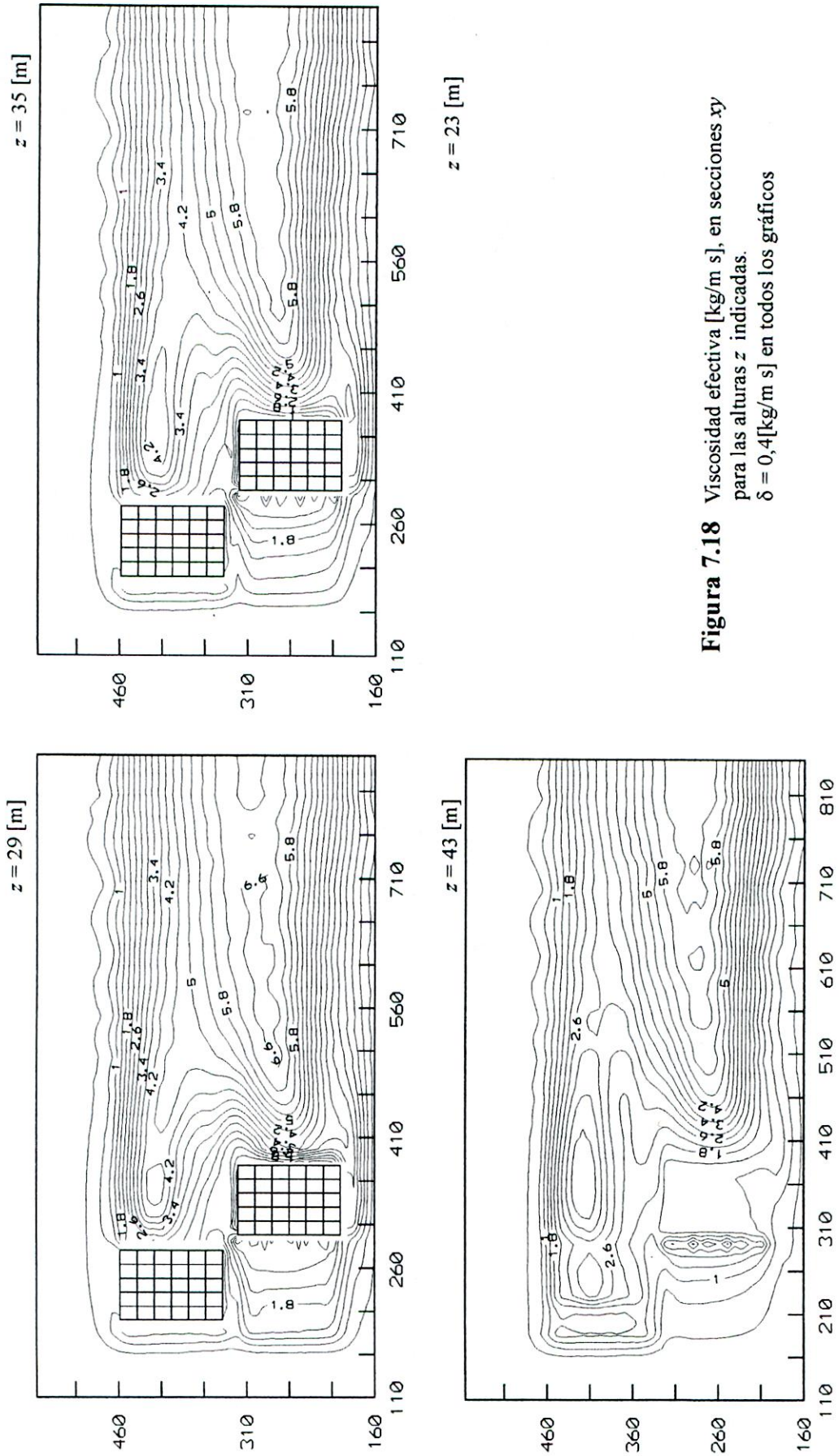


Figura 7.18 Viscosidad efectiva [kg/m s], en secciones xy para las alturas z indicadas.
 $\delta = 0,4[\text{kg/m s}]$ en todos los gráficos

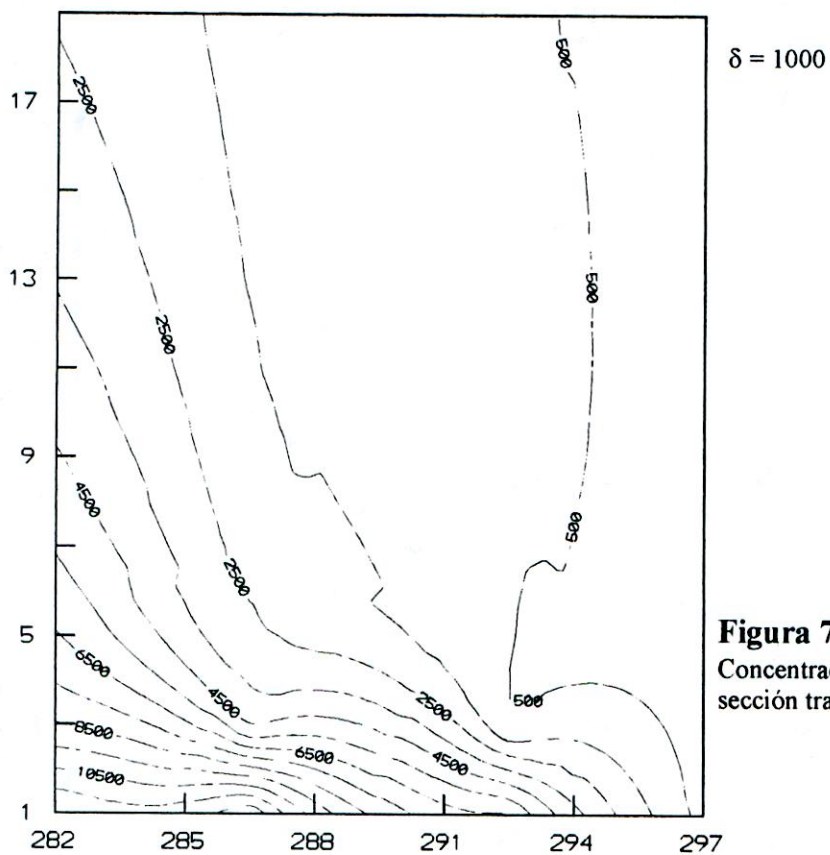


Figura 7.19
Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 2,
sección transversal en $y = 210$ [m]

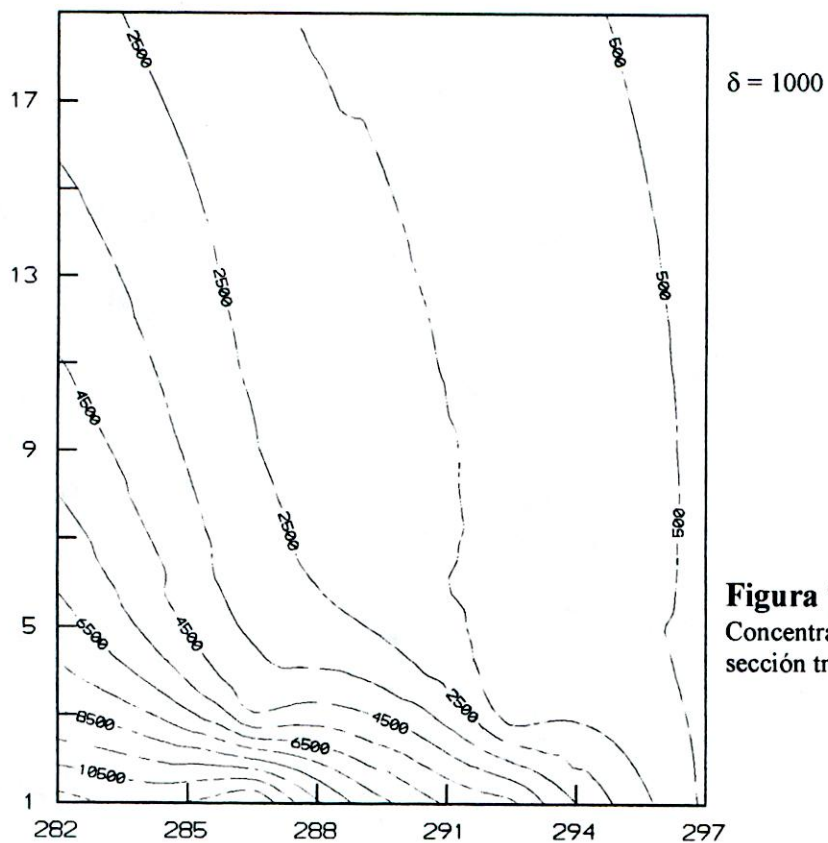


Figura 7.20
Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 2,
sección transversal en $y = 250$ [m]

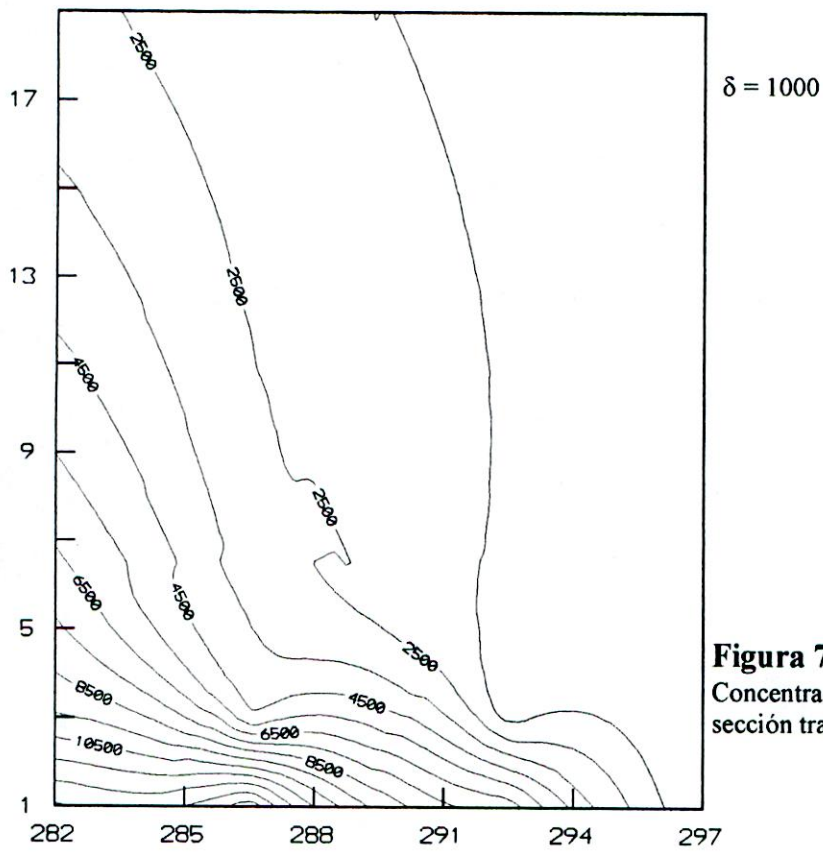


Figura 7.21

Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 2,
sección transversal en $y = 310$ [m]

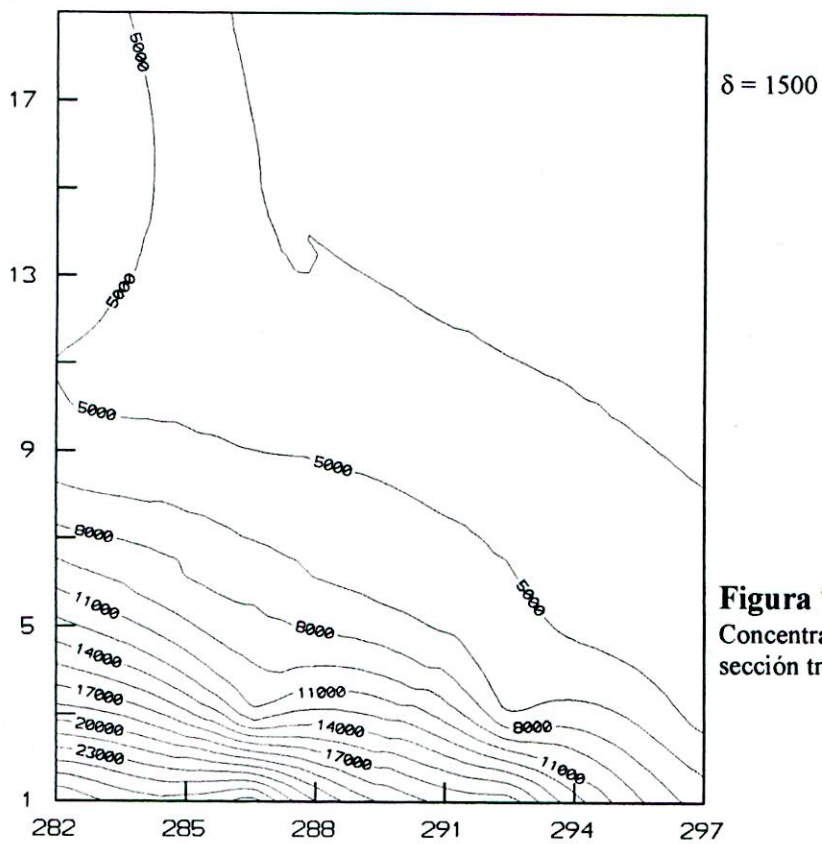


Figura 7.22

Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 2,
sección transversal en $y = 348$ [m]

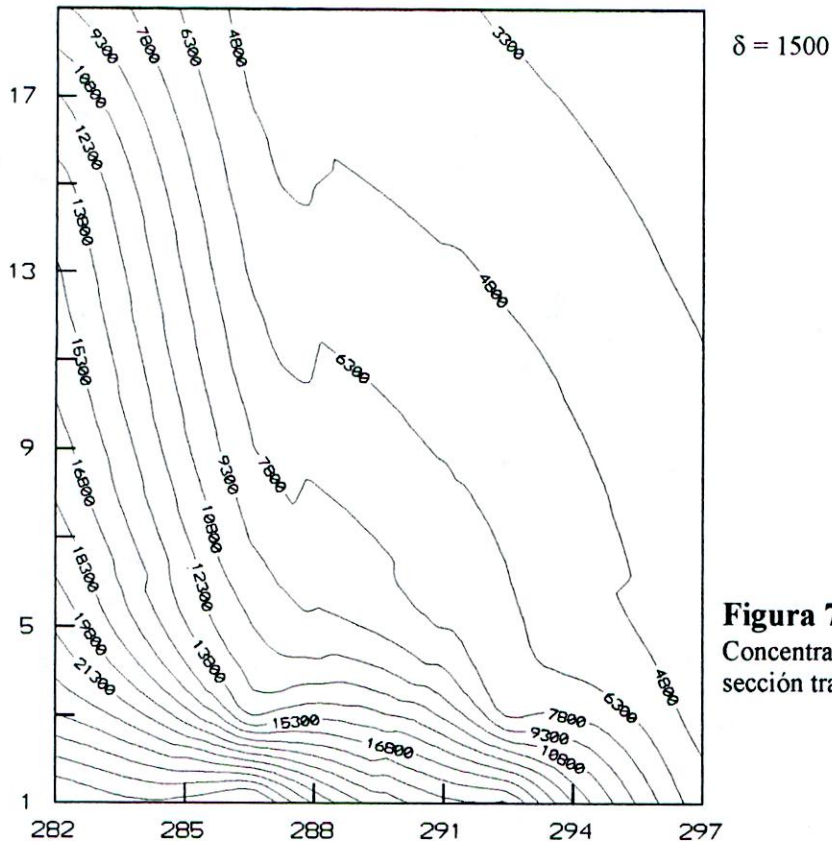


Figura 7.23

Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 2, sección transversal en $y = 388$ [m]

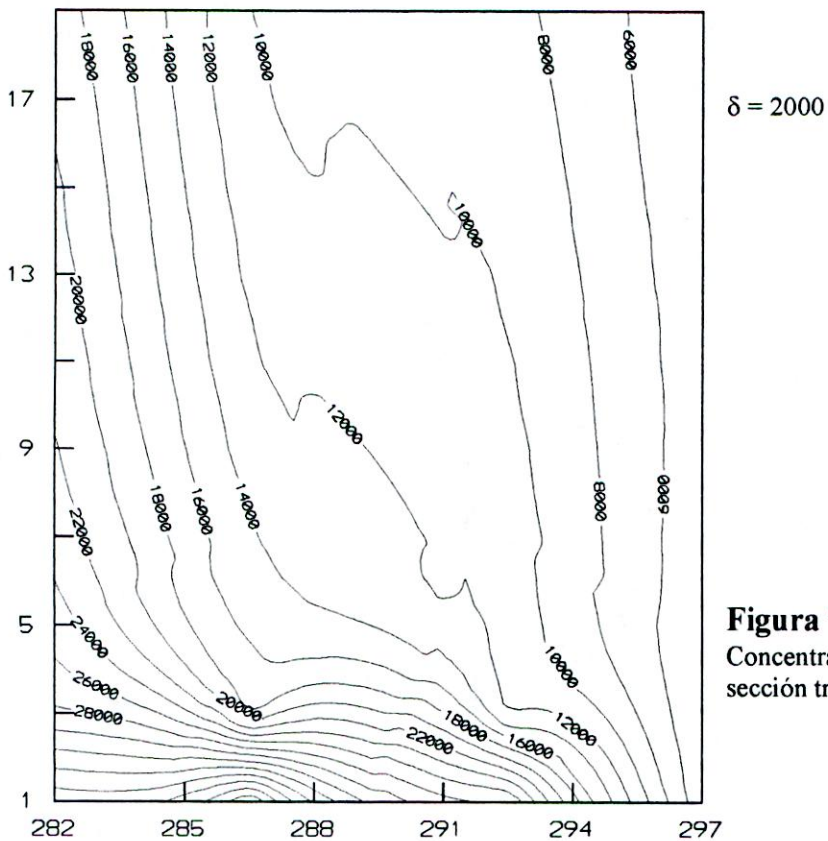
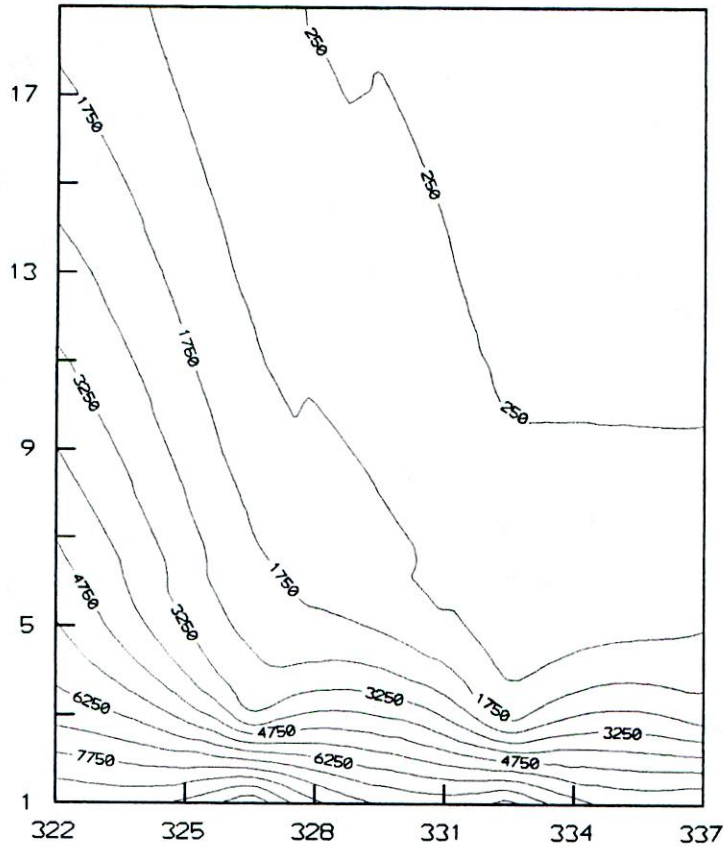


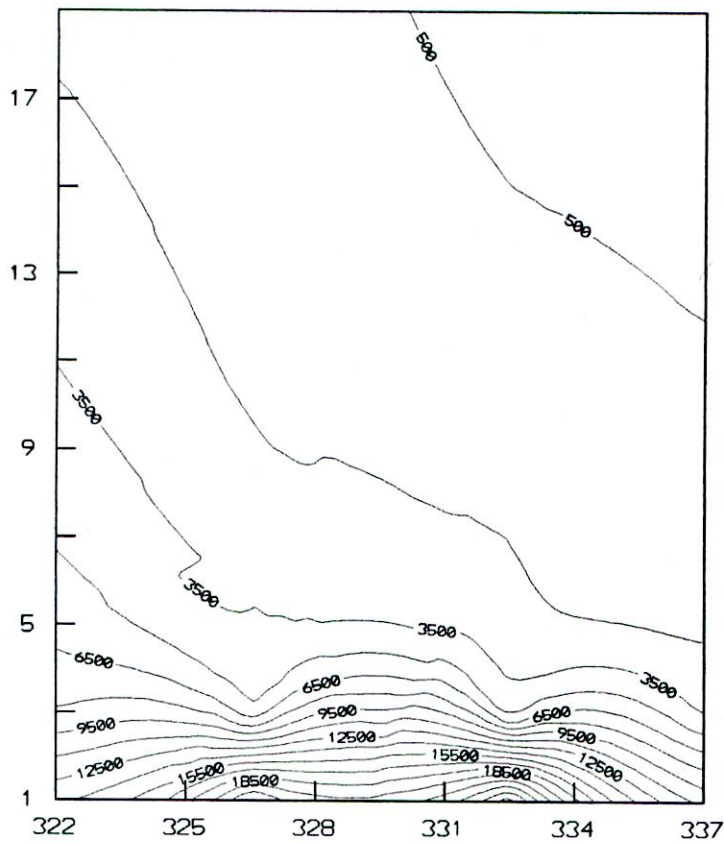
Figura 7.24

Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 2, sección transversal en $y = 448$ [m]



$\delta = 750$

Figura 7.25
 Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 1,
 sección transversal en $x = 208$ [m]



$\delta = 1500$

Figura 7.26
 Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 1,
 sección transversal en $x = 240$ [m]

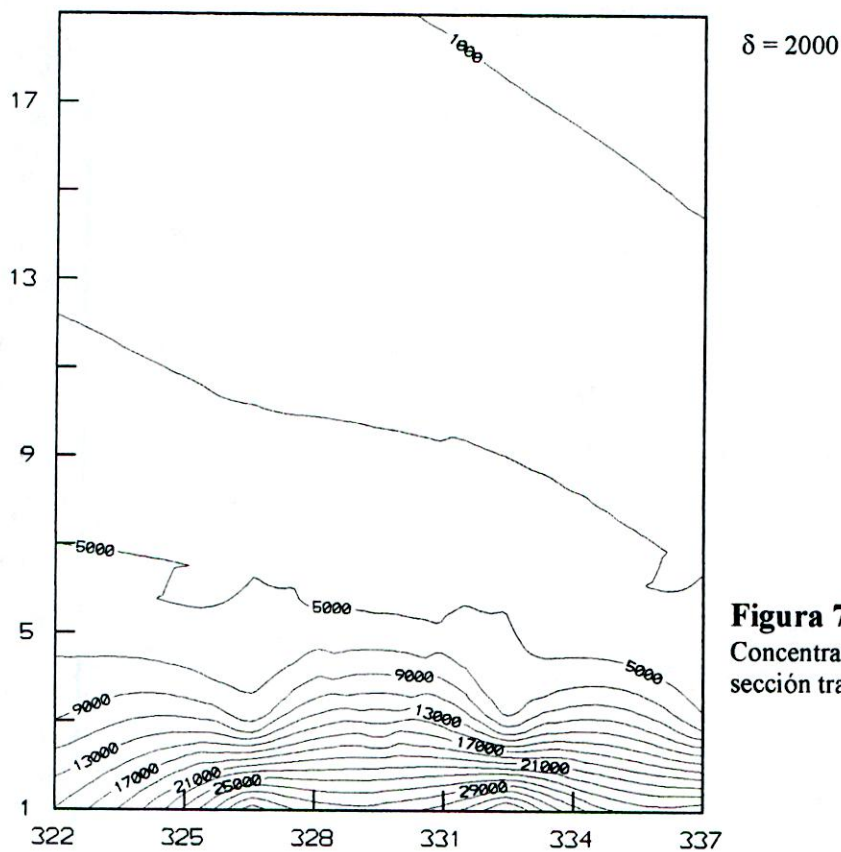


Figura 7.27
Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 1,
sección transversal en $x = 272$ [m]

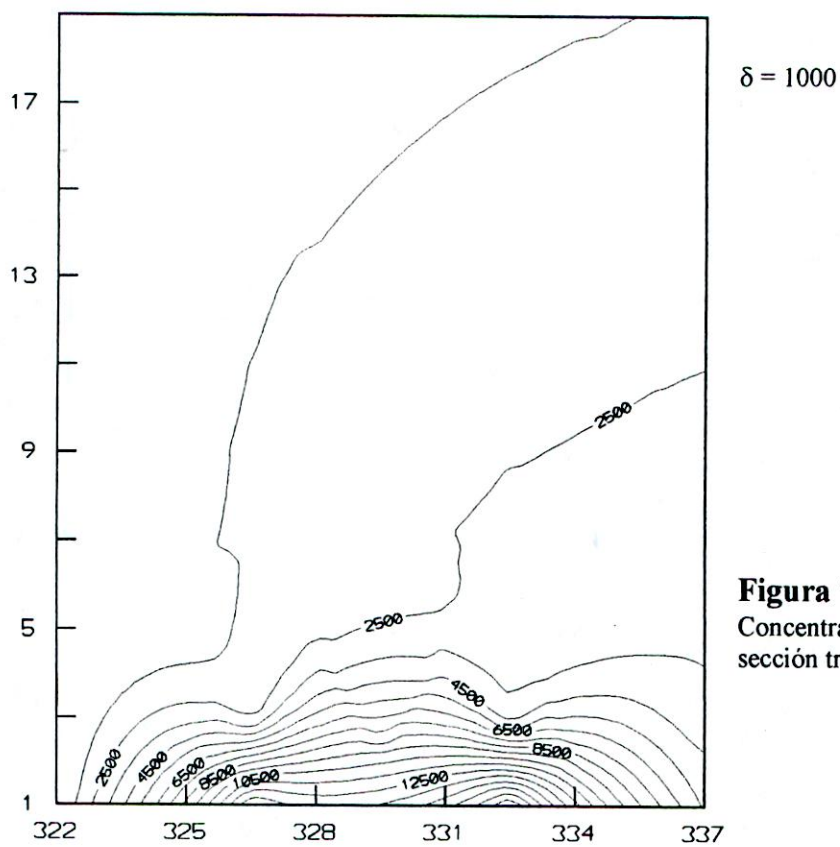
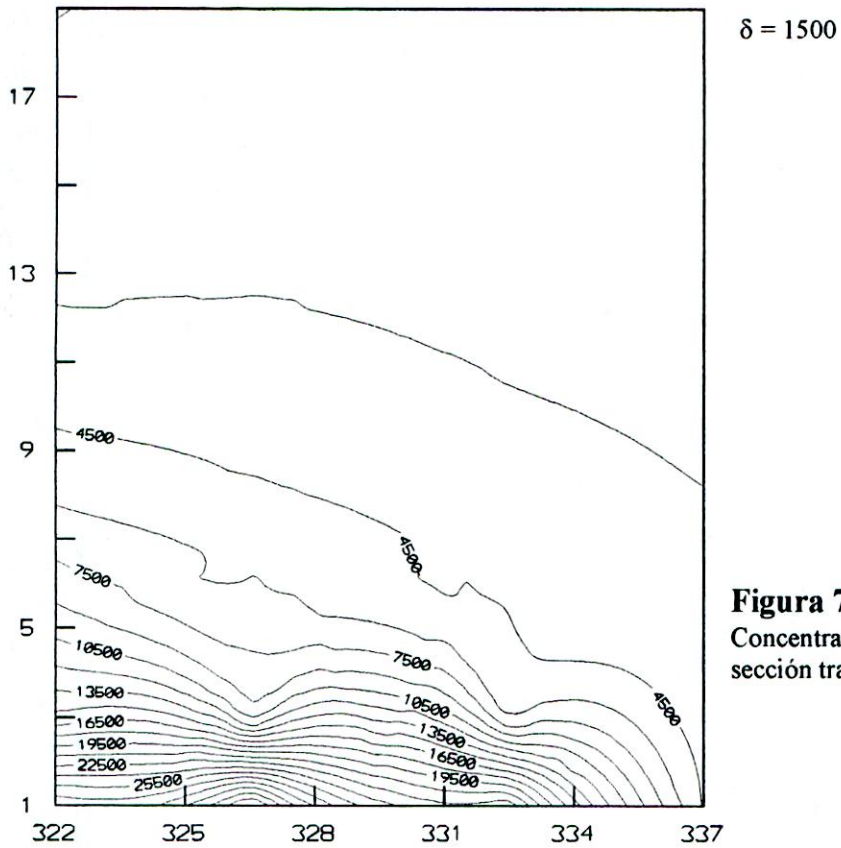
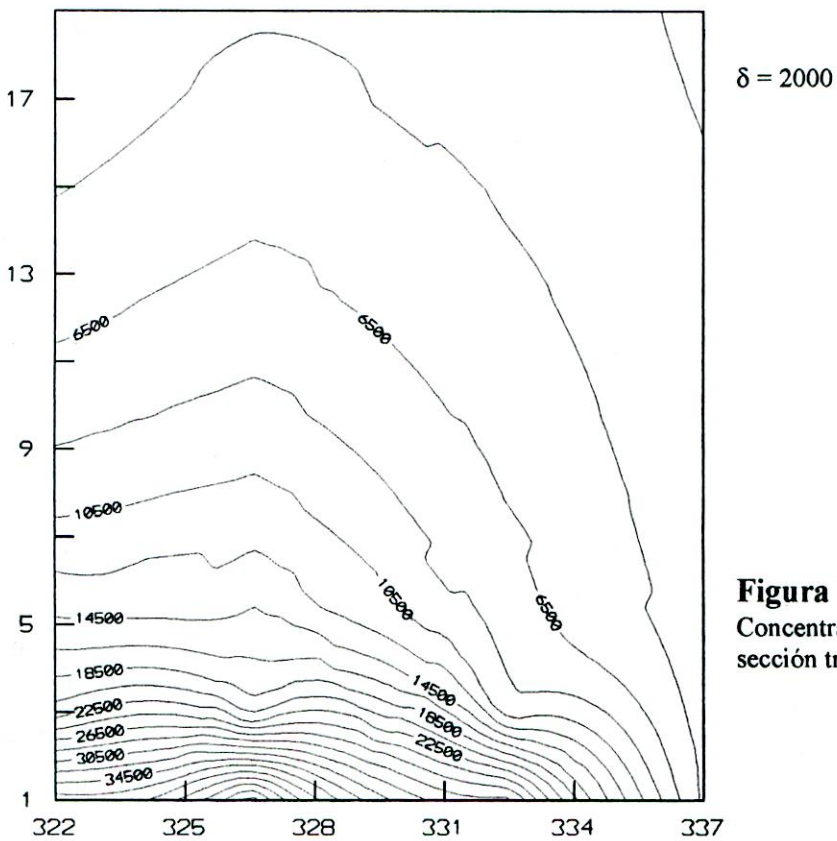


Figura 7.28
Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 1,
sección transversal en $x = 306$ [m]

**Figura 7.29**

Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 1,
sección transversal en $x = 338$ [m]

**Figura 7.30**

Concentración de CO, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en calle 1,
sección transversal en $x = 370$ [m]

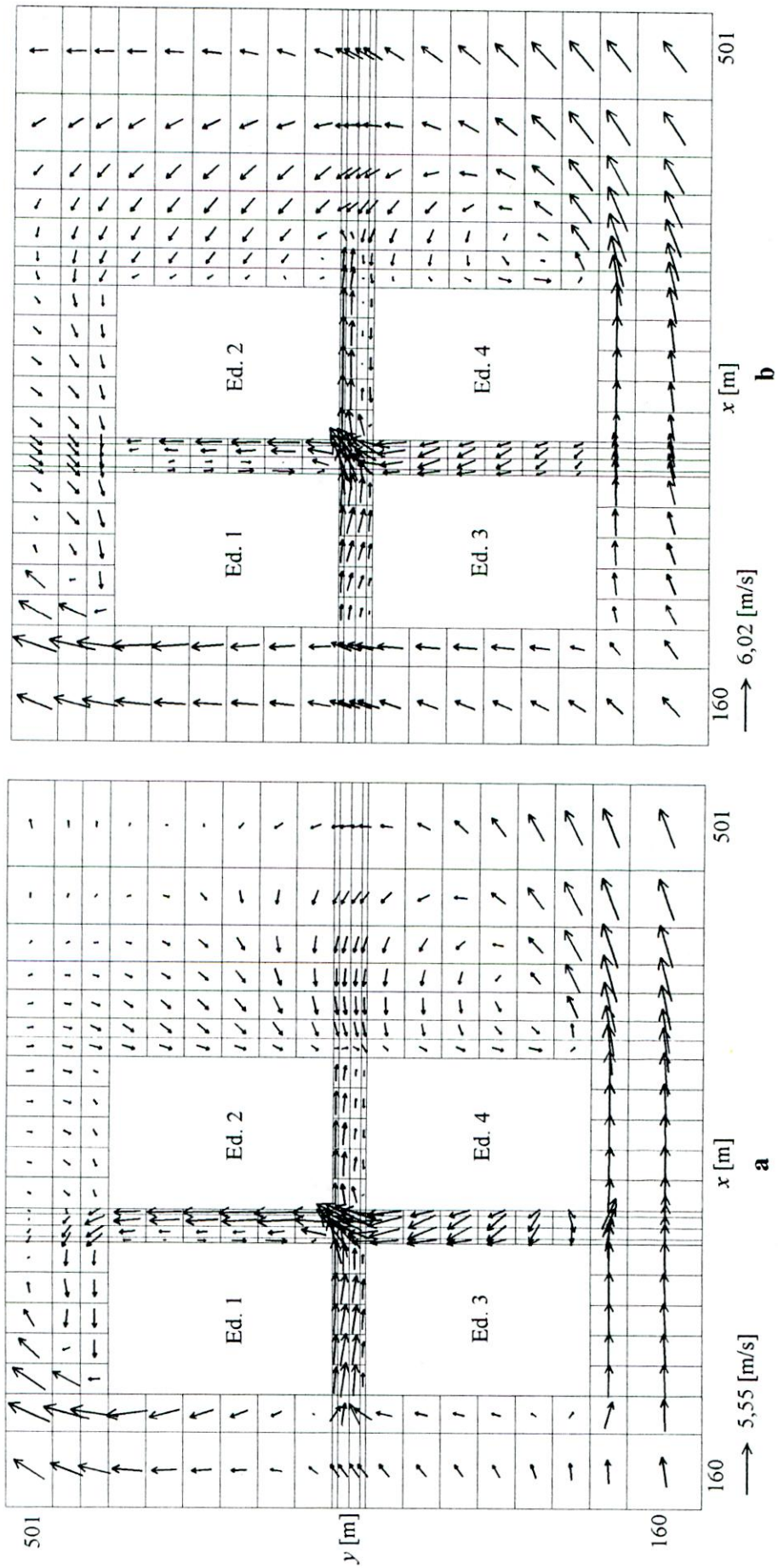


Figura 7.31 Vectores de velocidad en $z = 1$ [m] para: a) viento a 22,5° b) viento a 45°

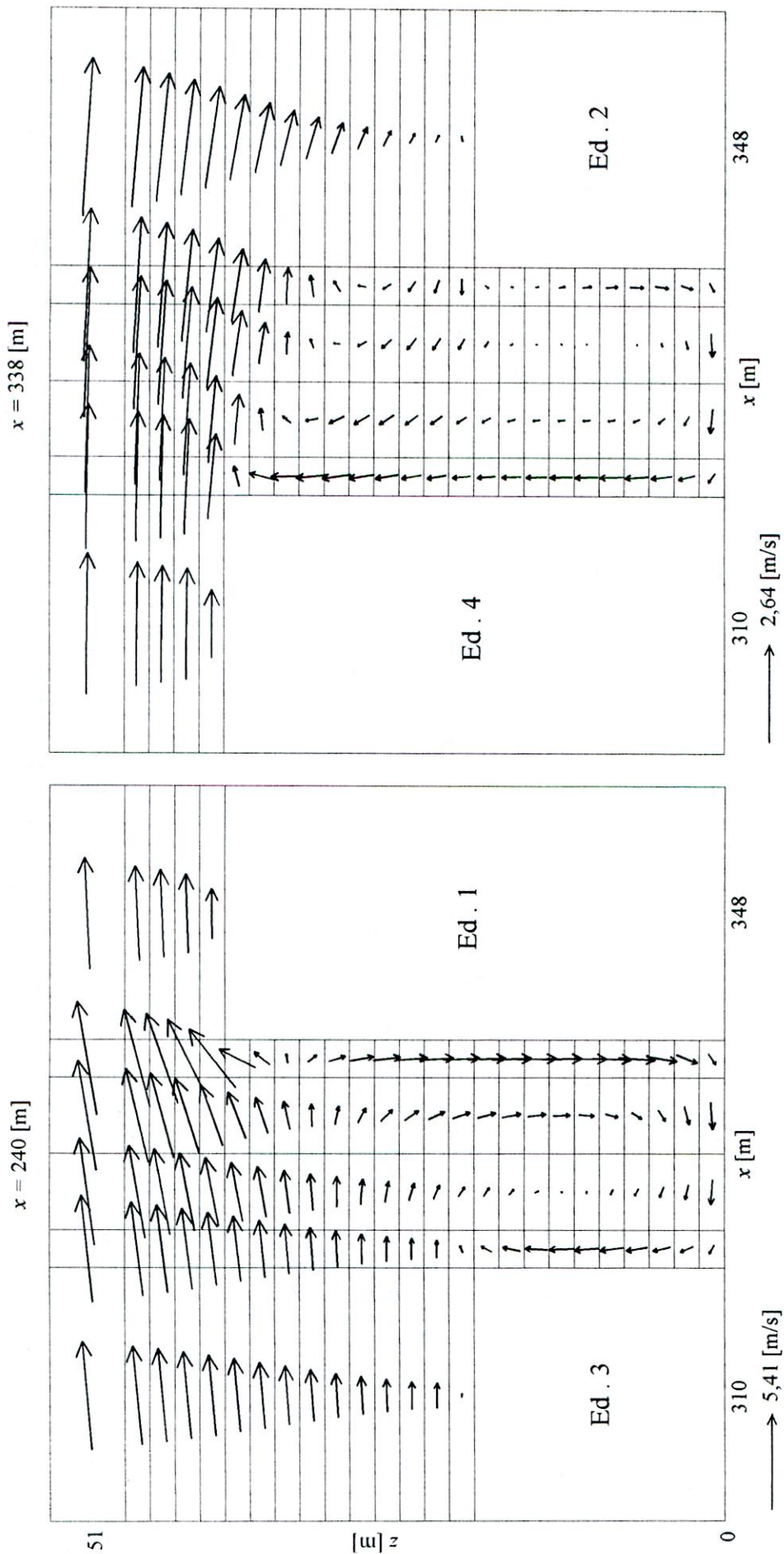


Figura 7.32 Vectores de velocidad para viento a 90° , en secciones transversales de la calle 1, en las posiciones transversales indicadas

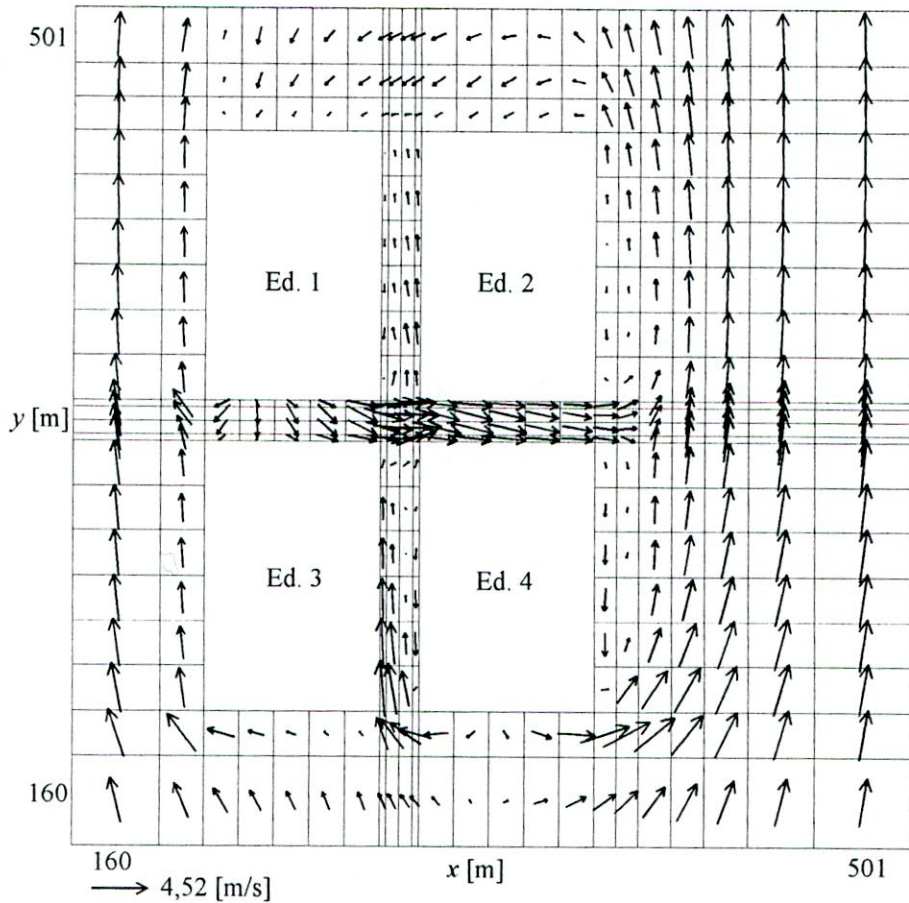
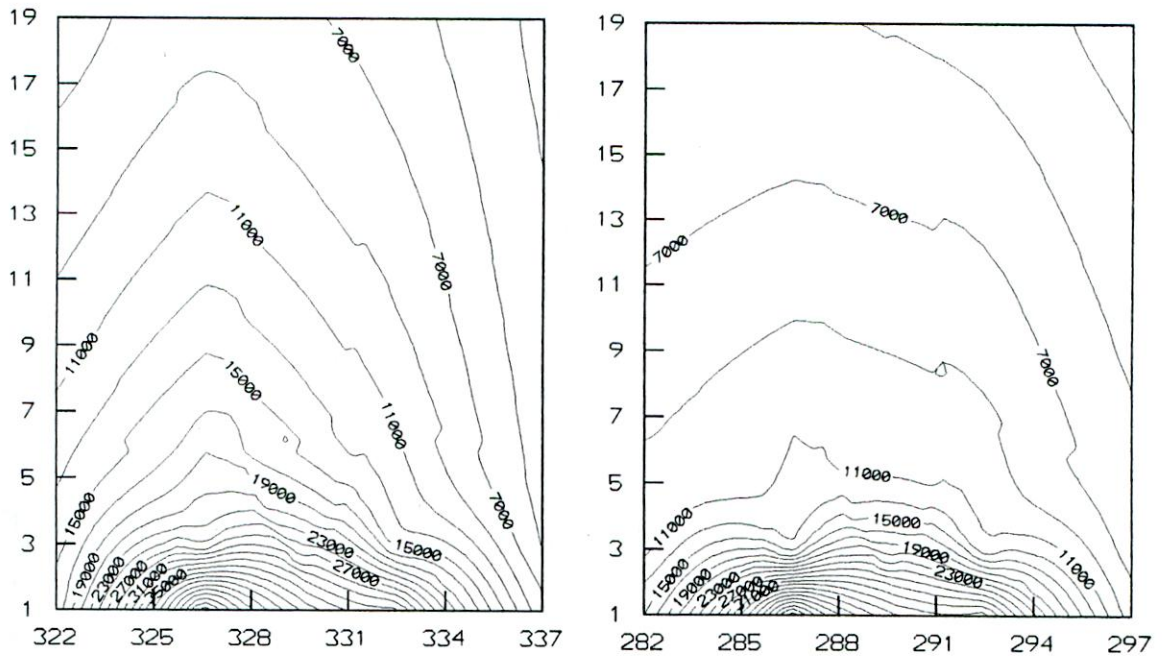


Figura 7.32b Vectores de velocidad en $z = 1$ [m] para viento a 90°



a

Figura 7.33 Concentración de CO [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], con viento a $22,5^\circ$ en:
a) sección transversal de calle 1, en $x = 370$ [m]
b) sección transversal de calle 2, en $y = 448$ [m]

b

($\delta = 2000$)

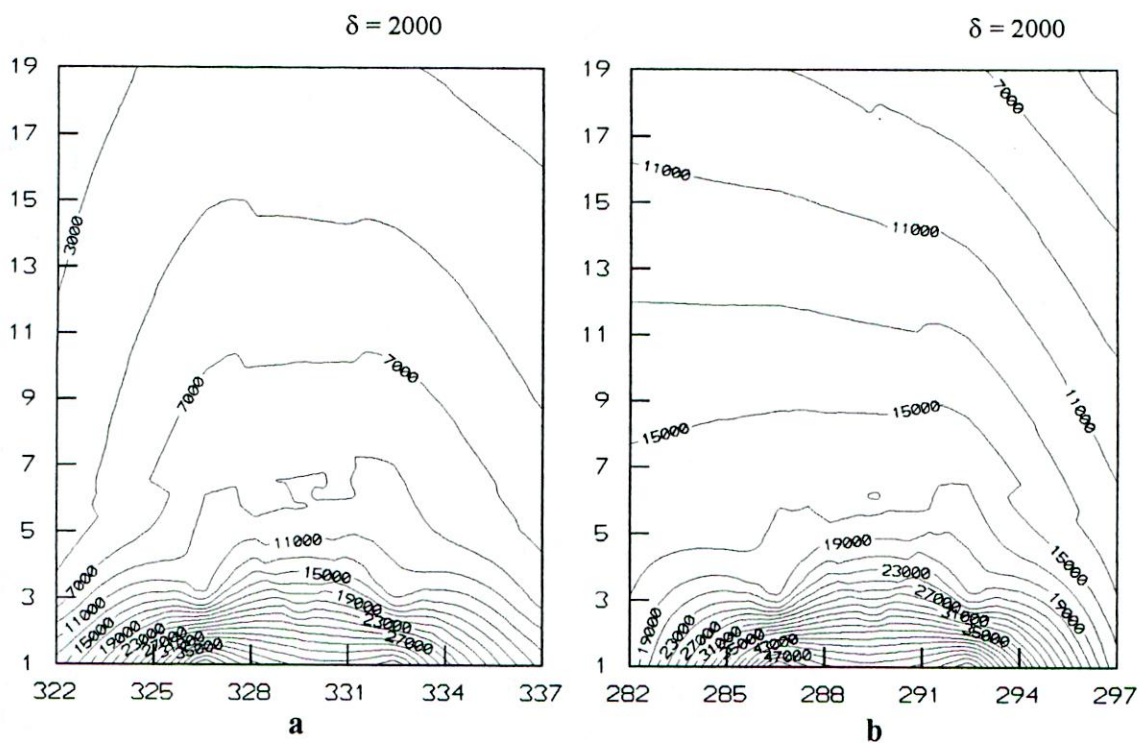


Figura 7.34 Concentración de CO [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], con viento a 45° en:
 a) sección transversal de calle 1, en $x = 370$ [m]
 b) sección transversal de calle 2, en $y = 448$ [m]

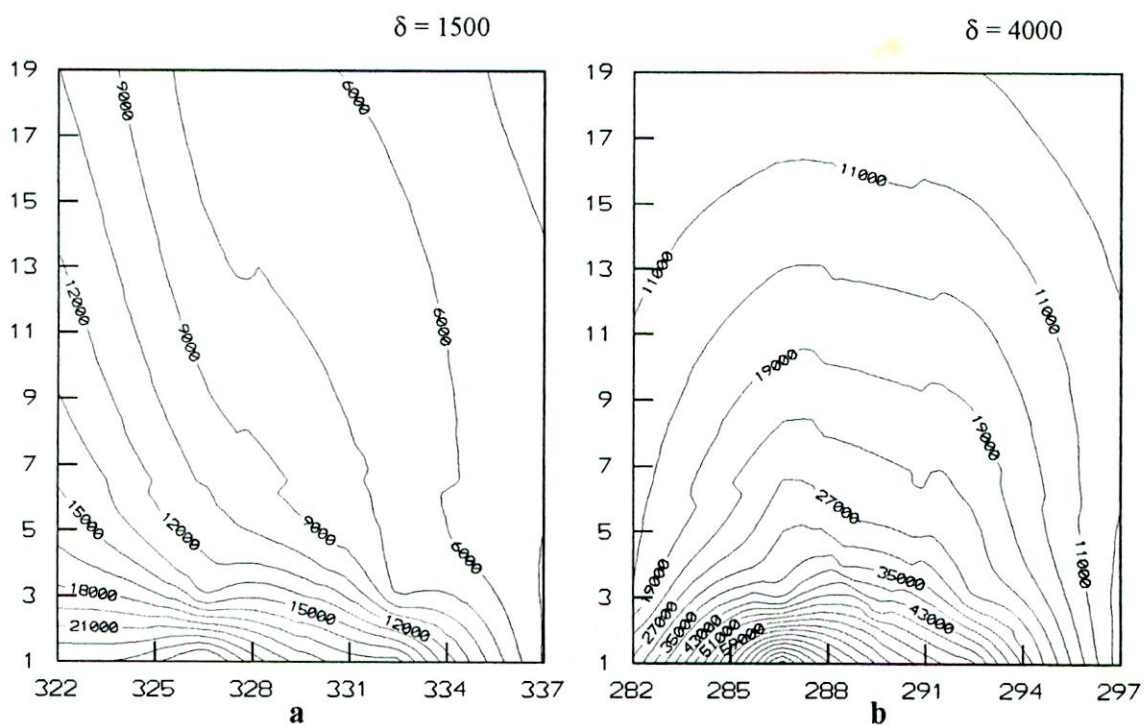


Figura 7.35 Concentración de CO [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], con viento a 90° en:
 a) sección transversal de calle 1, en $x = 370$ [m]
 b) sección transversal de calle 2, en $y = 448$ [m]

7.2 Caso 2: Calles en un Centro Urbano

El segundo caso modelado es una extensión del anterior. Se tiene ahora un conjunto de edificaciones que representan un sector mayor dentro de una ciudad. El área comprende 20 bloques de 60×60 [m²], atravesados por 7 calles, como se ilustra en la figura 7.36. Los bloques del sector central se han dividido en 9 sitios, en los cuales los edificios tienen diferentes alturas: 20, 40 y 60 [m]; en el resto, la altura se mantiene uniforme en un nivel de 20 [m]. Hay por lo tanto 52 edificios en la zona estudiada. La distribución de alturas puede verse en la figura 7.37, donde se señalan además las coordenadas de los ejes centrales de las calles. Las calles son igualmente de 18 [m] de ancho total, con una calzada de 12 [m]. La malla de discretización consta nuevamente de $31 \times 31 \times 31$ nodos, y se presenta en las figuras 7.38 y 7.39.

Los cálculos se efectuaron, como en el caso anterior para las direcciones de viento exterior de 0° , $22,5^\circ$, 45° y 90° respecto al eje x , y las condiciones de contorno en los límites del dominio de solución son las mismas: las velocidades en los planos de entrada se prescriben según un perfil de potencia con exponente 0,14 de estabilidad neutra, y una velocidad de 5 [m/s] a 10 [m] de altura. En los planos de salida se supone una derivada nula para todas las variables, y se utilizan funciones de pared sobre todas las superficies de los edificios y el suelo. Como factor de emisión medio en las calles se toma igualmente 15 [g/km] por vehículo. Las calles 2, 5 y 6, que pasan directamente por el centro, se tomaron como calles principales, con un tráfico de 4000 vehículos por hora. En las calles periféricas 1, 3, 4 y 7 se supuso un tráfico menor, de 2000 vehículos por hora.

Se producen en este caso fenómenos similares a los observados en el caso anterior: recirculación detrás de edificios, circulación transversal del aire en el interior de las calles, elevada turbulencia en la estela y sobre los edificios, etc., por lo que los resultados para el campo de flujo se presentan en forma más resumida. Las figuras 7.40 a 7.43 muestran el campo de velocidades a baja altura en planos horizontales, para las cuatro direcciones de viento. Para $\alpha = 0^\circ$ se aprecia como el aire tiende a estancarse en el segundo tramo de las calles 1, 2 y 3, paralelas a la dirección del viento, debido al flujo que se produce en la calle transversal 5 cuando el viento choca con los edificios más altos del sector central, y desciende hacia esa calle. Esto favorece la ventilación de la calle 5 en esa zona, pero dificulta el avance del flujo abajo del aire en las calles 1, 2 y 3. La velocidad vuelve a disminuir en el cuarto tramo de las calles 2 y 3, esta vez por hallarse a sotavento de los edificios más altos. Estas zonas de relativa calma en el

interior del sistema de calles producen máximos locales de concentración que son claramente visibles en los gráficos 7.46 y siguientes.

Para las otras direcciones de viento se tienen situaciones análogas, con zonas de estancamiento en diversos puntos, aumentando en general los vientos en los cruces de calles. Con $\alpha = 0^\circ$ y $\alpha = 90^\circ$ la velocidad del flujo a lo largo de las calles paralelas al viento externo disminuye hacia las zonas más alejadas del sector de ingreso del viento a esta área de la ciudad. Para $\alpha = 22,5^\circ$ y $\alpha = 45^\circ$ las mayores velocidades en promedio se obtienen en las calles 1 y 4, tras el impacto del viento con el bloque de edificios altos limitado por las calles 1, 2, 4 y 5, el cual actúa como "borde de ataque" del conjunto de edificaciones elevadas del sector central.

Una vista de las velocidades verticales se tiene en la figura 7.44, para una sección vertical tomada entre las calles 1 y 2, a través de los edificios más altos, cuando la dirección del viento es 0° . Pueden notarse los vórtices detrás de cada torre y la circulación transversal en el interior de las calles 4, 5, 6 y 7. La energía cinética turbulenta para esta misma sección se grafica en la figura 7.45. La turbulencia es máxima frente a la fachada del primer edificio a barlovento y sobre los techos, debido a la elevada producción por los gradientes de velocidad, y es transportada convectivamente flujo abajo.

En las figuras 7.46 a 7.52 se muestran las concentraciones máximas de CO calculadas a lo largo del eje central de cada calle, para las cuatro direcciones de viento. Los valores de las abscisas en estos gráficos coinciden con las coordenadas de los ejes de las calles, como se indicó en la figura 7.37, de modo que cada uno corresponde al cruce de la calle en cuestión con las calles transversales a su dirección. En algunos casos las concentraciones máximas ocurren en los cruces, al confluir las corrientes que transportan el CO emitido en las calles intersectadas. En otros, la concentración es máxima, o se intensifica localmente, hacia la zona media de algún tramo de la calle, debido a la acumulación por deficiente circulación de aire. Las concentraciones máximas calculadas en cada calle, independiente del punto donde ocurran se resumen en la tabla 7.3.

Como cabe esperar, las concentraciones máximas se producen en las calles principales 2, 5 y 6. En la calle 2 la dirección de viento más desfavorable es 0° , debido a las zonas de estancamiento que se forman, y al transporte convectivo de contaminante hacia el final de la calle. Estos dos factores causan la concentración máxima que ocurre en el tramo entre los cruces con las calles 6 y 7. El efecto de la

acumulación entre las cruces con las calles 4 y 5 se manifiesta en el incremento local que la concentración experimenta en ese punto. Para la calle 5 las condiciones más desfavorables se tienen para $\alpha = 0^\circ$ y $\alpha = 90^\circ$. En el primer caso ocurren hacia el principio de la calle, producto del flujo relativamente detenido antes del cruce con la calle 1 y a la convección hacia este cruce del polutante proveniente de los tramos siguientes de la calle. La situación se invierte para $\alpha = 90^\circ$, y el CO es transportado hacia el final de la calle 5, haciéndose entonces máxima la concentración allí. Para la calle 6 los vientos más desfavorables son $22,5^\circ$ y 45° .

En las calles periféricas se dan condiciones similares. Para las calles 3 y 7 son preferibles los vientos paralelos a ellas, mientras que para otras direcciones estas calles quedan situadas flujo abajo de la mayor parte de las fuentes, y la concentración que presentan se incrementa. En cambio, en las calles 1 y 4 las direcciones de viento paralelas a ellas producen las situaciones más adversas, debido al arrastre del polutante hacia el final de la calle, como ocurre para la calle 4 con $\alpha = 90^\circ$, o al ingreso de polutante proveniente de las calles transversales, como ocurre para la calle 1 con $\alpha = 0^\circ$, la cual recibe el aporte del flujo de la calle 5, como lo muestran el campo vectorial de la figura 7.40 y el aumento abrupto de la concentración en la calle 1 luego del cruce con la calle 5.

Tabla 7.3 Máximas concentraciones de CO calculadas en las calles, en [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]

calle	$\alpha = 0^\circ$	$\alpha = 22,5^\circ$	$\alpha = 45^\circ$	$\alpha = 90^\circ$
1	15.755	8.349	8.024	5.922
2	31.378	24.077	24.008	12.913
3	9.939	11.664	14.708	14.777
4	6.294	5.602	6.051	8.327
5	18.163	12.198	11.483	19.623
6	20.407	23.958	27.800	16.907
7	13.249	11.968	11.123	8.787

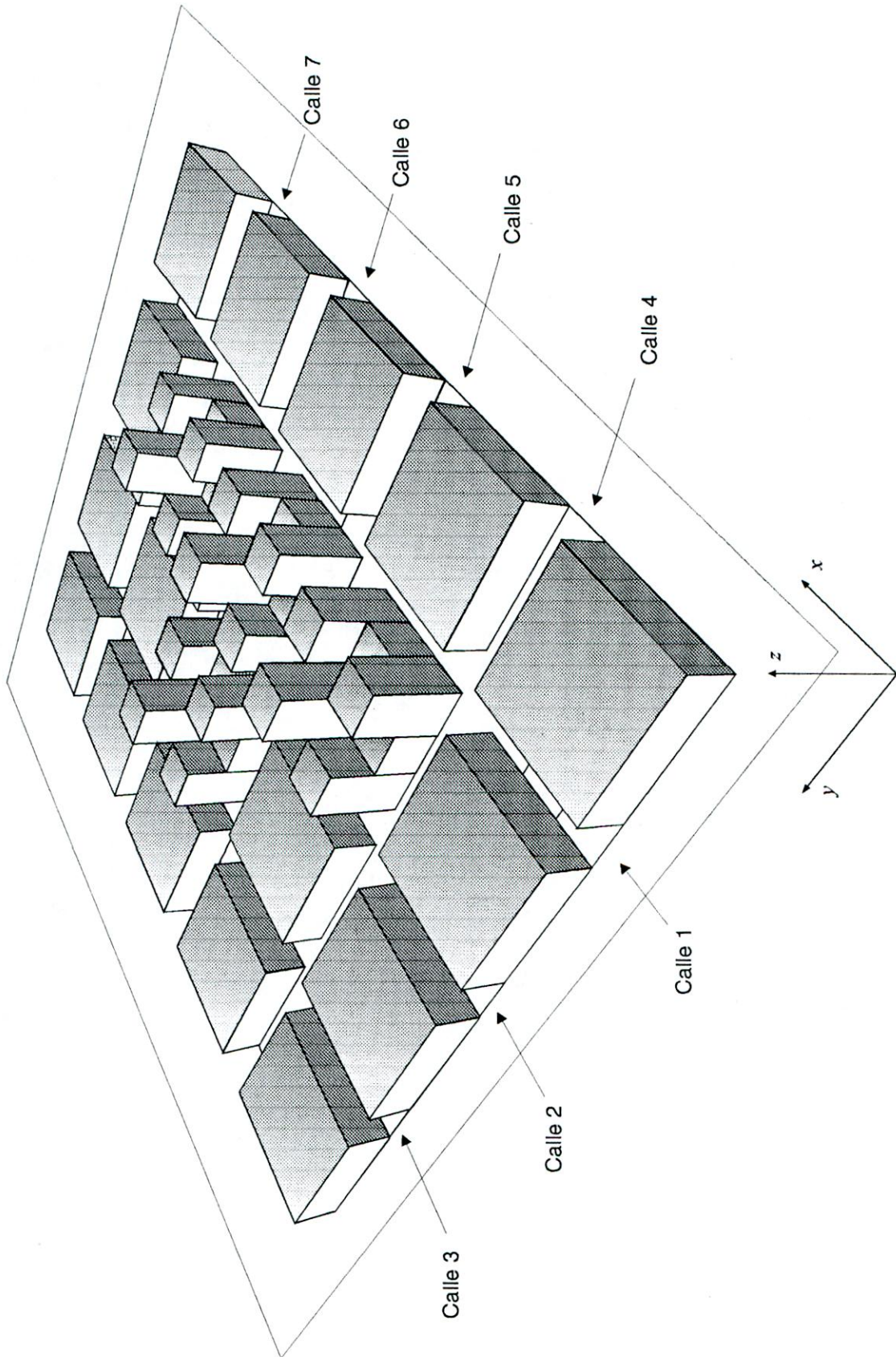


Figura 7.36 Representación esquemática de la geometría para el caso 2.

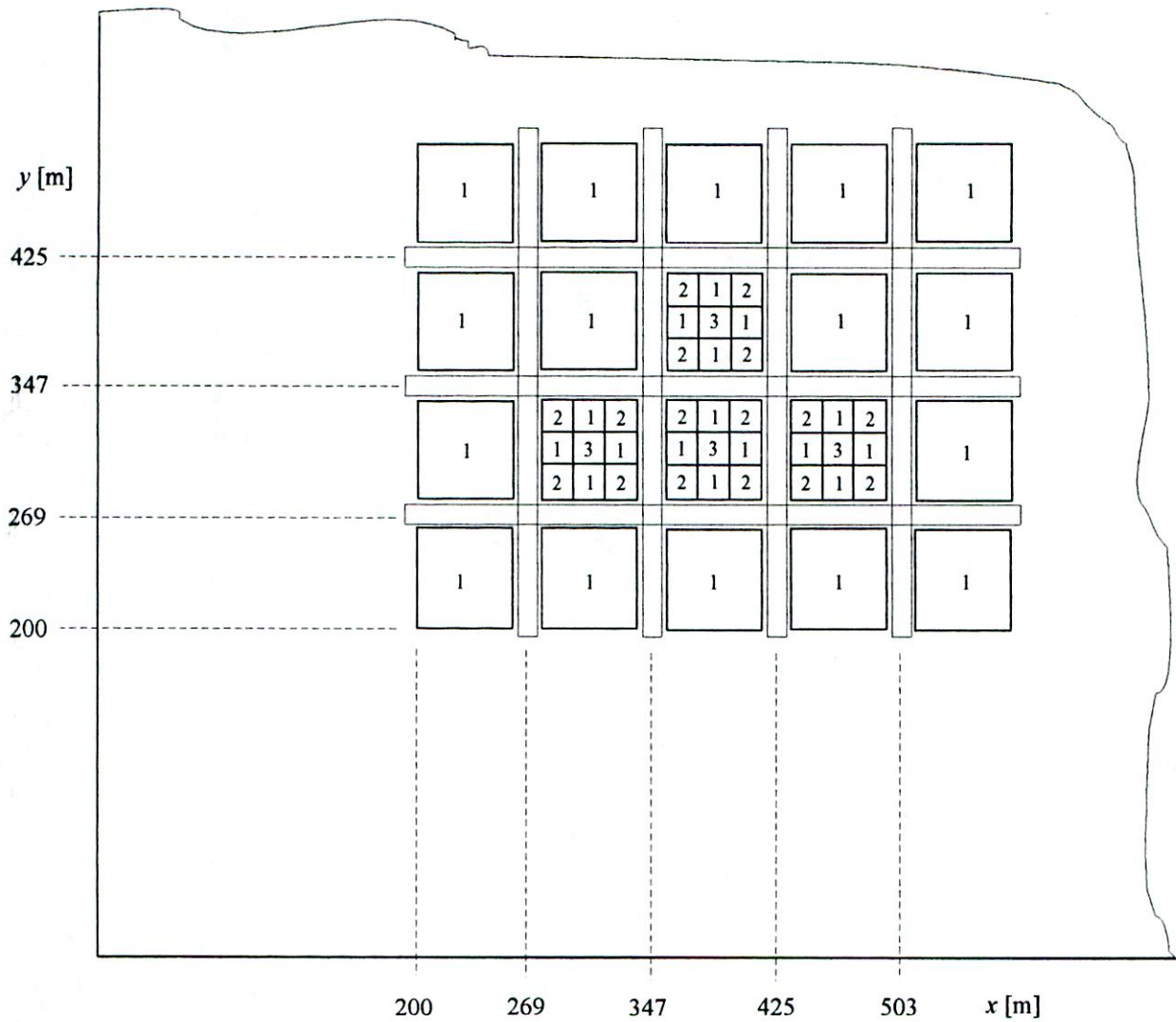


Figura 7.37 Vista superior de la zona con edificaciones y calles.

Altura de edificaciones:

① : 20 [m]

② : 40 [m]

③ : 60 [m]

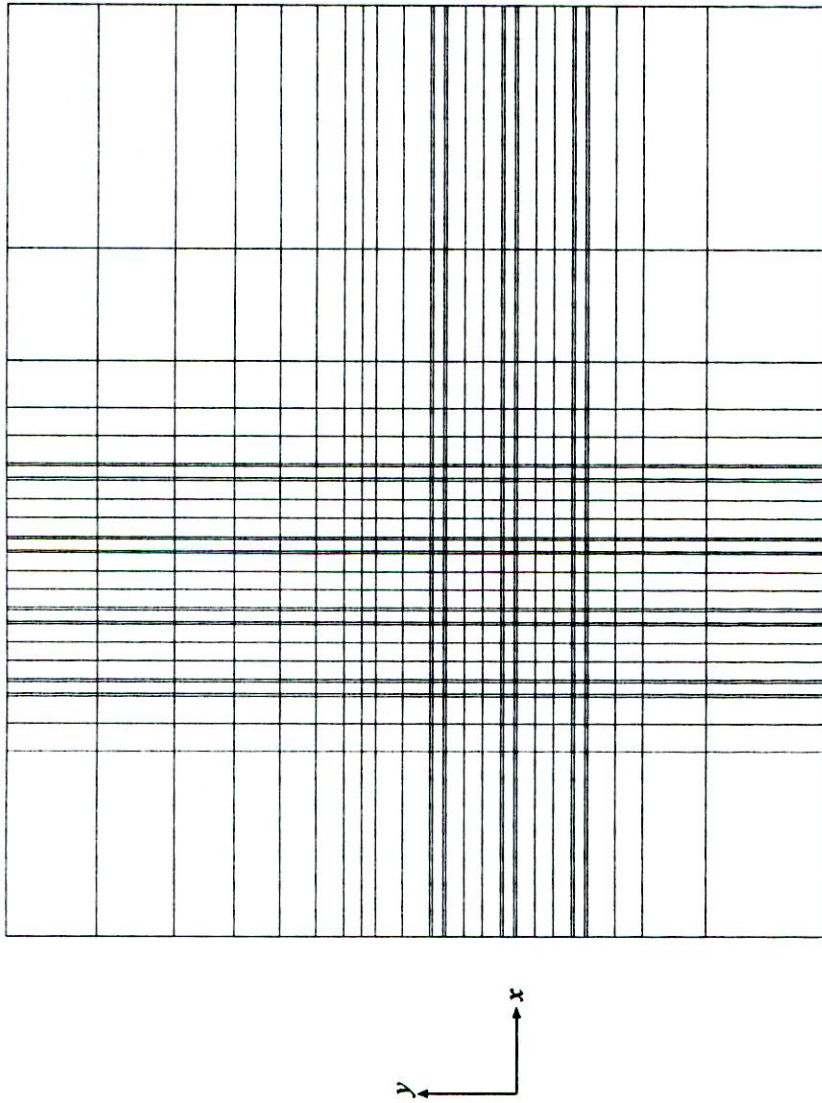


Figura 7.38 Vista superior de la malla de discretización para el caso 2.

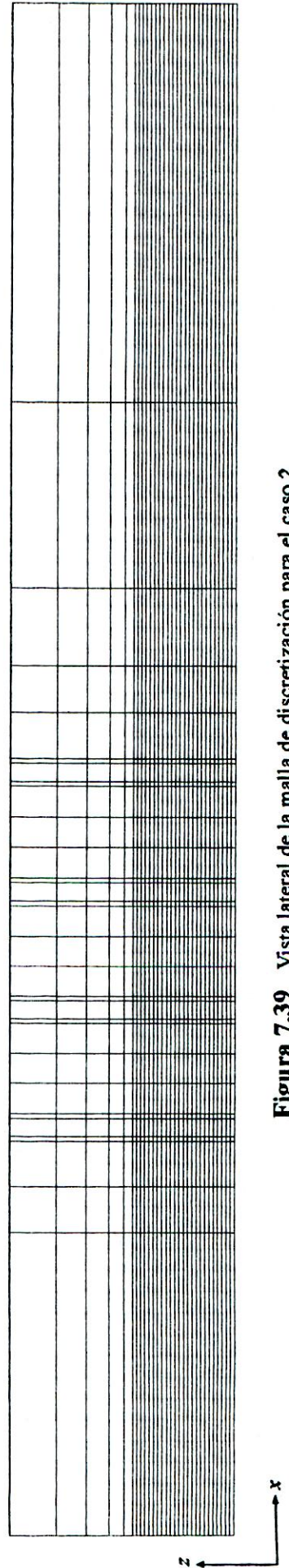


Figura 7.39 Vista lateral de la malla de discretización para el caso 2.

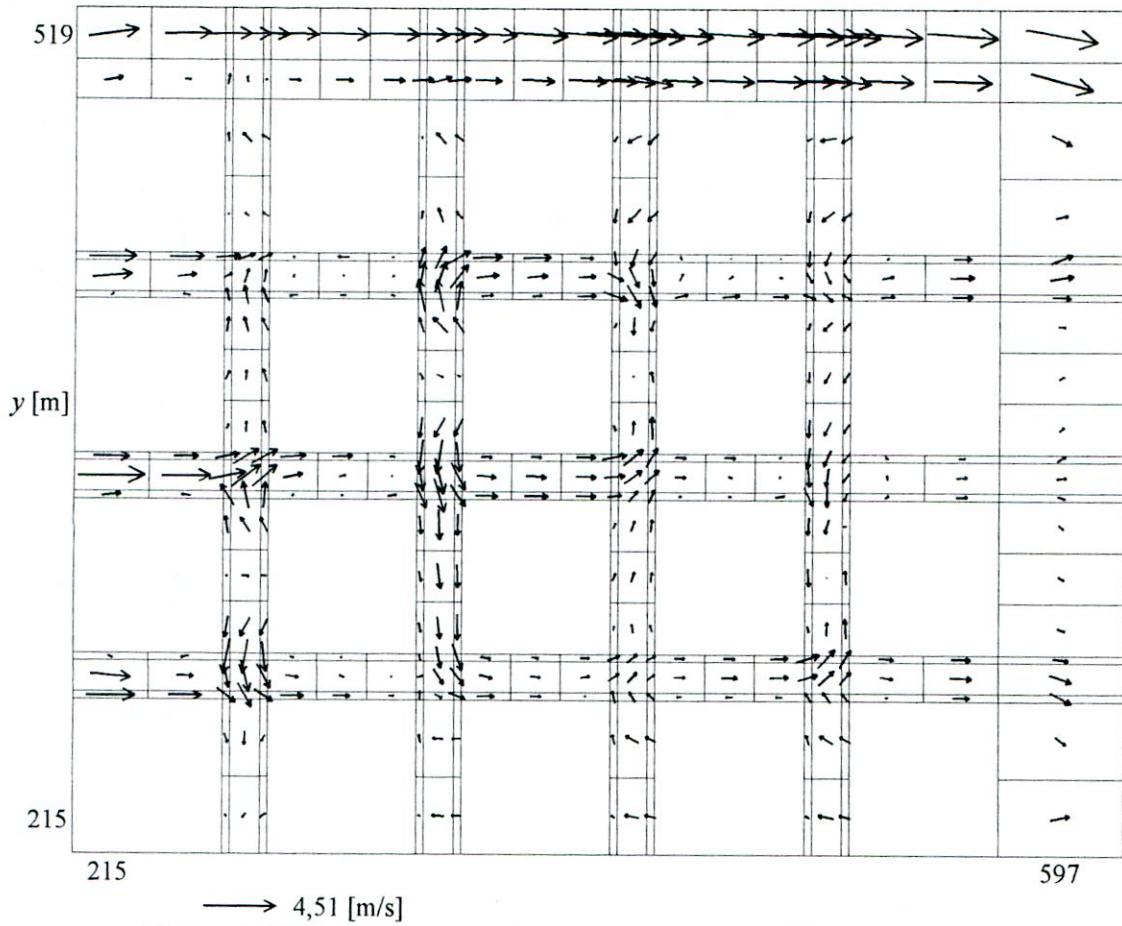


Figura 7.40 Vectores de velocidad para plano xy en $z = 1,43$ [m], viento a 0°

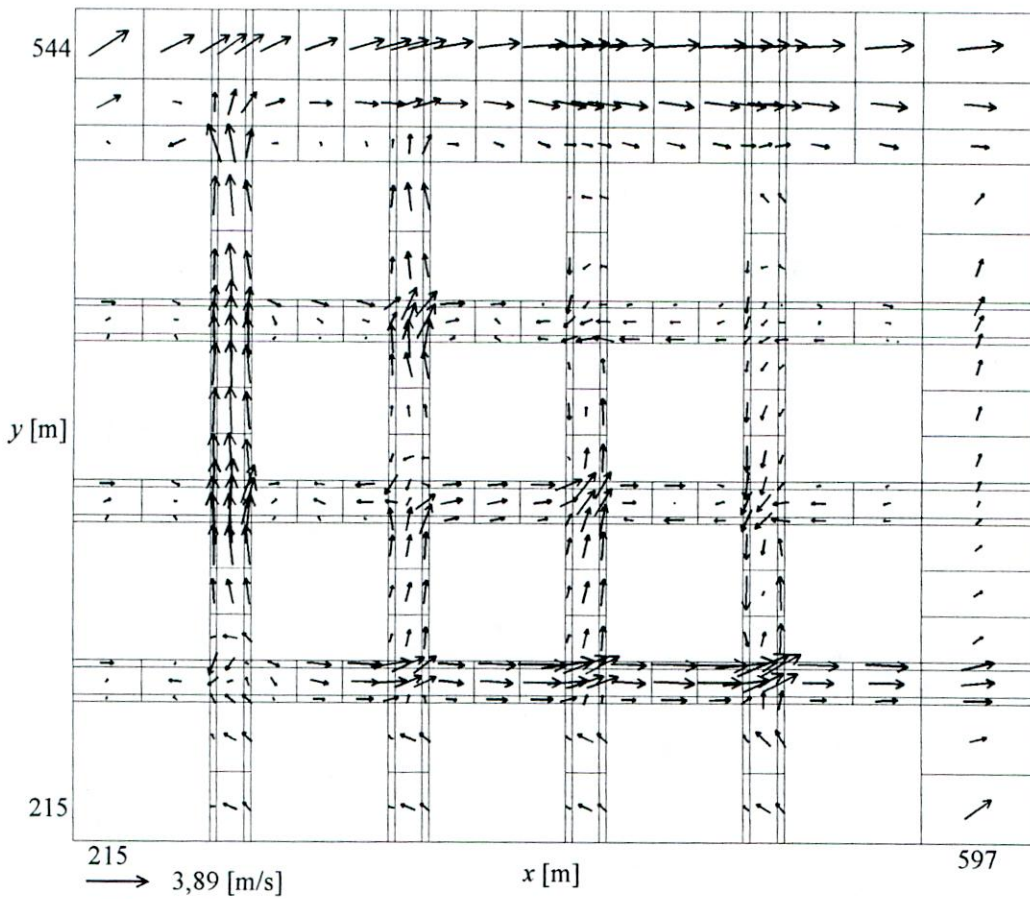


Figura 7.41 Vectores de velocidad para plano xy en $z = 1,43$ [m], viento a $22,5^\circ$

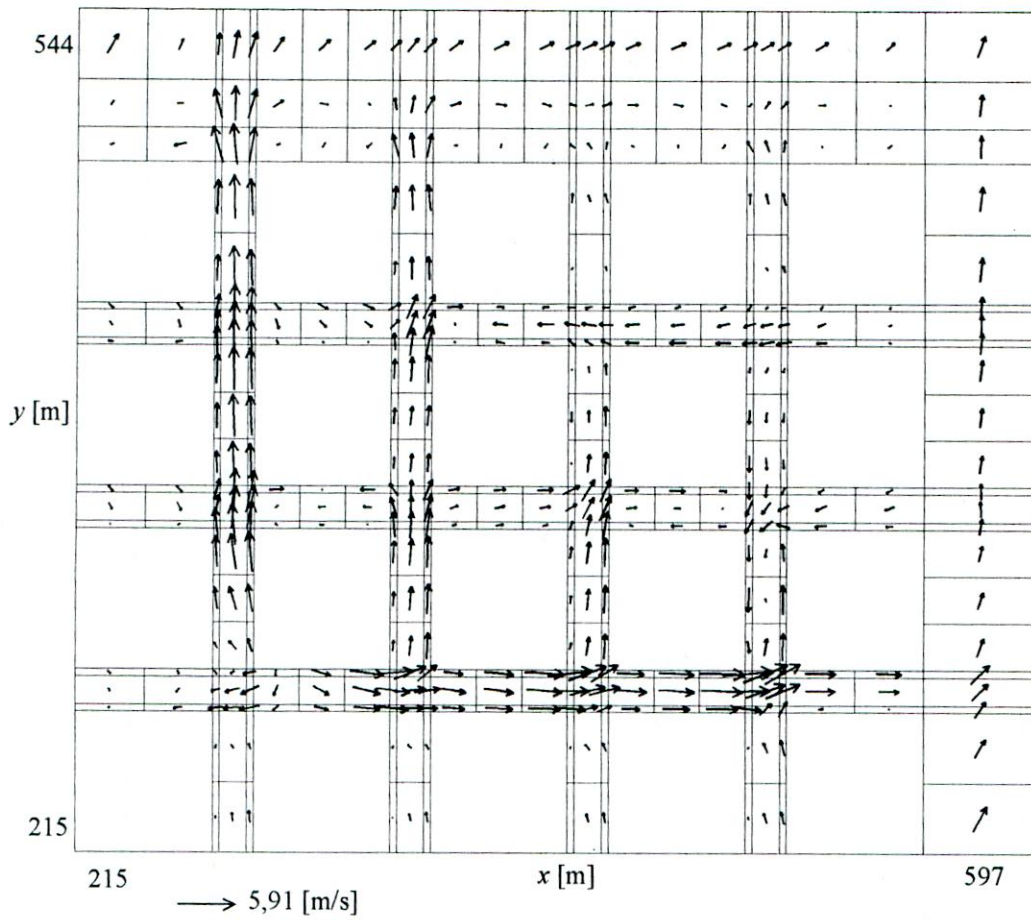


Figura 7.42 Vectores de velocidad para plano xy en $z = 1,43$ [m], viento a 45°

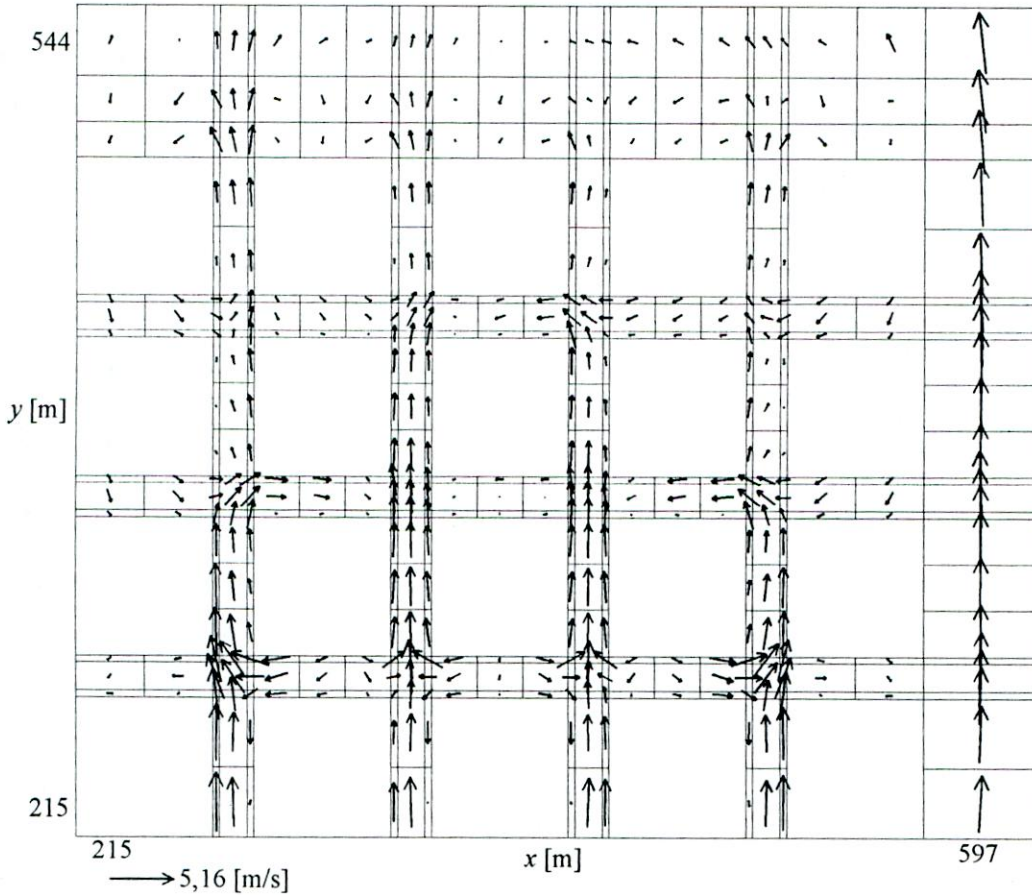


Figura 7.43 Vectores de velocidad para plano xy en $z = 1,43$ [m], viento a 90°

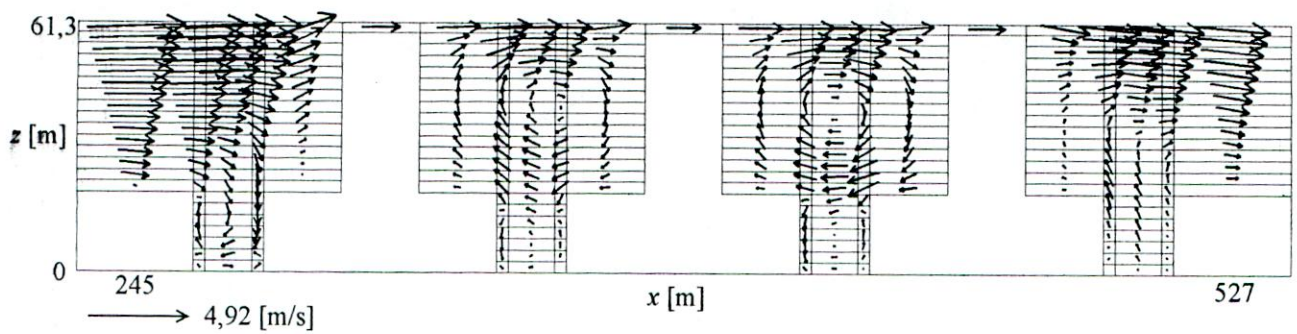


Figura 7.44 Vectores de velocidad en plano xz para $y = 308$ [m], viento a 0°

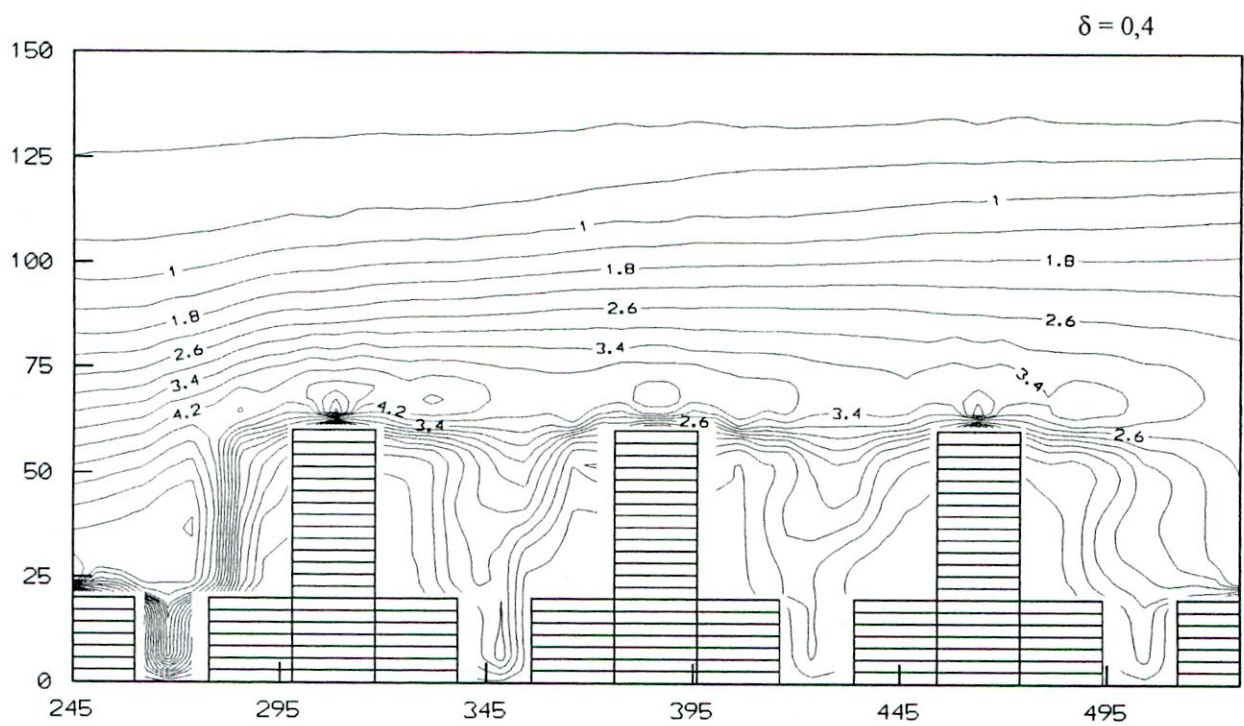


Figura 7.45 Energía cinética turbulenta [m^2/s^2], para plano xz en $y = 308$ [m], viento a 0°

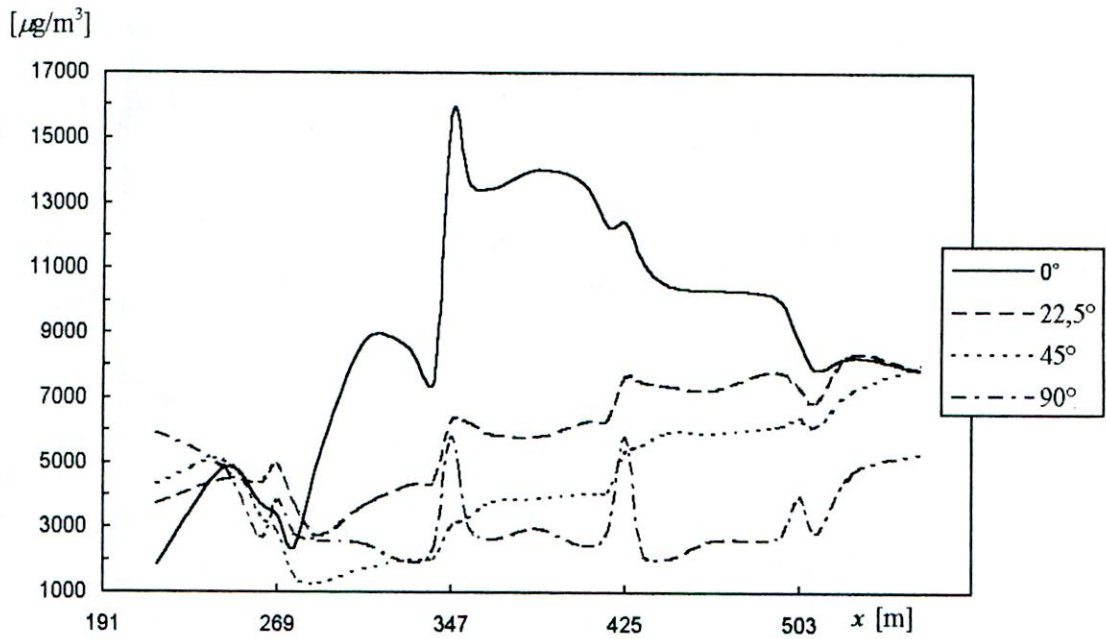


Figura 7.46 Concentraciones de CO calculadas a lo largo de la calle 1.

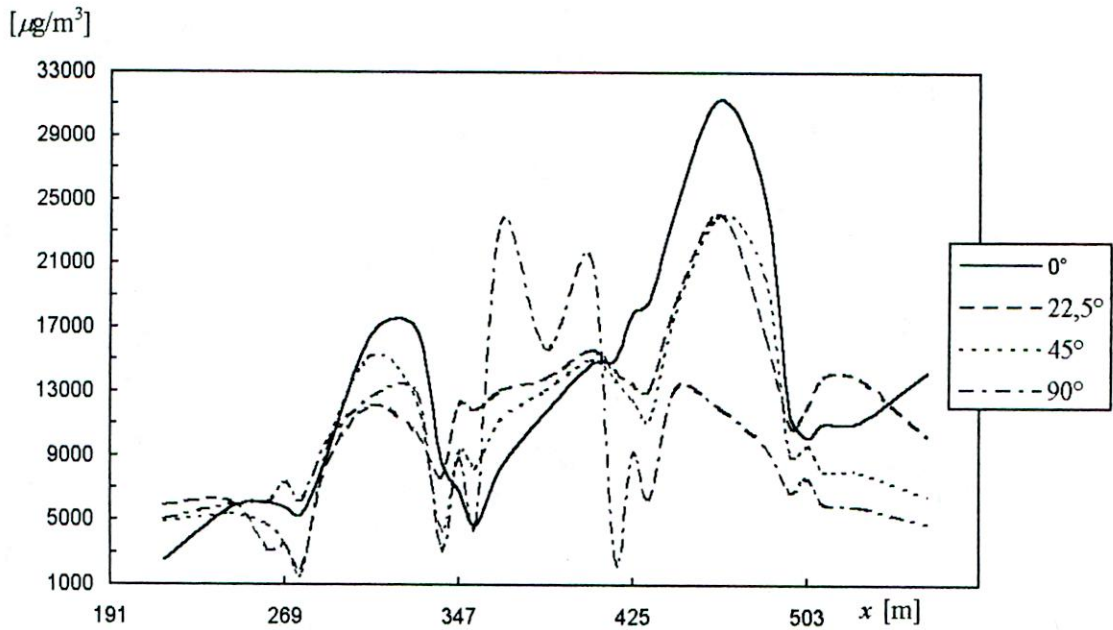


Figura 7.47 Concentraciones de CO calculadas a lo largo de la calle 2.

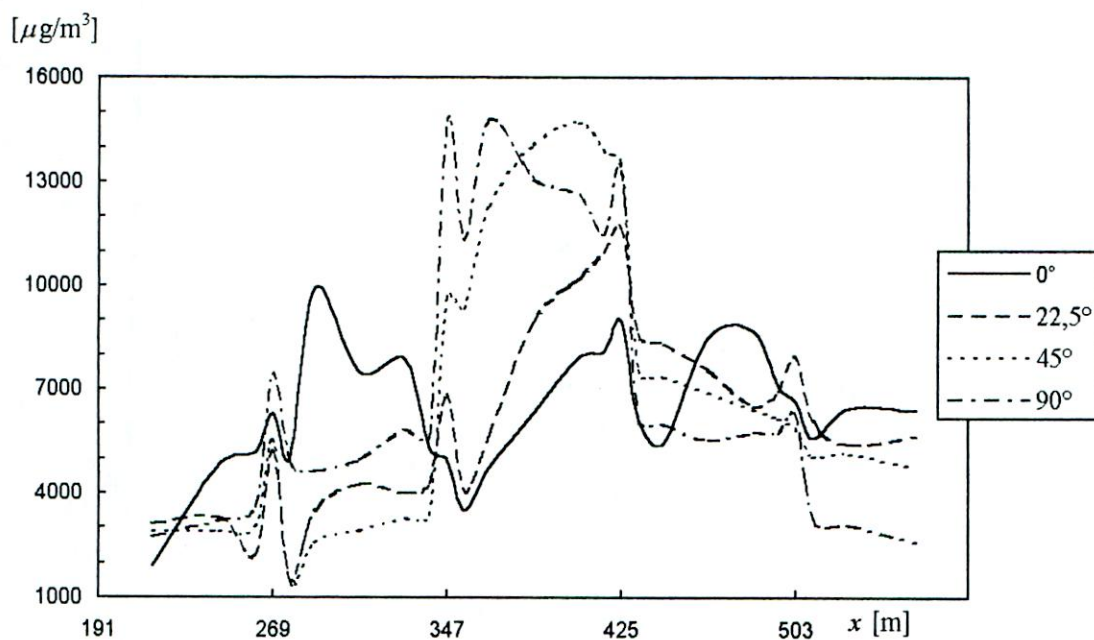


Figura 7.48 Concentraciones de CO calculadas a lo largo de la calle 3.

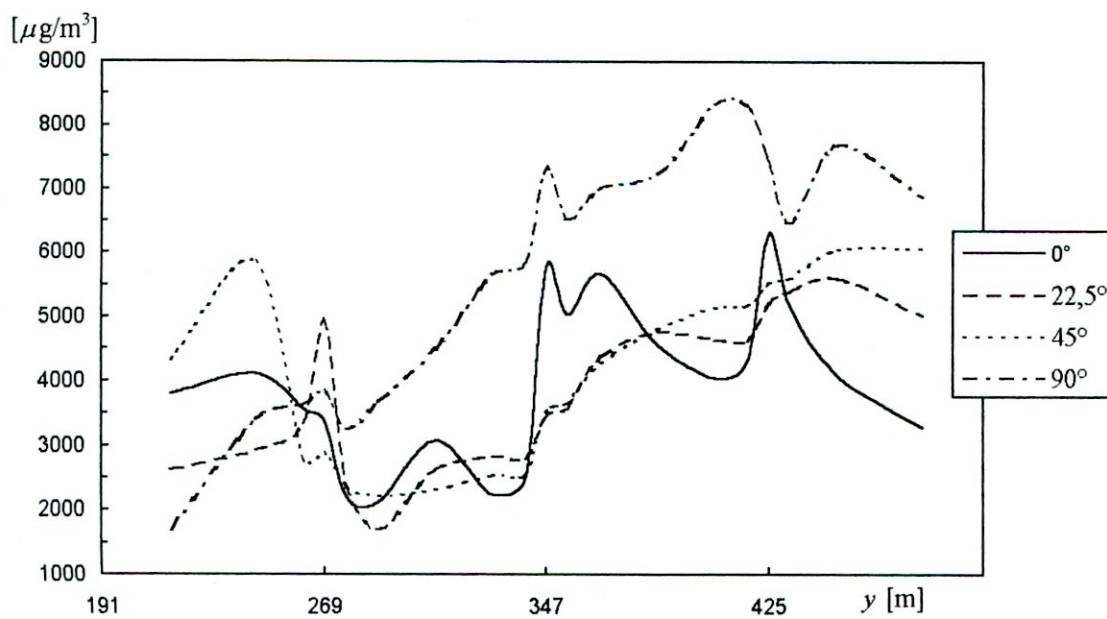


Figura 7.49 Concentraciones de CO calculadas a lo largo de la calle 4.

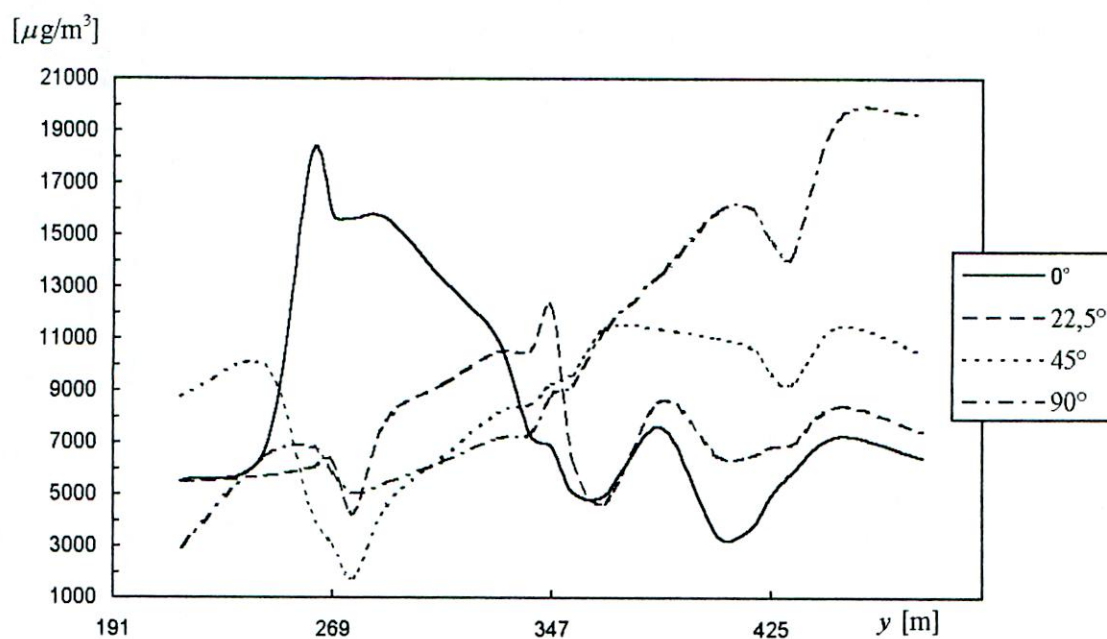


Figura 7.50 Concentraciones de CO calculadas a lo largo de la calle 5.

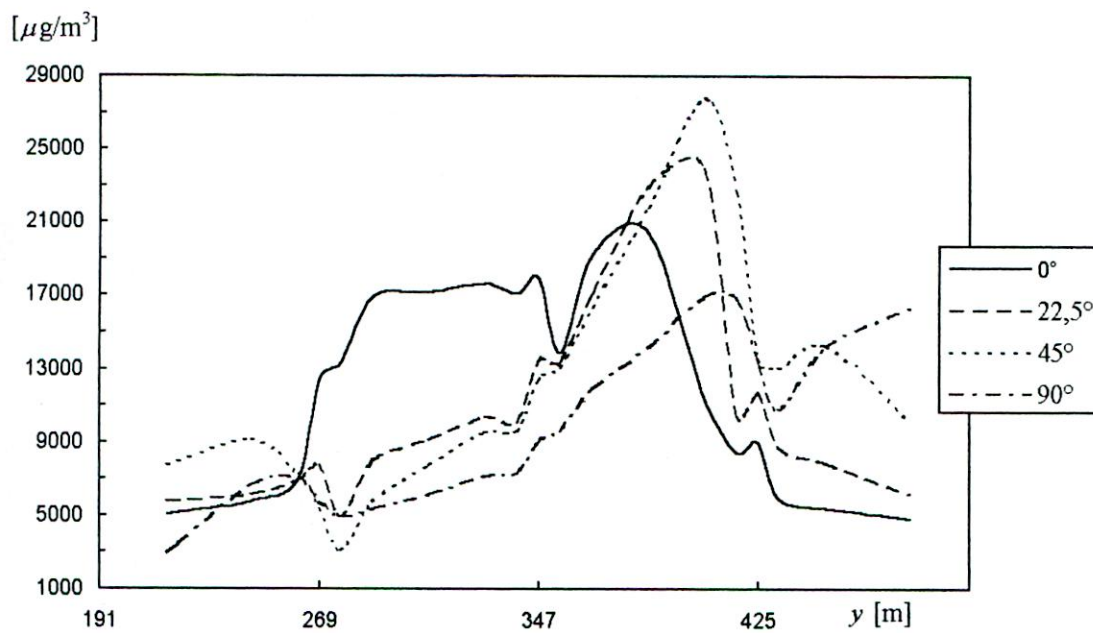


Figura 7.51 Concentraciones de CO calculadas a lo largo de la calle 6.

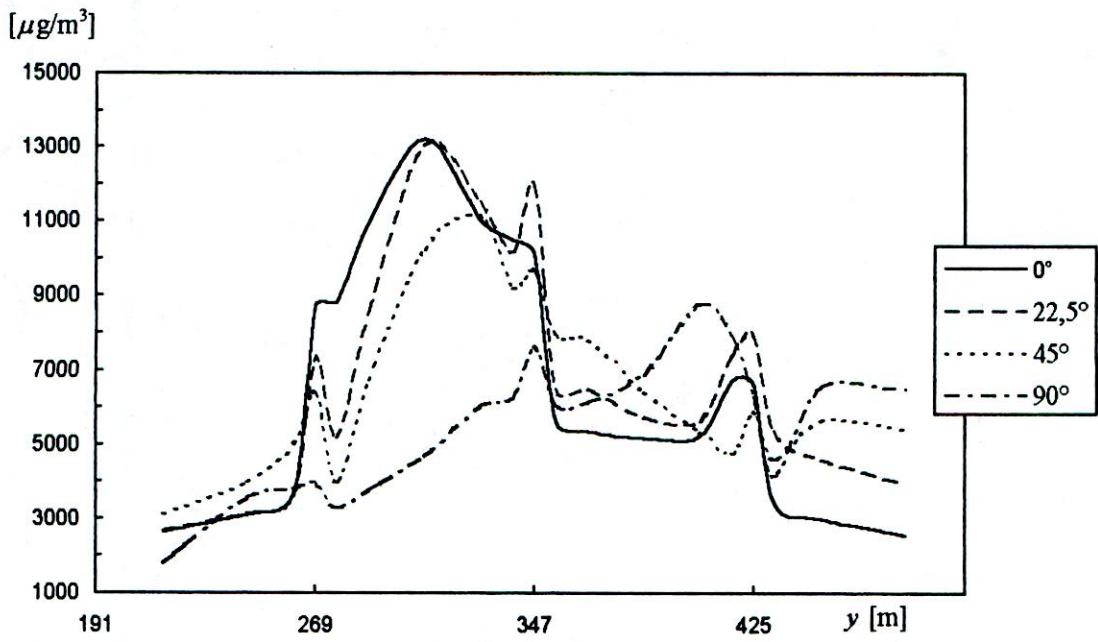


Figura 7.52 Concentraciones de CO calculadas a lo largo de la calle 7.

7.3 Caso 3: Chimenea en Terreno Irregular

El tercer caso analizado corresponde a un chimenea industrial emitiendo SO_2 en una zona de topografía irregular. La parte accidentada del terreno se muestra en las figuras 7.53. La chimenea se sitúa próxima a la base de un cerro de 430 [m] de altura máxima. Detrás y a los costados de este cerro existen otras elevaciones de menor altura. La altura máxima de las colinas detrás del cerro central es de 380 [m], formándose una hondonada estrecha entre dicho cerro y el cordón que le sigue. El terreno más allá de este grupo de cerros es plano. El dominio de solución completo tiene una extensión $x_{max} = 6.460$ [m], $y_{max} = 2.100$ [m] y $z_{max} = 670$ [m], y se ha discretizado, como en los casos anteriores, en una malla de $31 \times 31 \times 31$ nodos, que se muestra en las figuras 7.54 y 7.55. La forma del terreno se ha aproximado en esta malla rectangular mediante bloques sólidos que se elevan hasta la altura media que el terreno tiene en el intervalo que abarcan. Si bien esto no reproduce todas las características del terreno, permite considerar la influencia de la topografía sobre el campo de flujo con una precisión suficiente para la escala a la cual éste se describe.

Las características supuestas para la chimenea son:

- temperatura de salida de los gases: 150 [°C]
- velocidad de salida de los gases: 12 [m/s]
- área transversal de la salida: 16 [m²]
- contenido de SO_2 en masa: 0,5 %
- Peso molecular de los gases: 28,4 [kg/kmol]

Estos datos representan una emisión de 24.762 [ton/año] de SO_2 , para una operación continua, de modo que la chimenea es una fuente de contaminación importante. Se obtuvieron resultados para atmósfera en condiciones estable y neutra (clases F y D en las categorías de Pasquill) en un día frío, y tres alturas de chimenea: 60 [m], 100 [m] y 160 [m], cuando el viento sopla en la dirección del eje x , ingresando al campo de solución por el plano en $x = 0$. El perfil de velocidad es del tipo empleado en los casos anteriores, con exponentes según los valores usuales para las clases de estabilidad supuestas. Para la situación estable, el aire que ingresa lo hace con una pronunciada inversión térmica. El perfil de temperatura aumenta linealmente desde 7 [°C], a nivel del suelo, hasta 15 [°C] a 230 [m] de altura, y luego se torna uniforme para alturas mayores. El gradiente vertical medio de temperatura es por lo tanto de 0,035 [K/m], que es el valor usualmente supuesto^[31] para la clase de estabilidad F. En

condiciones neutras se utilizó un perfil de temperatura uniforme de 11 [°C] para el aire de entrada, de modo que en ambos casos la temperatura media del aire que fluye a la región es la misma.

Las condiciones de contorno se resumen como sigue:

en $x = 0$:

$$u(z) = u_r(z/z_r)^p ; \text{ con } z_r = 10 \text{ [m]}$$

$$u_r = 5 \text{ [m/s]}$$

$$p = 0,3 \text{ para condición estable}$$

$$p = 0,14 \text{ para condición neutra}$$

$$T(z) = T_s + (T_h - T_s)z/h \quad \text{para condición estable}$$

$$T(z) = T_0 \quad \text{para condición neutra}$$

$$\text{con } T_s = 7 \text{ [°C]} ; T_h = 15 \text{ [°C]} ; h = 230 \text{ [m]} ; T_0 = 11 \text{ [°C]}$$

$$v = w = k = e = c = 0$$

en $x = x_{max}$:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial x} = \frac{\partial k}{\partial x} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial x} = 0$$

en $y = 0 ; y = y_{max}$:

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\partial w}{\partial y} = \frac{\partial k}{\partial y} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} = \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial c}{\partial y} = 0$$

en $z = z_{max}$:

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial v}{\partial z} = \frac{\partial w}{\partial z} = \frac{\partial k}{\partial z} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial c}{\partial z} = 0$$

En $z = 0$ y todas las superficies verticales y horizontales que simulan los contornos del terreno se aplican funciones de pared.

Con estos datos se obtiene un número de Richardson global Ri_b , según la ecuación (4.54), de 0,387 para condiciones estables. En condiciones neutras el número de Richardson es por supuesto cero.

Todas las figuras desde la 7.56 a la 7.73 corresponden a resultados para condición estable; los resultados para condición neutra se indican explícitamente. Algunos aspectos del campo de velocidades obtenido se muestran en las figuras 7.56 a 7.60. Las figuras 7.56 a 7.57 dan secciones parciales horizontales de la zona de terreno irregular a dos alturas distintas. Las partes de estas figuras donde el trazado de la malla de discretización se interrumpe, corresponden a los volúmenes de control bloqueados, y representan por lo tanto el contorno del terreno intersectado a estos niveles. Se pueden apreciar detrás de los cerros algunas zonas de baja velocidad y otras donde el flujo es en dirección reversa, debido a la recirculación que se establece en esos sectores. Tal recirculación es visible en la figura 7.58, en una sección vertical tomada a través del plano medio del campo de solución en dirección y ($y = 1050$ [m]). Se observa en esta figura el vórtice recirculante del aire que desciende por la ladera del primer cerro (se ve sólo la base del cerro) hacia la hondonada estrecha que queda detrás de él. En la zona a sotavento de la segunda colina se tiene una situación parecida. Como consecuencia de lo irregular de la superficie y de las múltiples desviaciones que experimenta el aire, el patrón de flujo en estas zonas es considerablemente más complejo que el resultante en los casos anteriores. Las figuras 7.59 y 7.60 presentan las componentes de la velocidad en planos transversales a la dirección principal del viento, situados detrás de las colinas que aparecen parcialmente en la figura anterior. Son notables los vórtices transversales que el aire forma al descender por las laderas de ambas colinas. Los vectores esencialmente verticales, hacia el área central superior de la figura 7.59, corresponden al viento que baja desde la cima del cerro de 430 [m] de altura ubicado flujo arriba del plano graficado. Hacia la derecha, los vectores horizontales son del viento que ha rodeado el cerro mencionado y es desviado por las colinas que encuentra a su paso, como puede observarse también en las figuras anteriores 7.56 y 7.57. Debido a que en este sector las mayores elevaciones del terreno se concentran hacia el costado derecho, el aire tiende a salir de la hondonada por el costado opuesto.

El flujo que se observa en la figura 7.60 es bastante típico en la estela de colinas que enfrentan al viento, como es reportado por Hunt, Simpson y otros ([14], [15]), donde se ha observado que generalmente el viento hacia el eje central de la colina desciende hacia la estela, retrocede luego hacia el punto de separación, gira hacia afuera, y sale finalmente en dirección a la región flujo abajo, apartándose del eje central. Las proyecciones del campo vectorial en diferentes orientaciones muestran que la estructura tridimensional del flujo a sotavento del grupo de colinas presenta todas

estas características.

La energía cinética turbulenta para la misma posición en x de las figuras 7.59 y 7.60 se grafica en las figuras 7.61 y 7.62. En la primera se observa que las zonas de máxima intensidad de turbulencia situadas hacia el costado izquierdo y el centro, tienden a coincidir con los vórtices transversales que aparecen en la figura 7.59. Esta energía turbulenta proviene, más que de la generación en esos puntos, del transporte convectivo desde regiones flujo arriba, donde ha sido generada por la interacción del flujo con las primeras colinas que se le interponen. En la parte próxima a las mayores elevaciones en esta sección, la alta turbulencia obedece a generación local. Por su parte, la máxima turbulencia en la figura 7.62 se produce en la estela de la última colina elevada (que aparece seccionada en la figura anterior). Es aquí donde se alcanza la mayor energía cinética turbulenta dentro de la región modelada, ya que a este sector, ubicado a sotavento de todo el grupo de cerros, es transportada la energía turbulenta generada sobre ellos. Por lo mismo, la mayor viscosidad turbulenta se obtiene en la estela del grupo de cerros, como se aprecia en la figura 7.63, donde la viscosidad efectiva alcanza valores de hasta 61 [kg/m s] a pesar del elevado número de Richardson. El valor de 1 [kg/m s] que se observa flujo arriba de los cerros está en el orden de magnitud que usualmente se supone para condiciones estables^{[16],[13]}.

La temperatura resultante para la zona en las inmediaciones de la chimenea se muestra en las figuras 7.64, donde se observa la pluma térmica para las chimeneas de 60 y 160 [m] simuladas[†]. Se aprecia, para la chimenea de 60 [m], cómo la pluma trata de abrirse paso a través de la inversión térmica, hacia la región superior de temperatura uniforme. Para la chimenea de 160 [m] la pluma ya ha alcanzado esa región.

La evolución de la pluma de gases, para la chimenea de 60 [m], a medida que avanza a través del grupo de colinas se ilustra en las figuras 7.65 a 7.71, las cuales dan curvas de iso-concentración de SO_2 para todos los planos de la malla desde $x = 414 \text{ [m]}$, donde el eje de la pluma alcanza el terreno, hasta $x = 3.660 \text{ [m]}$, que representa una posición 1.600 [m] flujo abajo de las colinas. Tras impactar en la colina central, a una altura de 150 [m] aproximadamente, la pluma asciende por la ladera y luego se divide en dos, como se observa en las secciones a partir de $x = 614 \text{ [m]}$. Las dos ramas bifurcadas rodean la colina a diferentes alturas, debido a la asimetría de ésta. Las

[†] Se han trazado sólo algunas de las isoterms, ya que debido al aumento abrupto de la temperatura hacia la salida de las chimeneas no es posible representar todo el campo de temperatura con un intervalo de temperatura constante entre isoterms.

concentraciones máximas que se producen en los costados del cerro para $x = 714$ [m] y $x = 814$ [m] son de 1.213 y 1.145 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] respectivamente. La concentración máxima en el punto de impacto sobre la ladera frontal en $x = 414$ [m] es de 5.692 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]. Las secciones desde $x = 914$ [m] hasta $x = 1.214$ [m] muestran el desarrollo de la pluma detrás de la colina donde impactó, hasta llegar al centro de la hondonada que queda a continuación. Los dos máximos de concentración se fusionan gradualmente, de modo que para $x = 1.214$ [m] ya sólo se distingue un único centro, y la pluma se ha reunificado. La gran expansión lateral que presenta se debe, por una parte, a la estratificación estable, y por otra, a la bifurcación que experimentó.

Para secciones posteriores se observa una progresiva distorsión y desviación hacia la izquierda de la pluma, debido a la componente lateral del viento, preferentemente en esa dirección, y al aumento de la mezcla hacia el lado derecho, producto de la mayor turbulencia que se concentra hacia ese sector. Las últimas secciones revelan un descenso paulatino del centro de pluma (considerado aquí como el punto de máxima concentración), provocado por la componente negativa de la velocidad vertical en la estela del grupo de cerros.

Algunos resultados para otras alturas de chimenea, siempre en condición estable, se presentan en las figuras 7.72 y 7.73, para la sección situada detrás de la cima del cerro más alto, y en el centro de la hondonada. Para la chimenea de 100 [m] la pluma aún se divide como lo muestran los dos máximos de concentración en ambas secciones, con una configuración similar a la obtenida con la chimenea de 60 [m]. Para la chimenea de 160[m], en cambio, la pluma logra elevarse hasta la cima del cerro más alto y pasar sobre él. Además, la comparación de las secciones de esta pluma no dividida con respecto a la anteriores indica que la expansión lateral de aquéllas se debe principalmente a la interferencia producida por el terreno. Este comportamiento concuerda, para las chimeneas de 60 y 160 [m], con la teoría que utiliza el parámetro N de la ecuación (4.74) para establecer si una pluma se eleva por sobre una colina o la rodea. Las alturas con las cuales la pluma en cada caso llega a la ladera del cerro resultaron de 150, 190 y 270 [m], para las chimeneas de 60, 100 y 160 [m] respectivamente. Utilizando el valor de 0,035 [K/m] para el gradiente de temperatura y una temperatura media de 11 [°C] se obtiene $N = 0,0347$ [s^{-1}]. Con las velocidades del viento calculadas a las tres alturas de chimenea, se obtienen alturas críticas de 183, 142 y 99 [m] en cada caso, de modo que de acuerdo a este criterio se habría predicho que tanto para las chimeneas de 100 como de 160 [m] la pluma lograría superar la colina, mientras que para la de 60 [m] debería rodearla. La discrepancia para la chimenea de

100 [m] no es de extrañar, si se tiene en cuenta el carácter altamente aproximado de esta teoría, fundada en una velocidad uniforme del viento flujo arriba de la colina y en una forma simétrica para la misma. El basar el cálculo de la altura crítica en la velocidad con la que el viento sopla sobre la descarga de la chimenea, en lugar de las velocidades de viento locales que la pluma enfrenta al llegar a la colina, se justifica, en modelos que aplican este criterio, sólo por la incapacidad de éstos para conocer dichas velocidades.

Resultados en condiciones de estabilidad neutra se hallan en las figuras 7.74 a 7.76. Las plumas térmicas en la figura 7.74 muestran ahora un elevado desarrollo vertical. La distribución de temperatura es similar para ambas chimeneas, observándose que las isotermas para la chimenea de 160 [m] se prolongan flujo abajo por una distancia mayor, debido a las velocidades de viento más altas a las que tiene lugar la emisión del efluente en ese caso.

Secciones transversales de las plumas para las tres chimeneas en los planos considerados anteriormente se encuentran en las figuras 7.75 y 7.76. En este caso sólo la pluma emitida desde la chimenea de 60 [m] se divide al llegar a la colina central, mientras que las otras pasan por encima de ella. Por último, en las figuras 7.77 a 7.80 se grafican las concentraciones a 10 [m] de altura (el nivel más bajo al cual se tienen nodos interiores de la malla) en secciones tomadas transversalmente a la dirección principal del viento. El plano de las figuras 7.77 y 7.78 se ubica inmediatamente detrás del grupo de cerros, a 96 [m] de la base de las últimas colinas, mientras que el de las figuras 7.79 y 7.80 está a 1.596 [m] flujo abajo de aquéllas. Las máximas concentraciones obtenidas se resumen en la tabla 7.3

Como es de esperar, las concentraciones disminuyen notablemente al aumentar la altura de chimenea. En cada plano, el factor de reducción en la concentración máxima para alturas mayores de chimenea es aproximadamente el mismo, bajo las dos clases de estabilidad. Por otra parte, mientras que para condiciones neutras las concentraciones producidas por la tres chimeneas en la posición $x = 3.660$ [m] han disminuido en promedio a alrededor de un 37% del valor en $x = 2.160$ [m], para las condiciones estables las concentraciones se mantienen en niveles altos. Esto se explica por el abatimiento que experimenta la pluma en la estela del sistema de cerros cuando las condiciones son estables, como puede verse en la figura 7.81, para una sección longitudinal en la región situada flujo abajo de los cerros. El eje de la pluma es desviado hacia el suelo y la concentración tiende a ser constante a baja altura. Este

hecho ya fue observado en las secciones transversales de la figura 7.71, y es consecuencia de la corriente descendente y la recirculación que se forman detrás de los últimos cerros. En el caso de condiciones neutras la pluma ha alcanzado una altura mayor (en aproximadamente 100 [m]) al llegar a esta zona, de modo que su núcleo no es afectado por la depresión del campo de flujo, y la recirculación eleva localmente la concentración sólo en la zona inmediatamente a sotavento de las colinas.

Tabla 7.4 Máximas concentraciones de SO₂ calculadas en los planos $x = 2.160$ [m] y $x = 3.660$ [m]

condición de estabilidad	altura de chimenea [m]	c_{max} [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en $x = 2.160$ [m]	c_{max} [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] en $x = 3.660$ [m]
estable	60	239	222
	100	175	169
	160	119	107
neutra	60	235	86
	100	157	63
	160	112	39

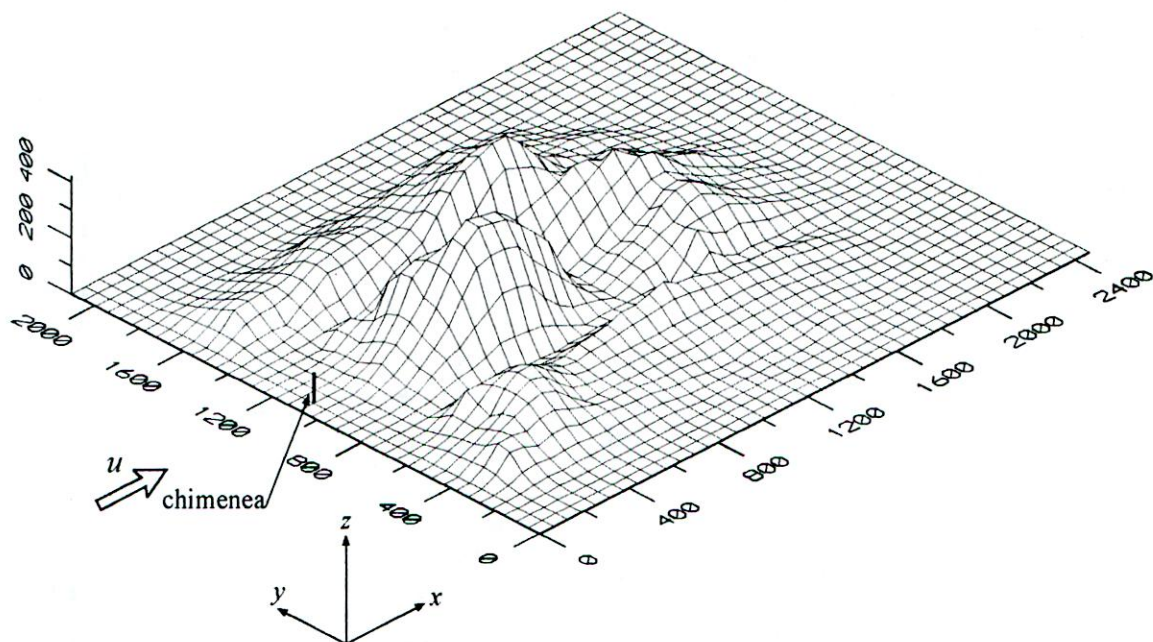


Figura 7.53a Topografía del terreno para el caso 3 (coordenadas en [m])

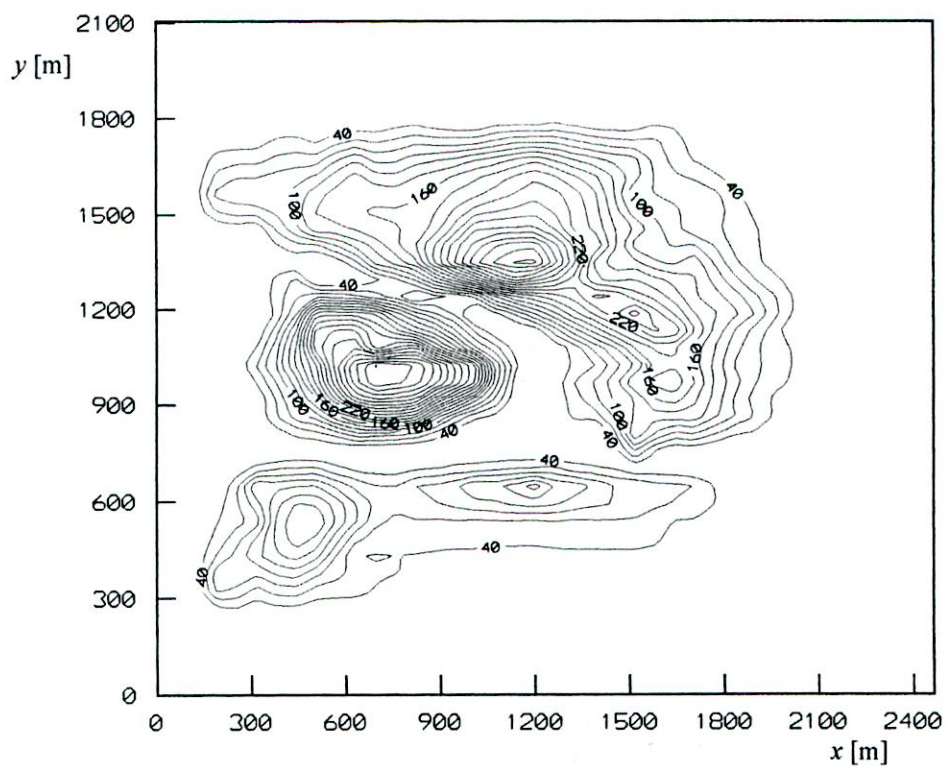


Figura 7.53b Curvas de nivel para la elevación del terreno sobre la base de la chimenea ($\delta = 20$ [m])

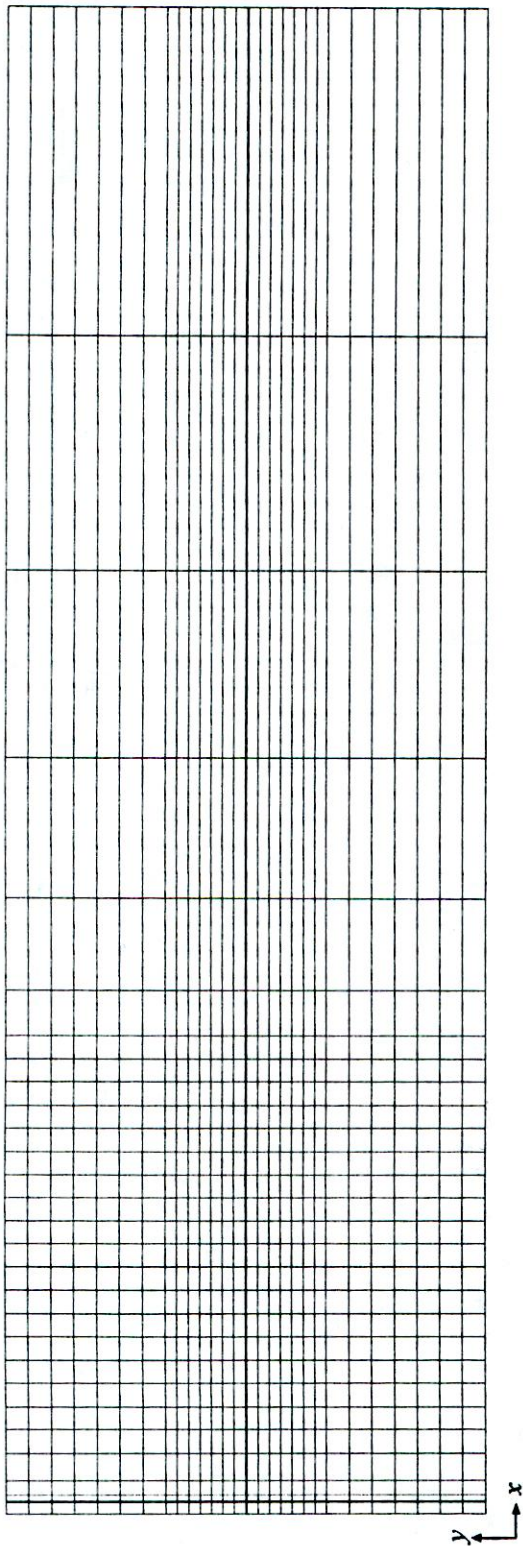


Figura 7.54 Vista superior de la malla de discretización para el caso 3.

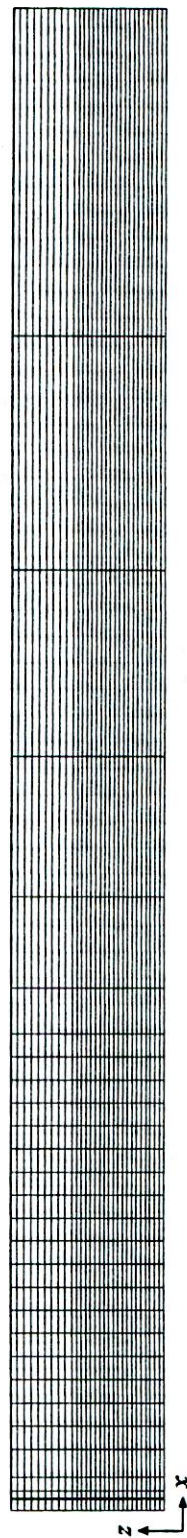


Figura 7.55 Vista lateral de la malla de discretización para el caso 3

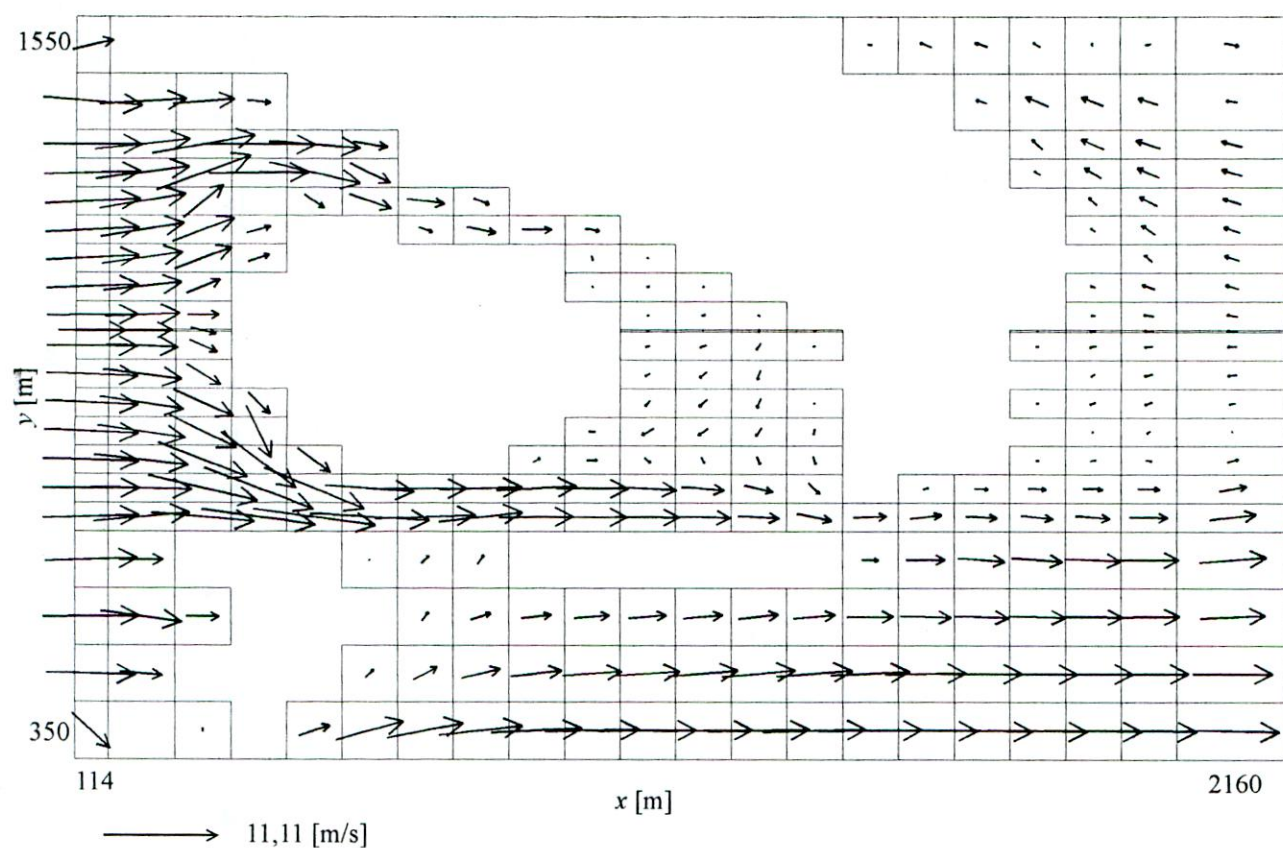


Figura 7.56 Vectores de velocidad en plano xy para altura $z = 90$ [m]

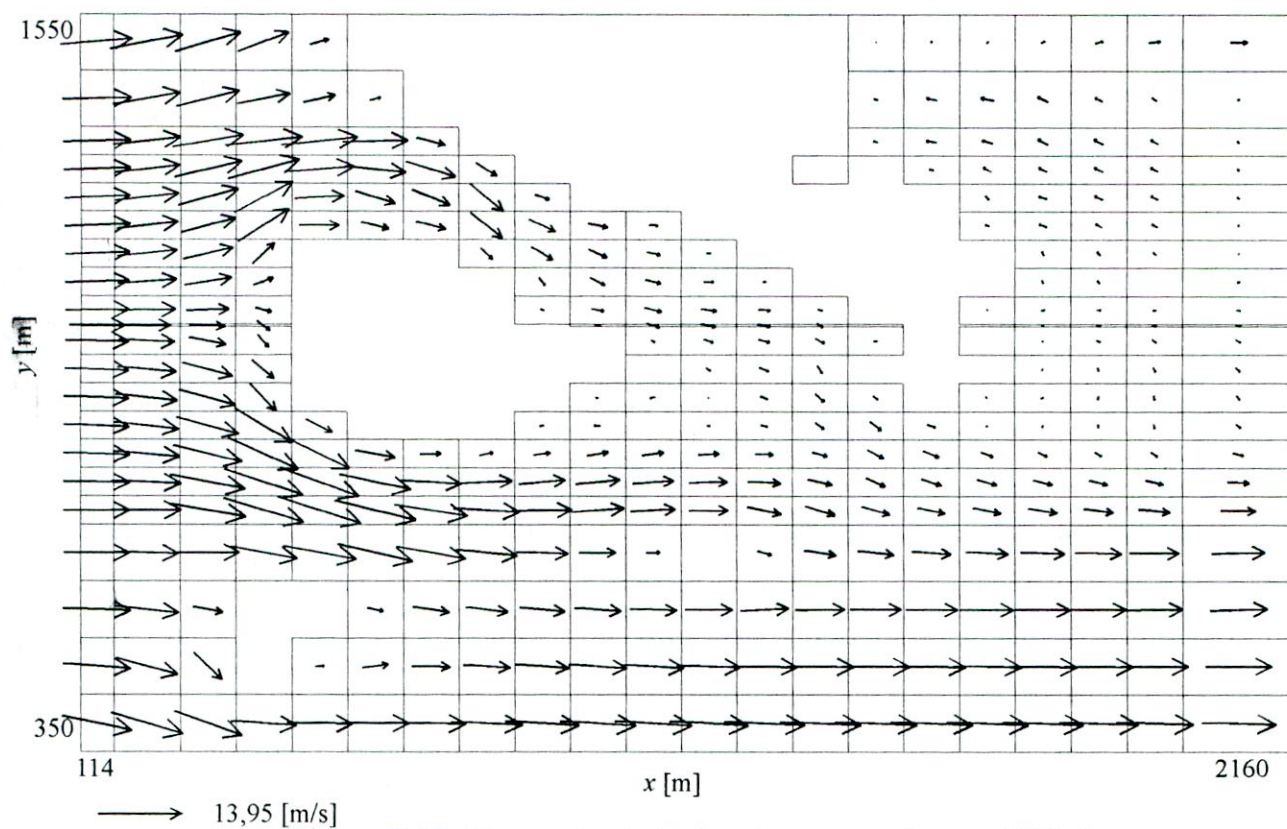


Figura 7.57 Vectores de velocidad en plano xy para altura $z = 150$ [m]

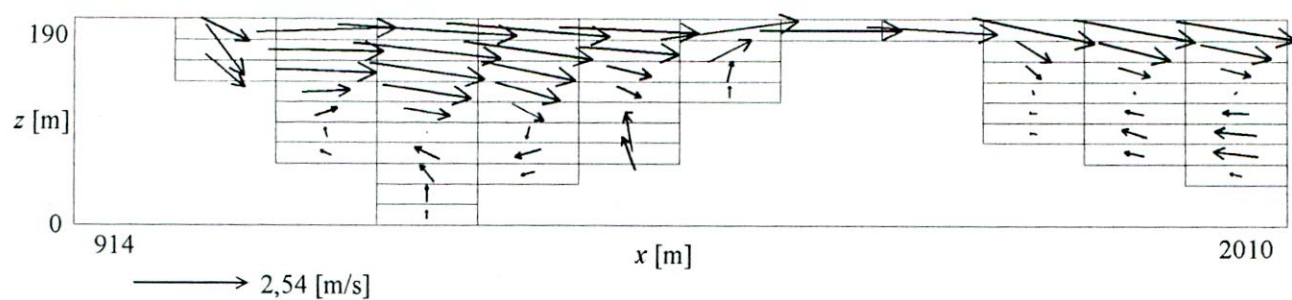


Figura 7.58 Vectores de velocidad en sección xz , para $y = 1050$ [m]

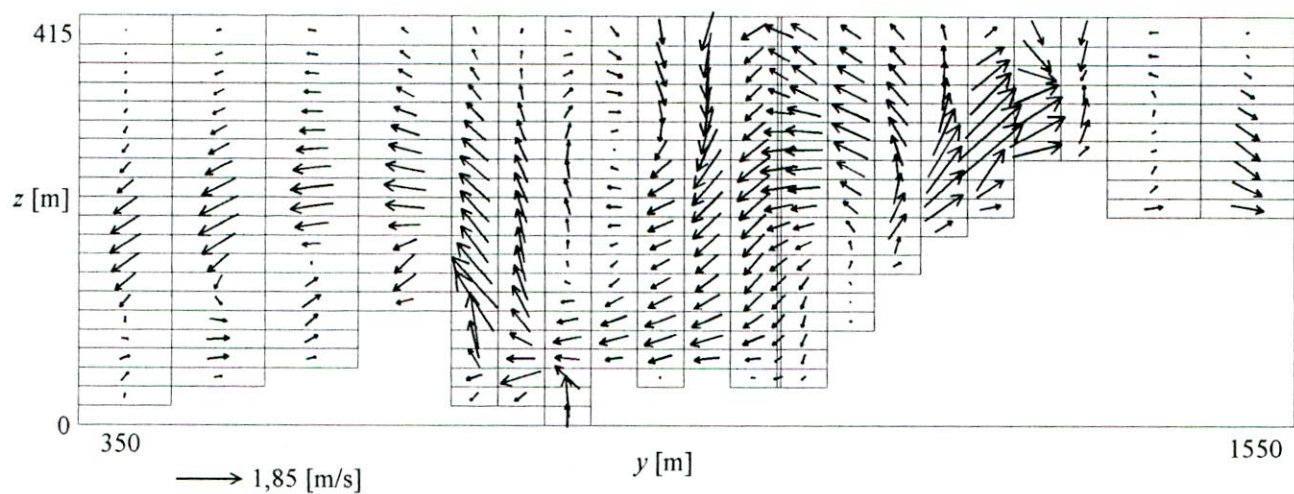


Figura 7.59 Vectores de velocidad en sección yz , para $x = 1314$ [m]

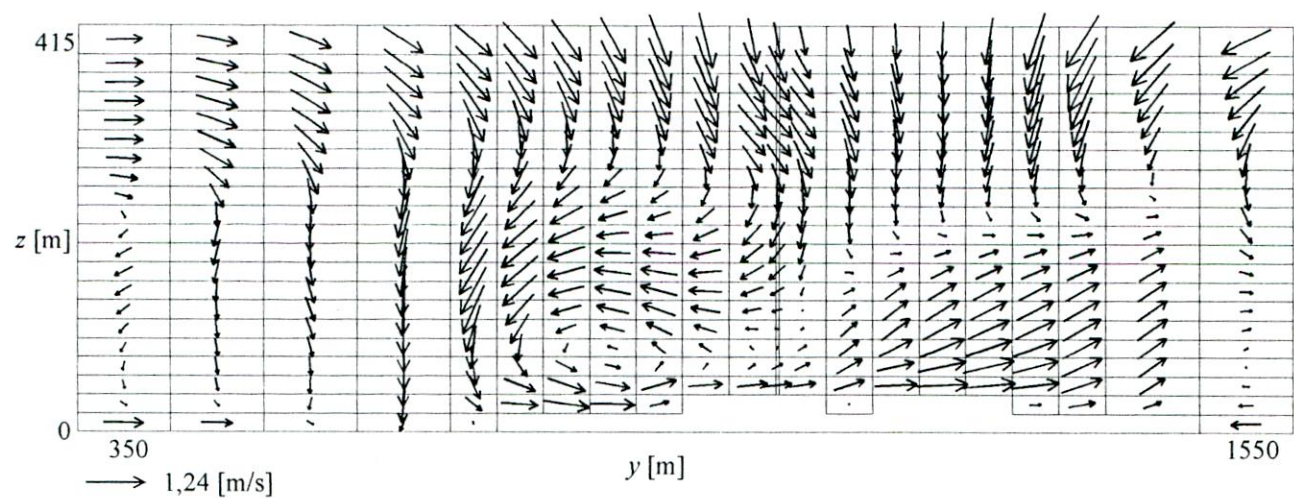


Figura 7.60 Vectores de velocidad en sección yz , para $x = 2014$ [m]

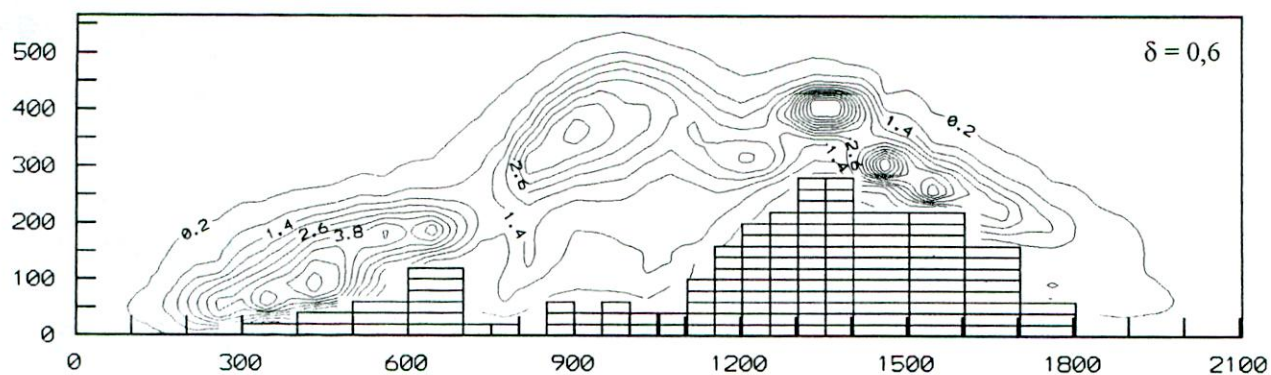


Figura 7.61 Energía cinética turbulenta [m^2/s^2] en sección yz para $x = 1314$ [m]

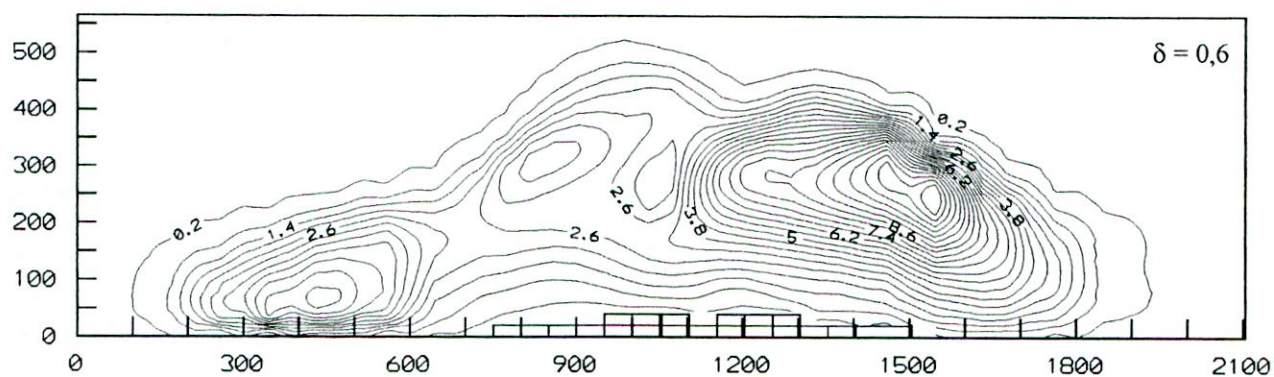


Figura 7.62 Energía cinética turbulenta [m^2/s^2] en sección yz para $x = 2014$ [m]

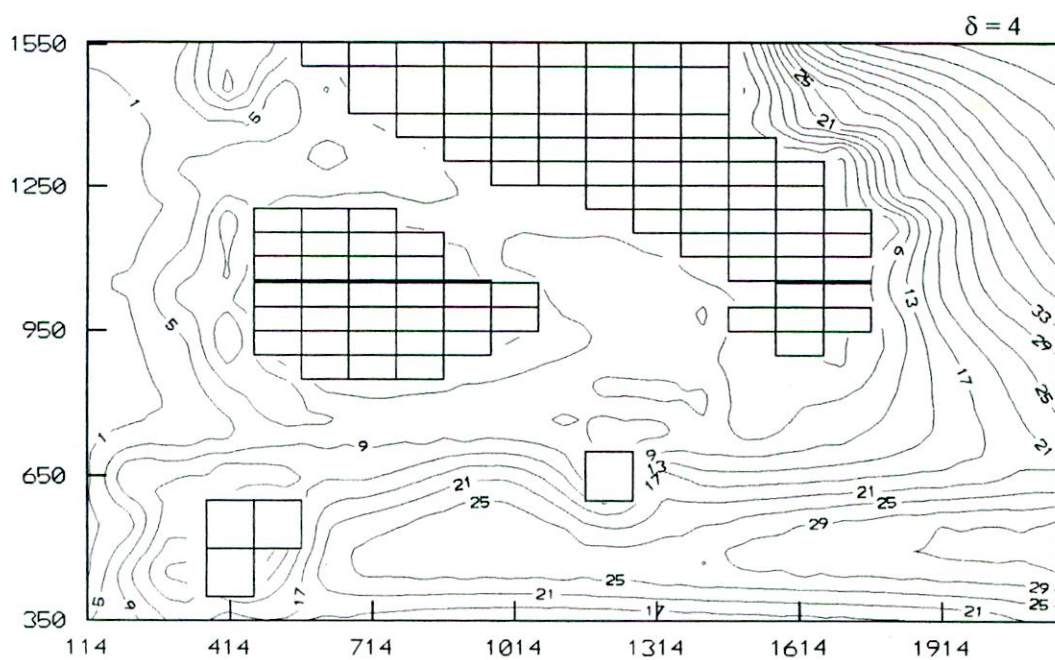


Figura 7.63 Viscosidad efectiva [$\text{kg}/\text{m s}$], en sección xy para $z = 150$ [m]

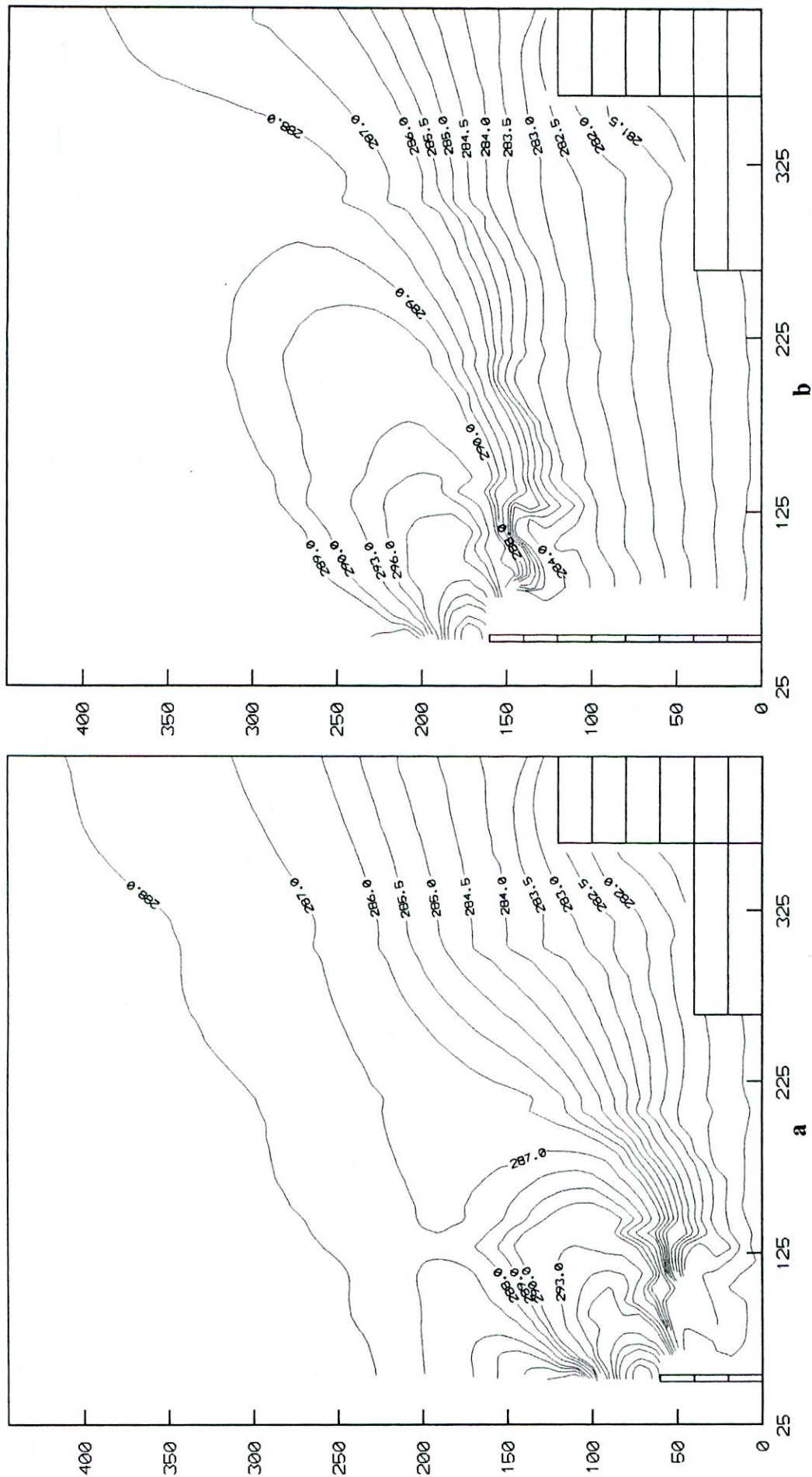


Figura 7.64 Temperatura [K], en sección xz para $y = 1050$ [m] : a) chimenea de altura 60 [m] b) chimenea de altura 160 [m]

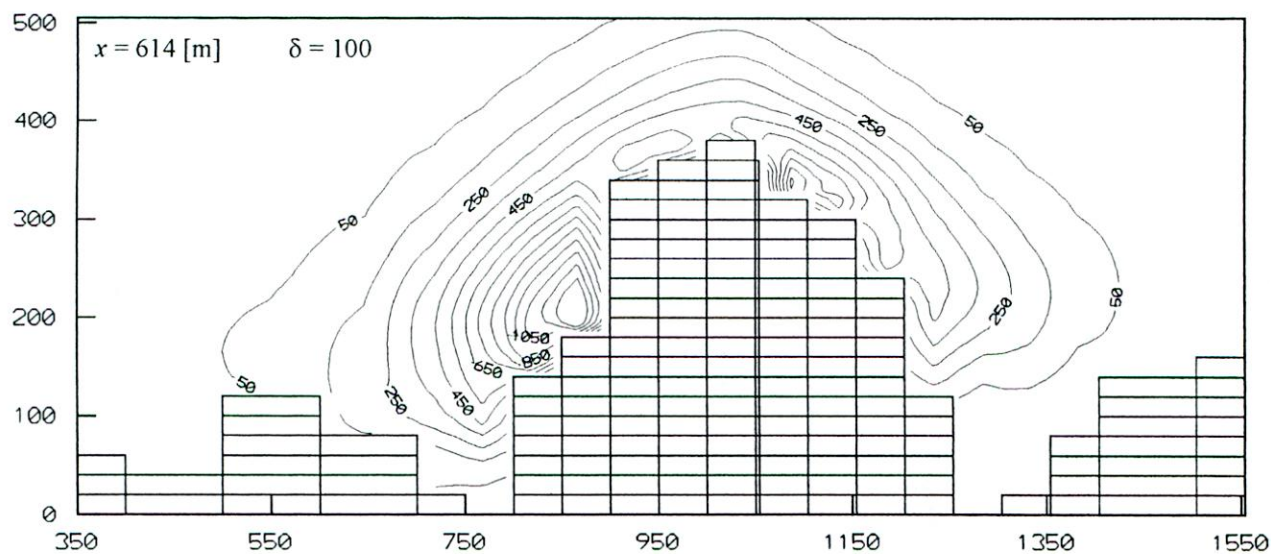
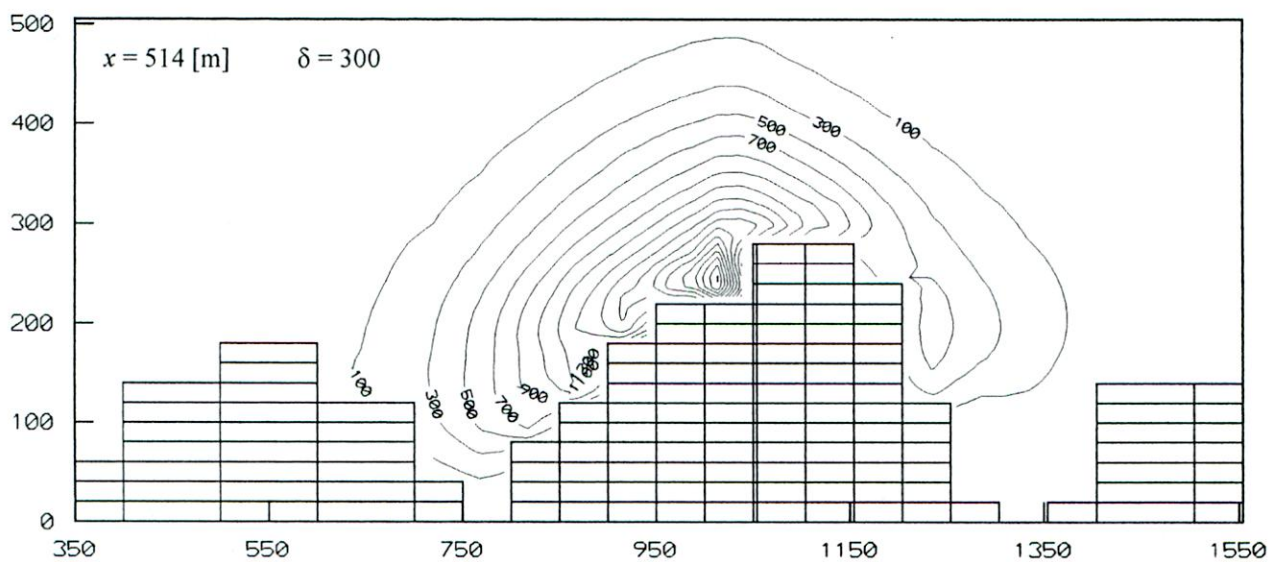
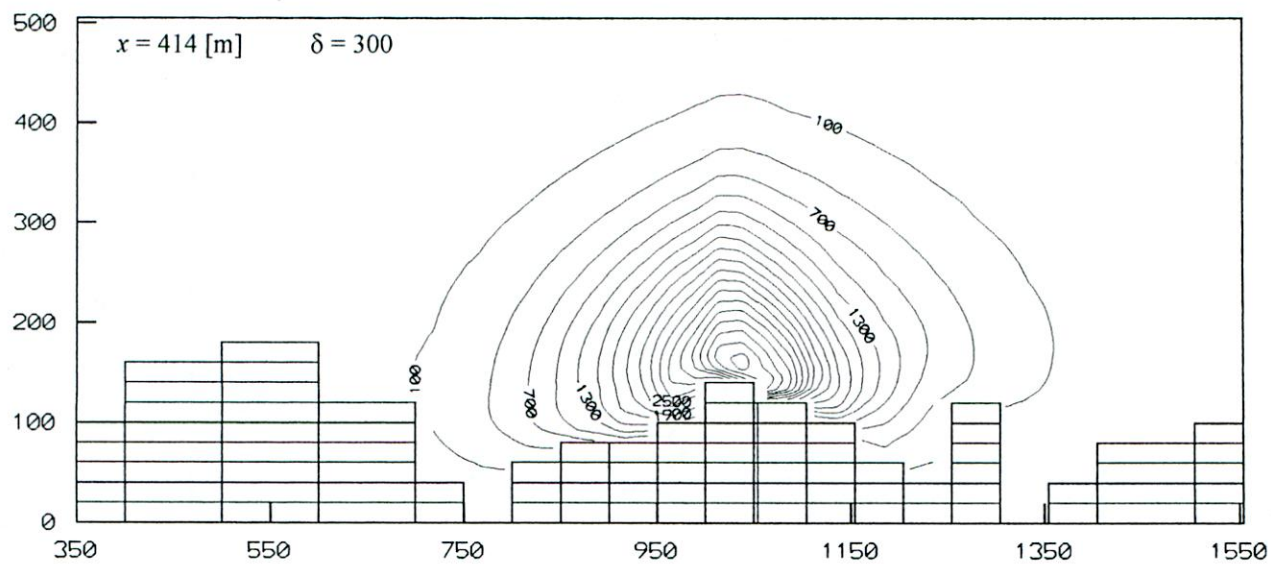


Figura 7.65 Concentración de SO_2 , $[\mu\text{g}/\text{m}^3]$, en secciones yz para las posiciones x que se indican

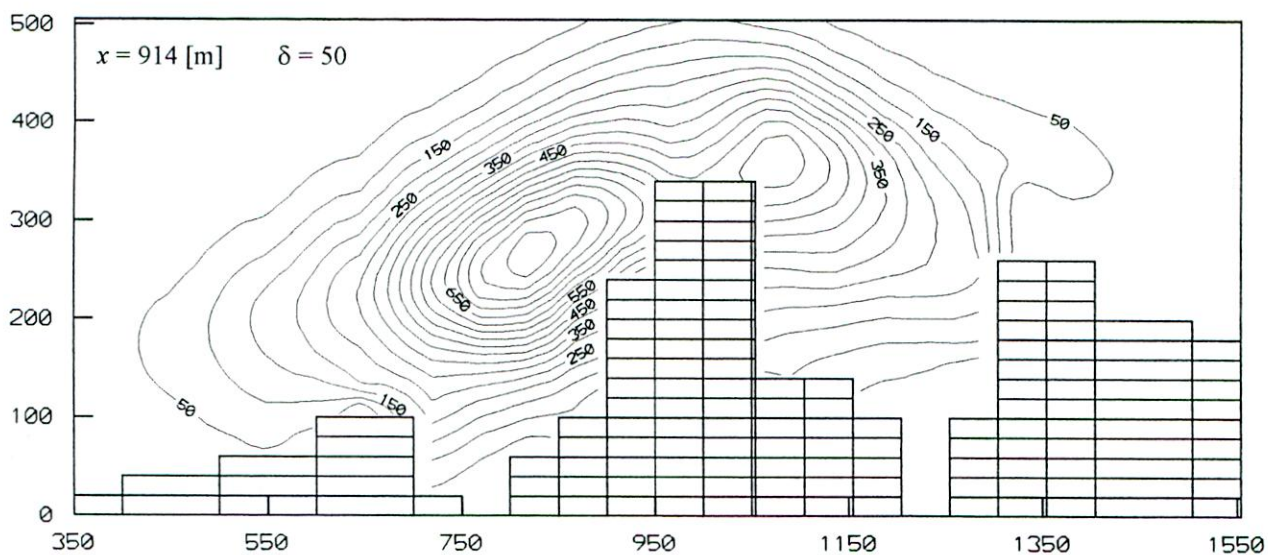
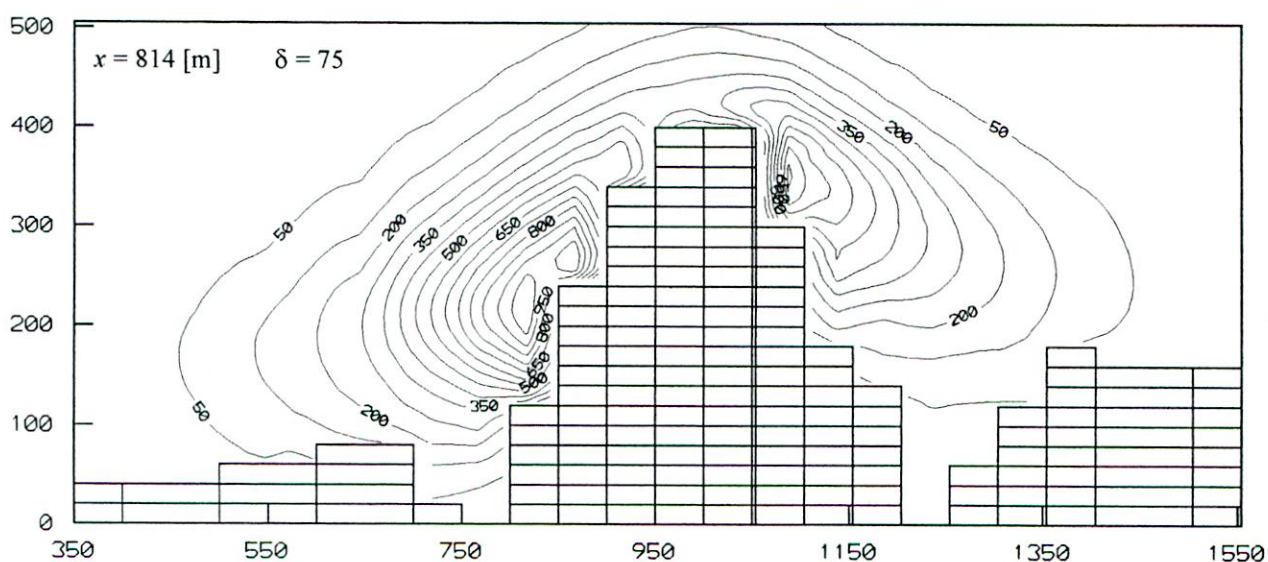
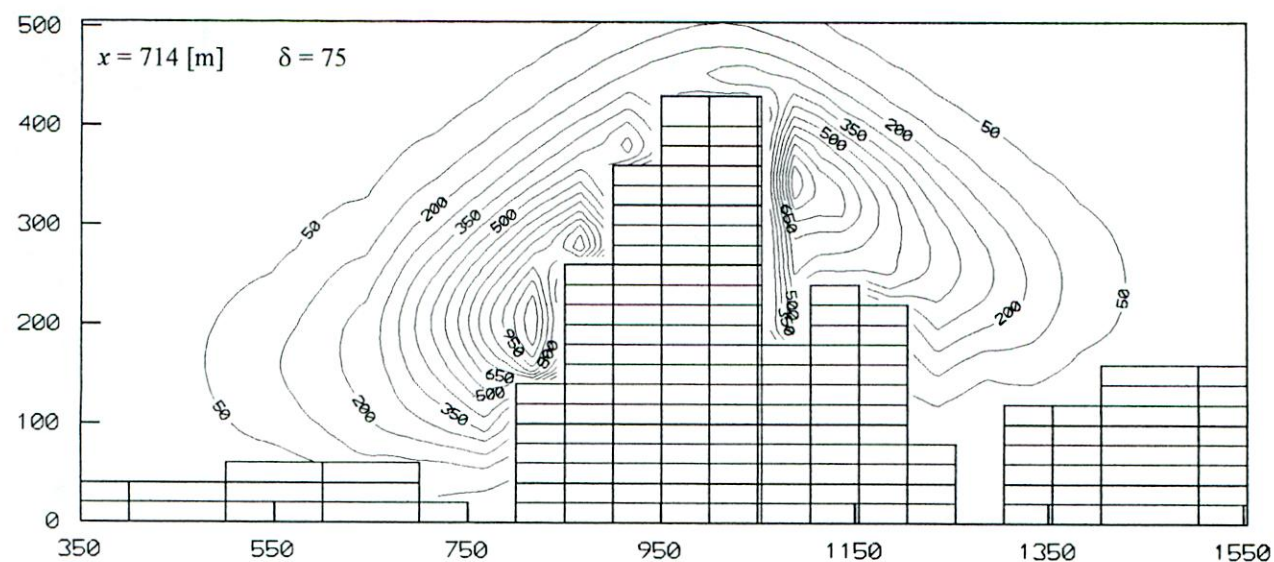


Figura 7.66 Concentración de SO_2 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], en secciones yz para las posiciones x que se indican

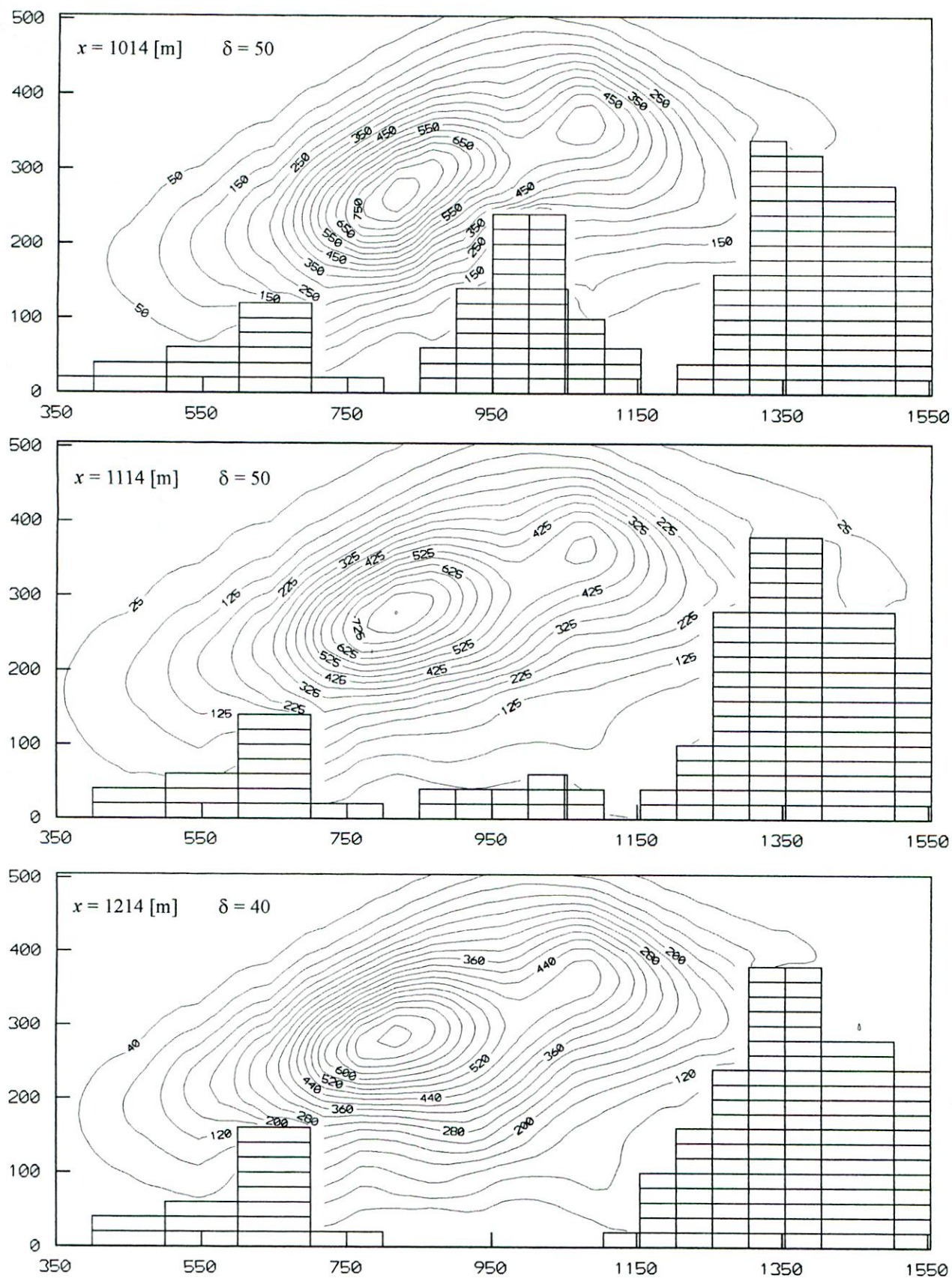


Figura 7.67 Concentración de SO_2 , [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], en secciones yz para las posiciones x que se indican

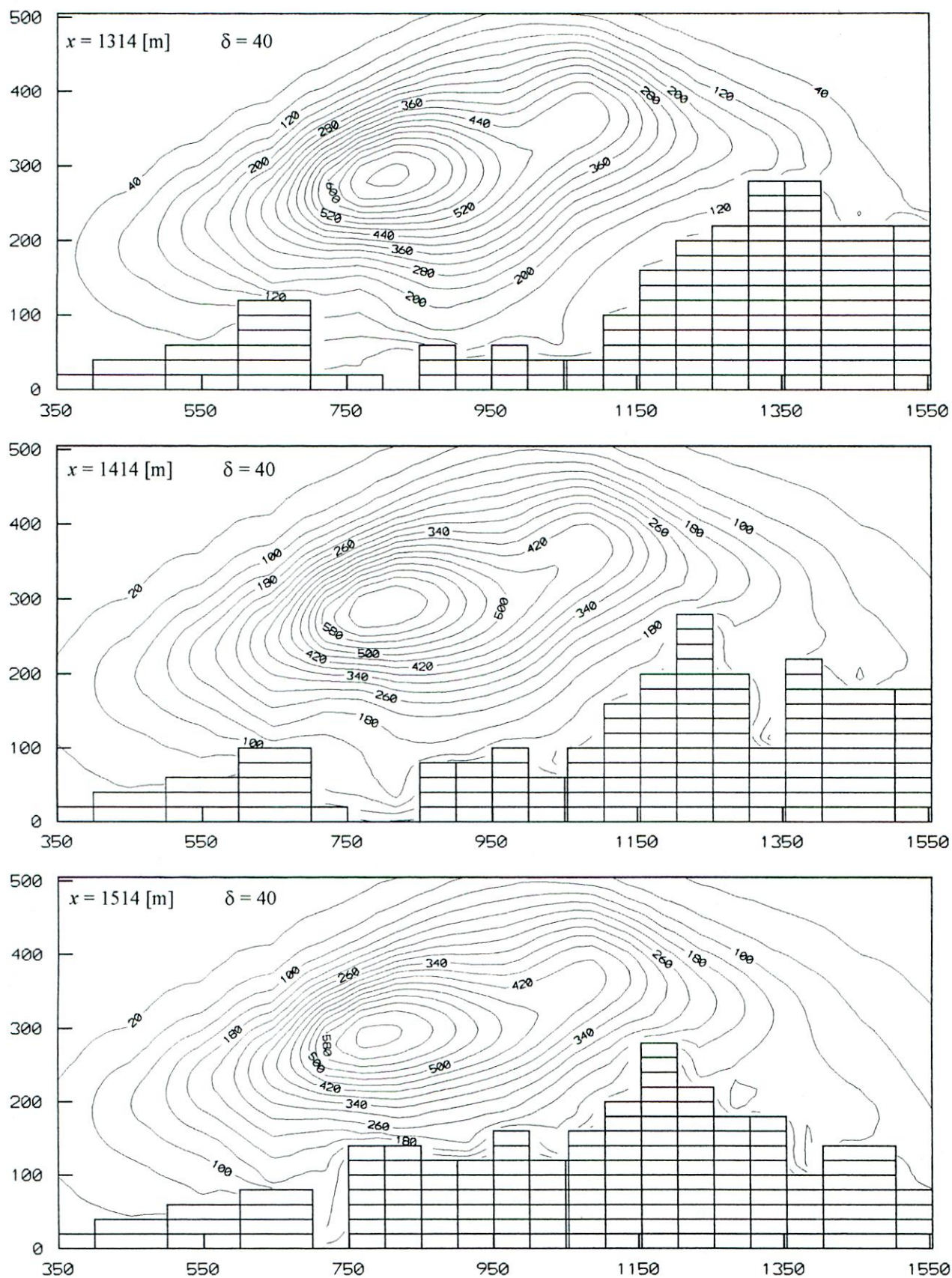


Figura 7.68 Concentración de SO_2 , [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], en secciones yz para las posiciones x que se indican

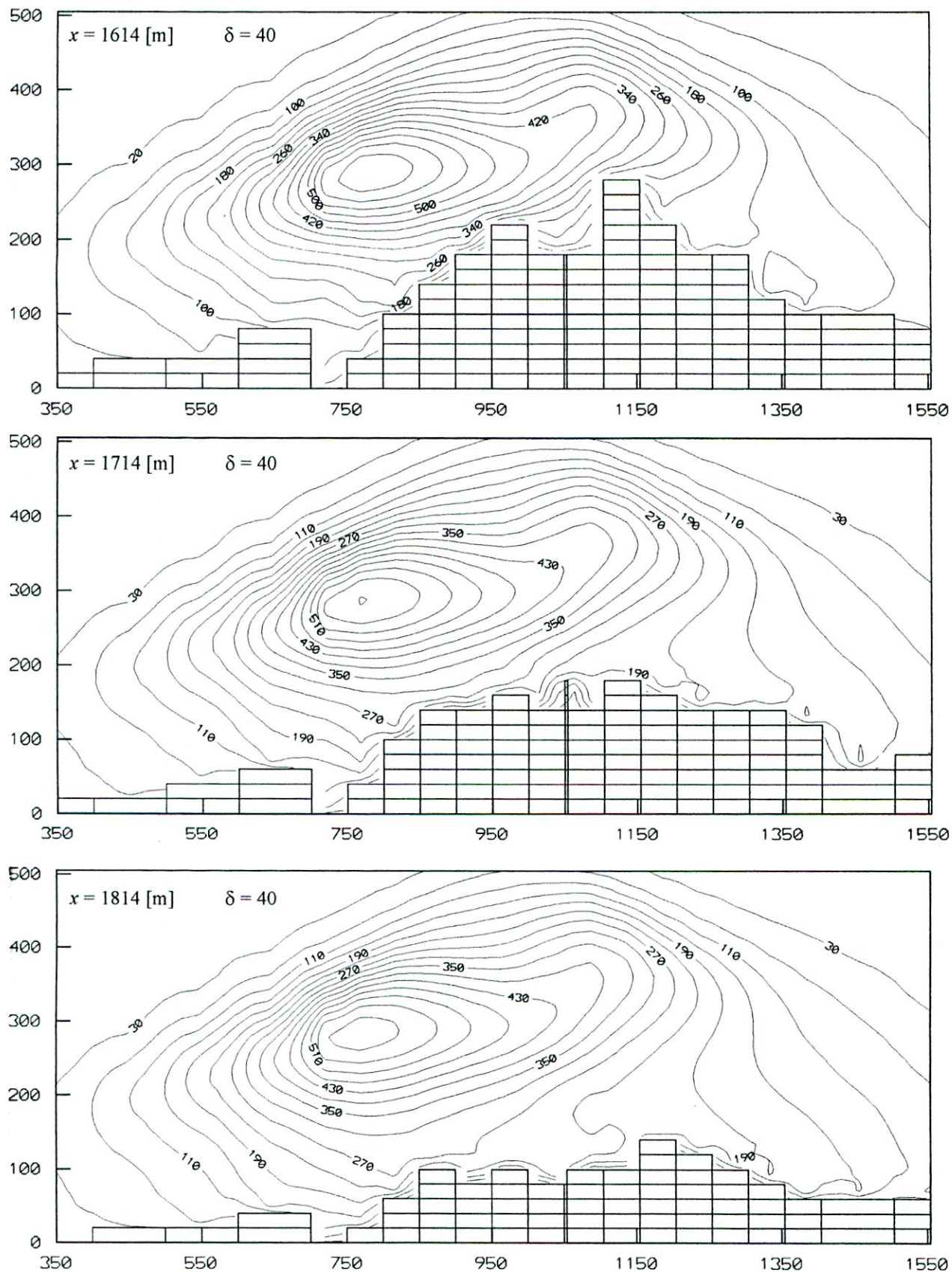


Figura 7.69 Concentración de SO₂ [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], en secciones yz para las posiciones x que se indican

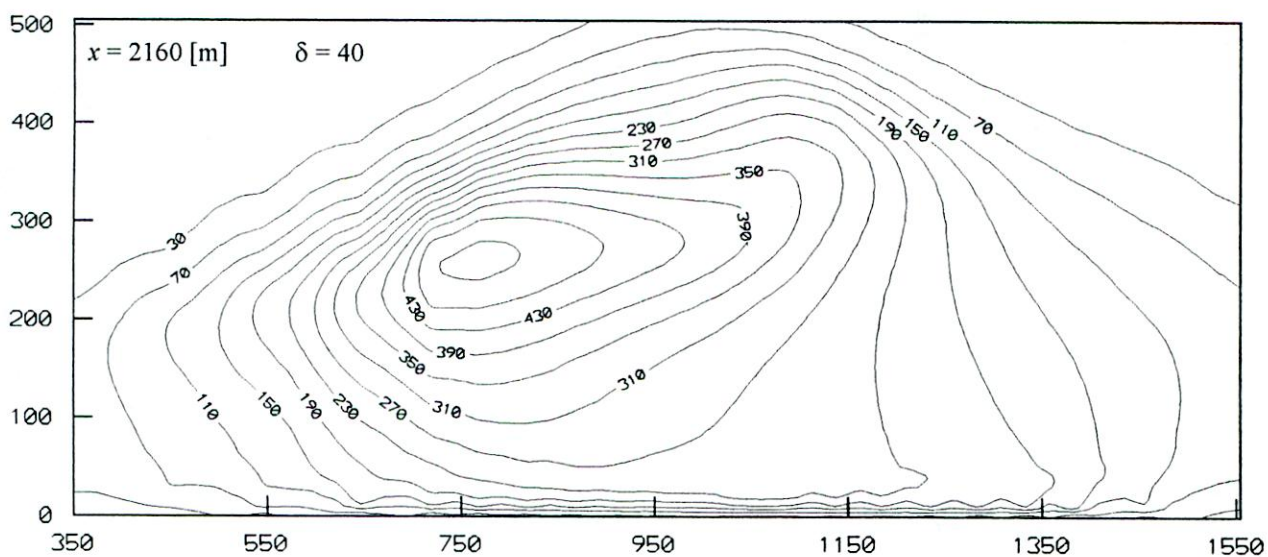
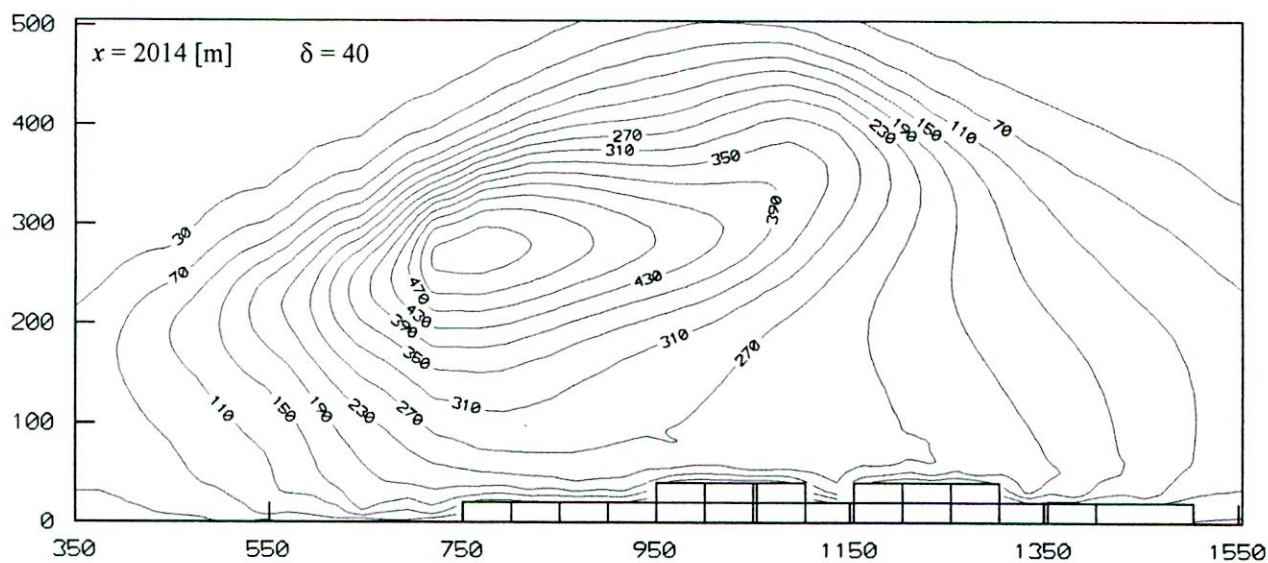
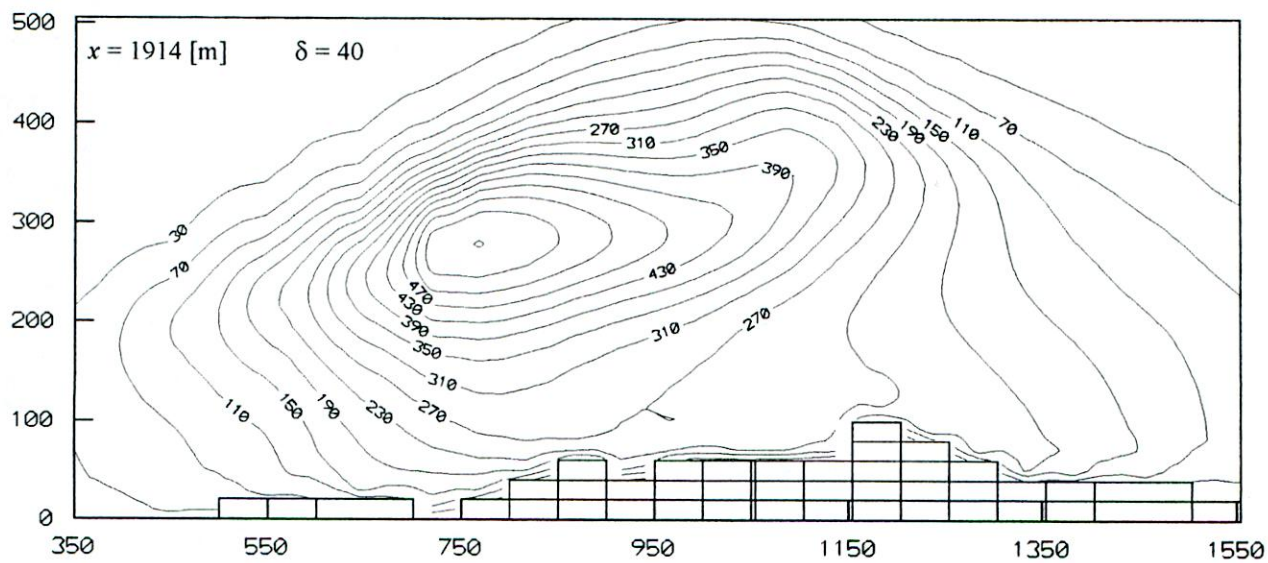
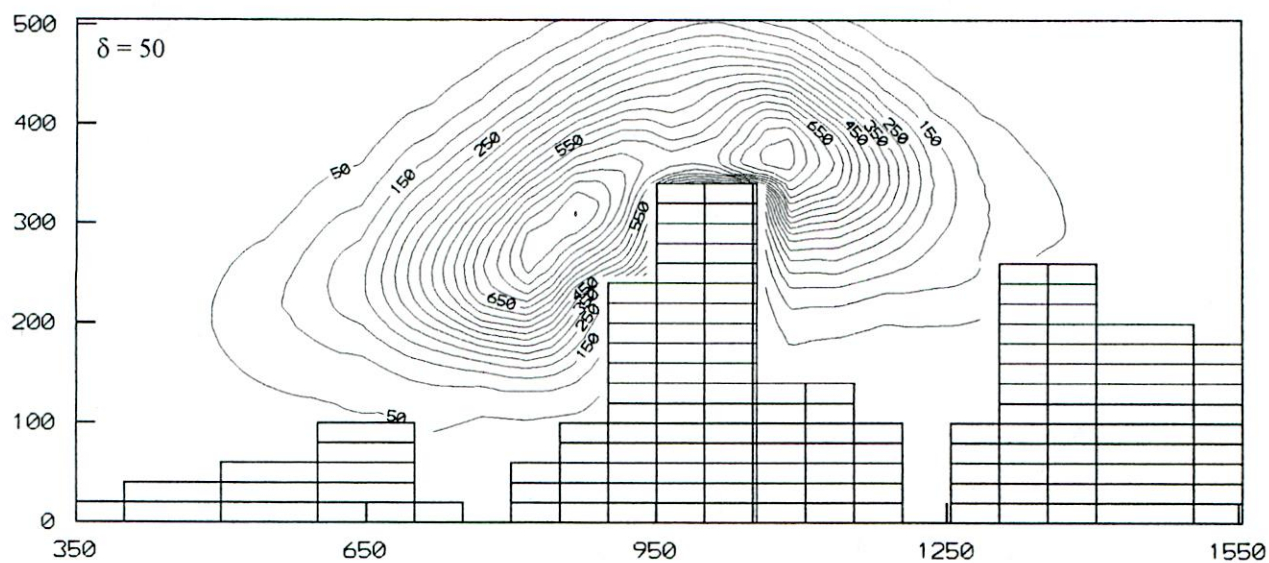
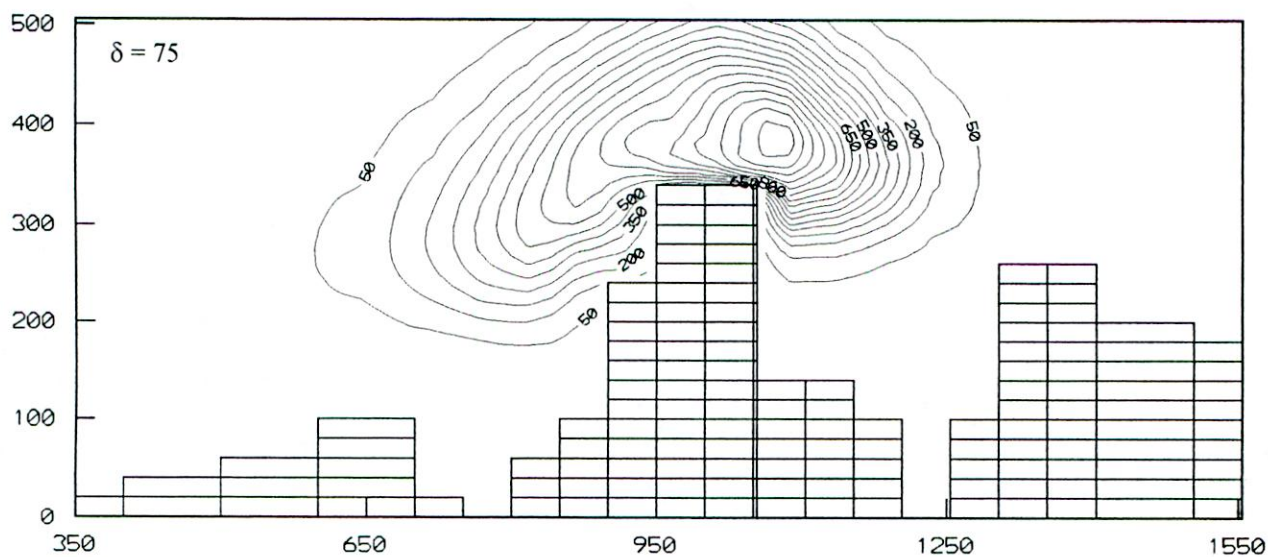


Figura 7.70 Concentración de SO_2 , [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], en secciones yz para las posiciones x que se indican

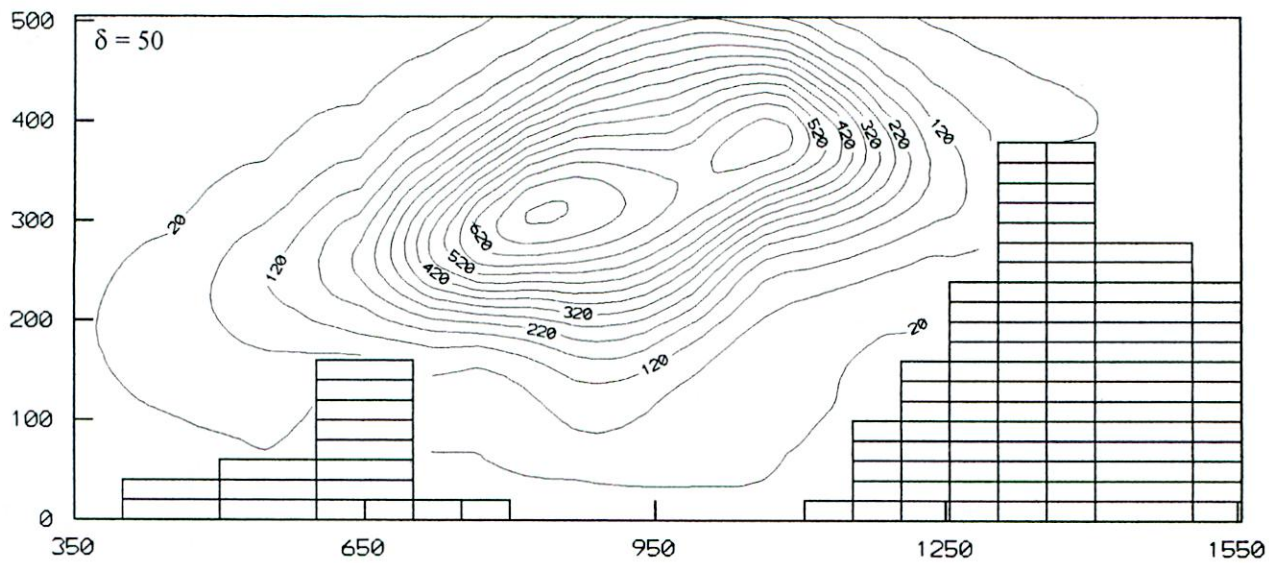


a

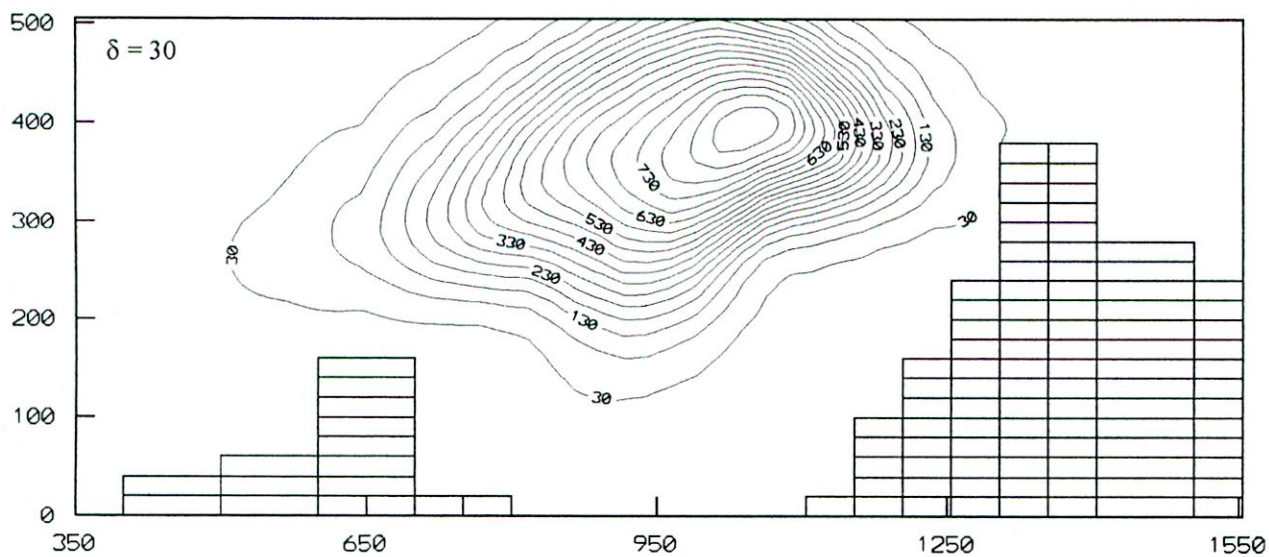


b

Figura 7.72 Concentración de SO_2 , [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], en secciones yz para $x = 914$ [m] con:
 a) altura de chimenea 100 [m]
 b) altura de chimenea 160 [m]



a



b

Figura 7.73 Concentración de SO_2 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], en secciones yz para $x = 1214$ [m] con:
 a) altura de chimenea 100 [m]
 b) altura de chimenea 160 [m]

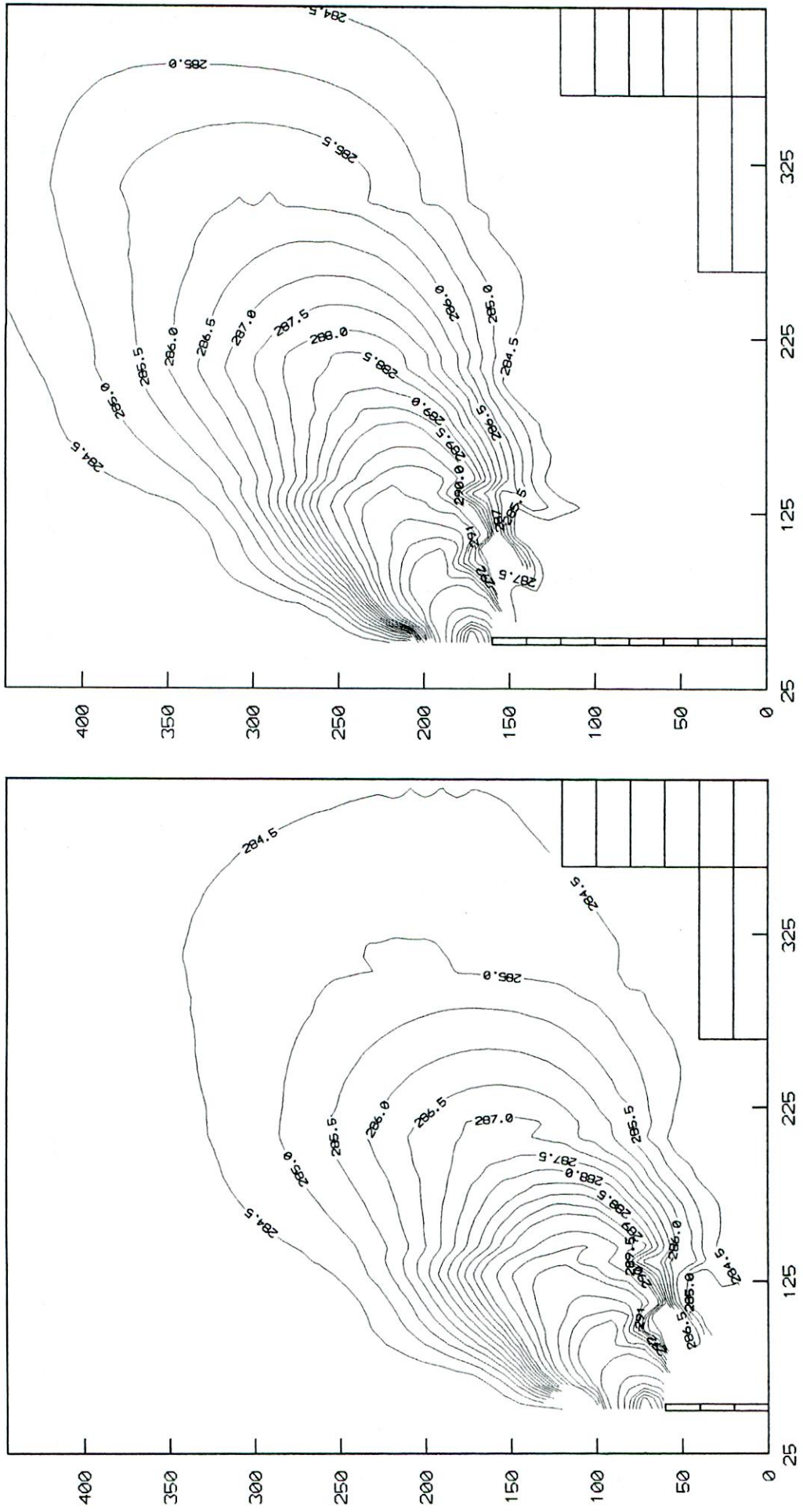


Figura 7.74 Temperatura [K], en sección xz para $y = 1050$ [m] en condiciones neutras con : a) chimenea de altura 60 [m] b) chimenea de altura 160 [m]

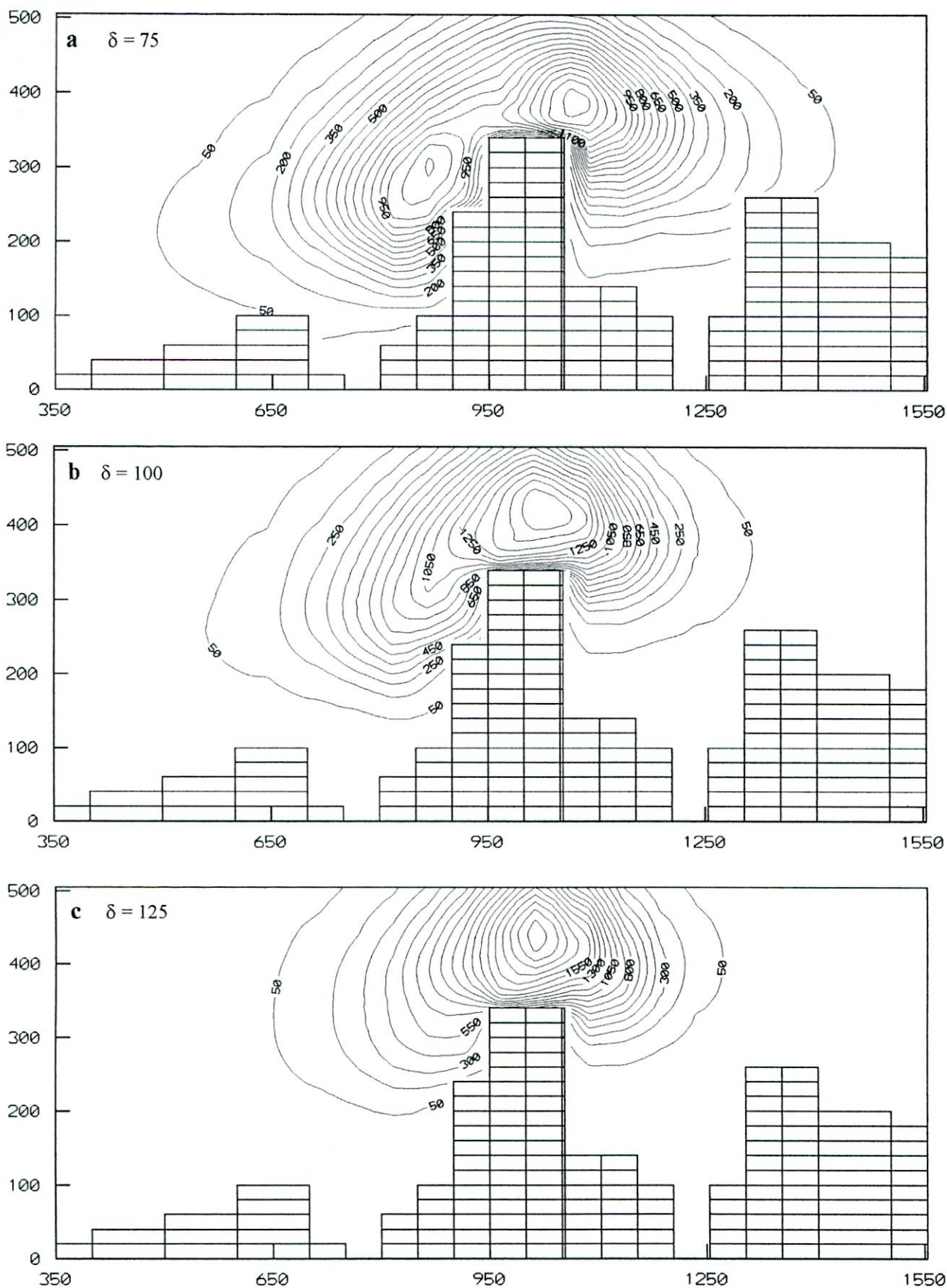


Figura 7.75 Concentración de SO_2 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], en secciones yz para $x = 914$ [m] en condiciones neutras con:
 a) altura de chimenea 60 [m] b) altura de chimenea 100 [m] c) altura de chimenea 160 [m]

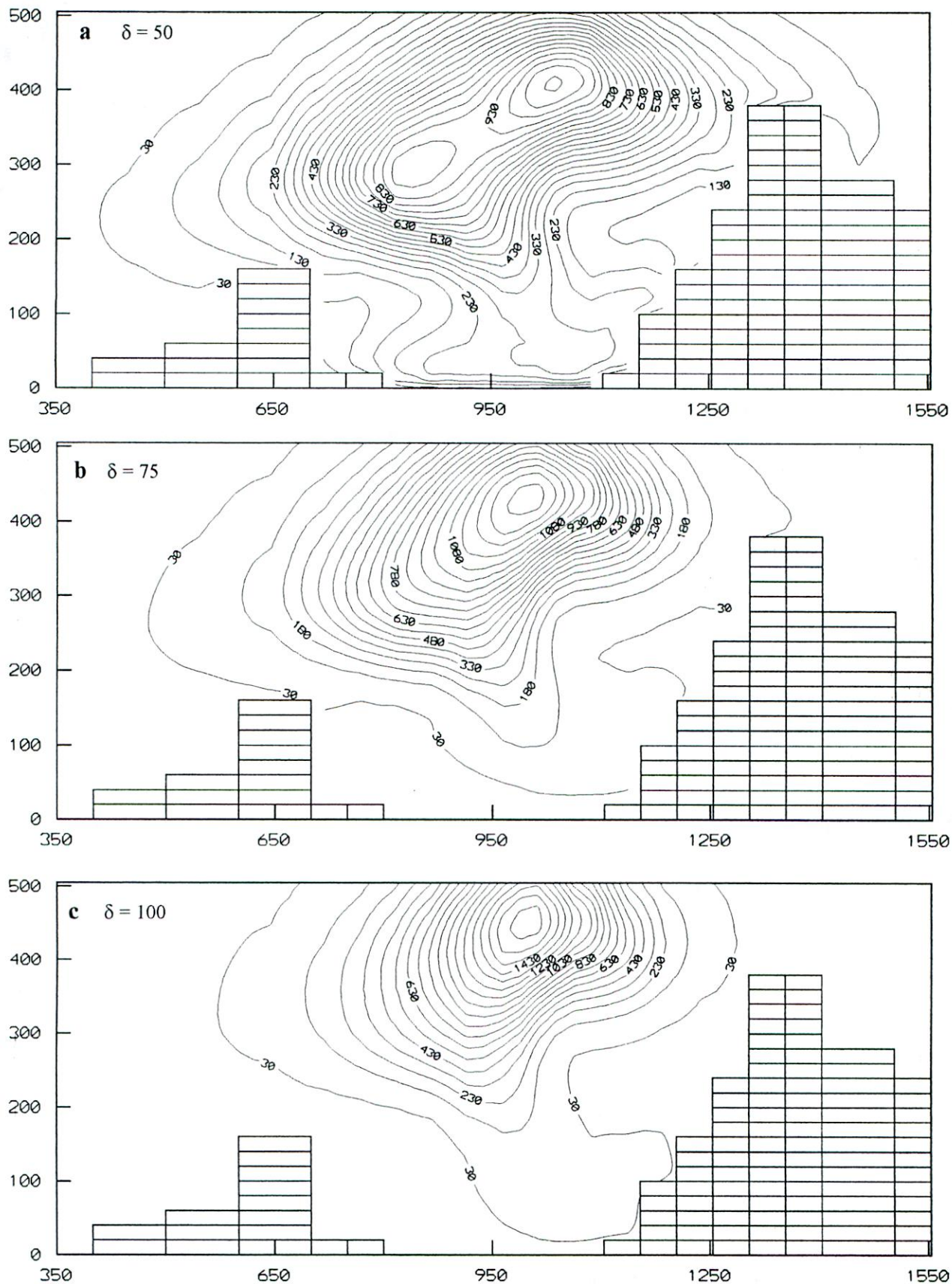


Figura 7.76 Concentración de SO_2 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], en secciones yz para $x = 1214$ [m] en condiciones neutras con:
 a) altura de chimenea 60 [m] b) altura de chimenea 100 [m] c) altura de chimenea 160 [m]

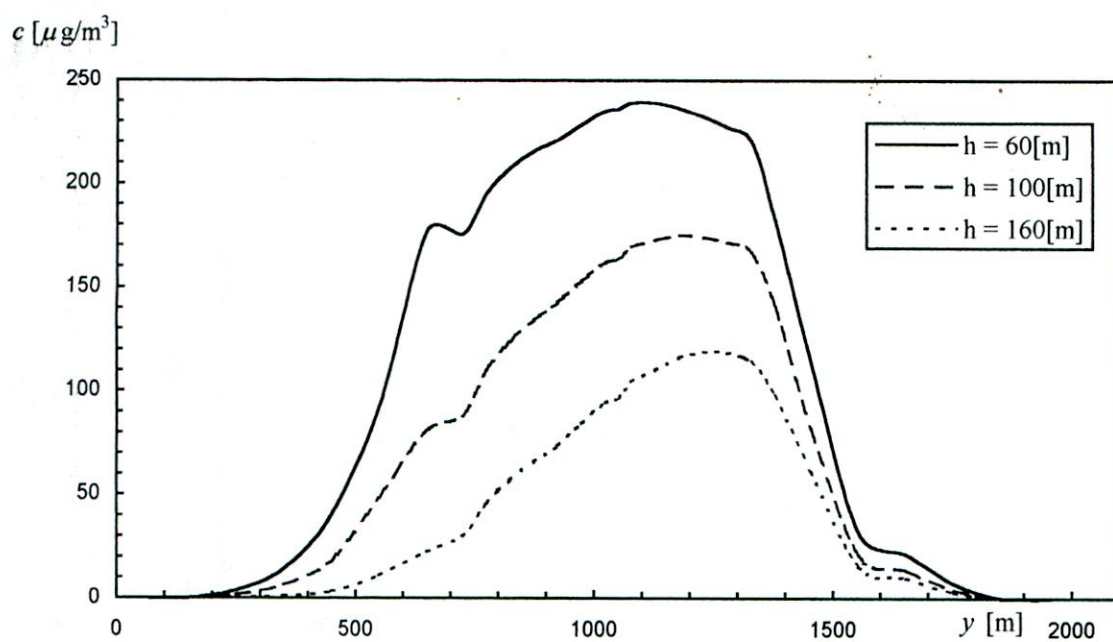


Figura 7.77 Concentración de SO_2 a 10 [m] de altura en $x = 2160$ [m] (h : altura de chimenea), para condiciones estables

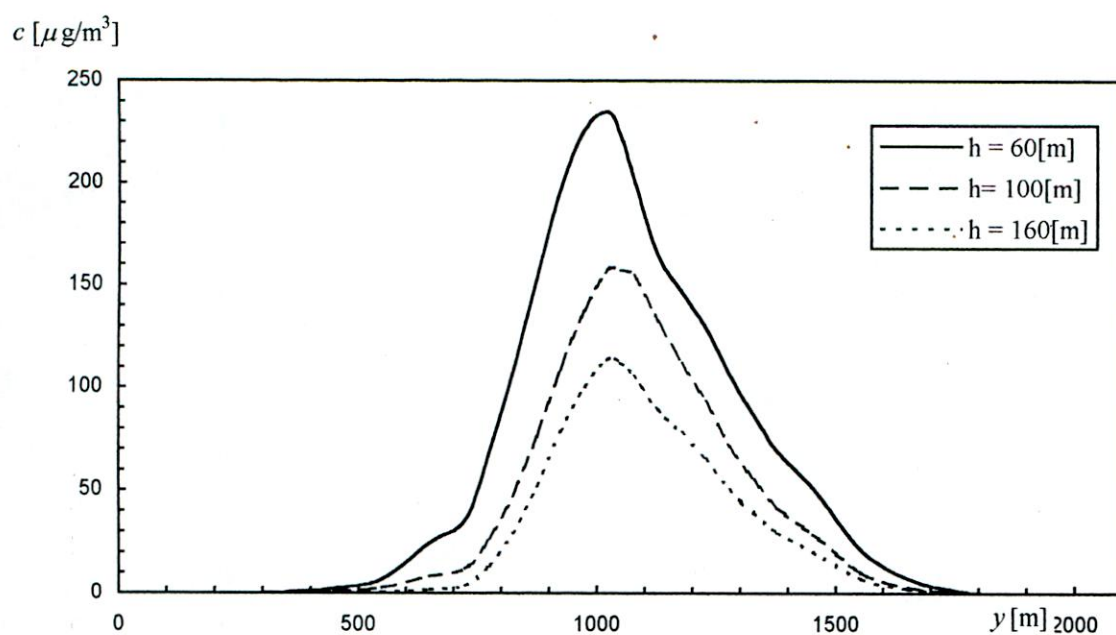


Figura 7.78 Concentración de SO_2 a 10 [m] de altura en $x = 2160$ [m] (h : altura de chimenea), para condiciones neutras

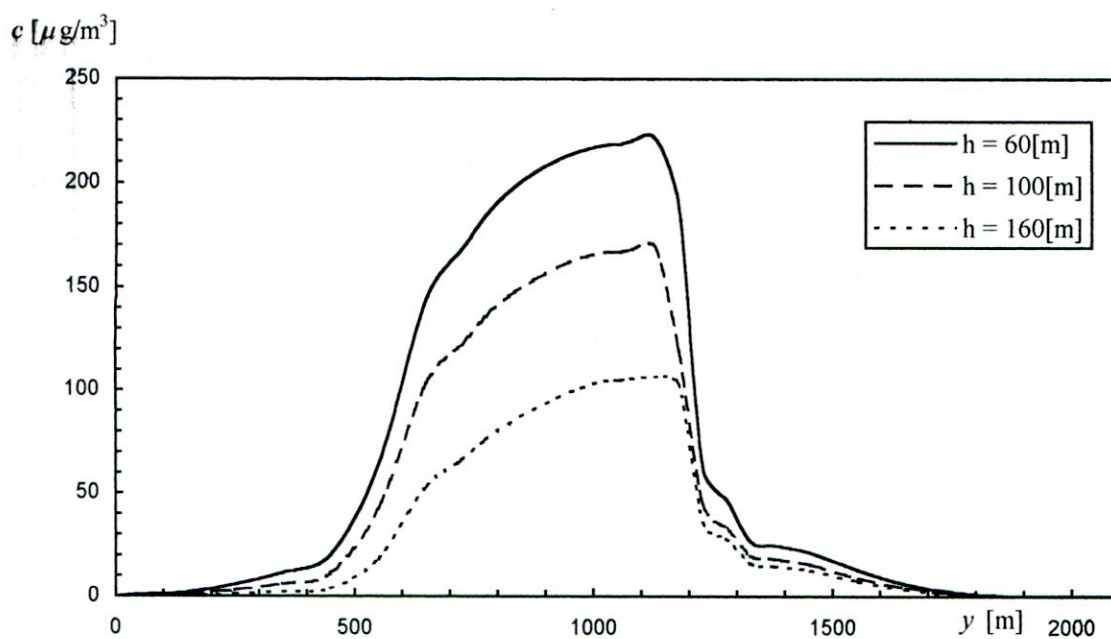


Figura 7.79 Concentración de SO_2 a 10 [m] de altura en $x = 3660$ [m] (h : altura de chimenea), para condiciones estables

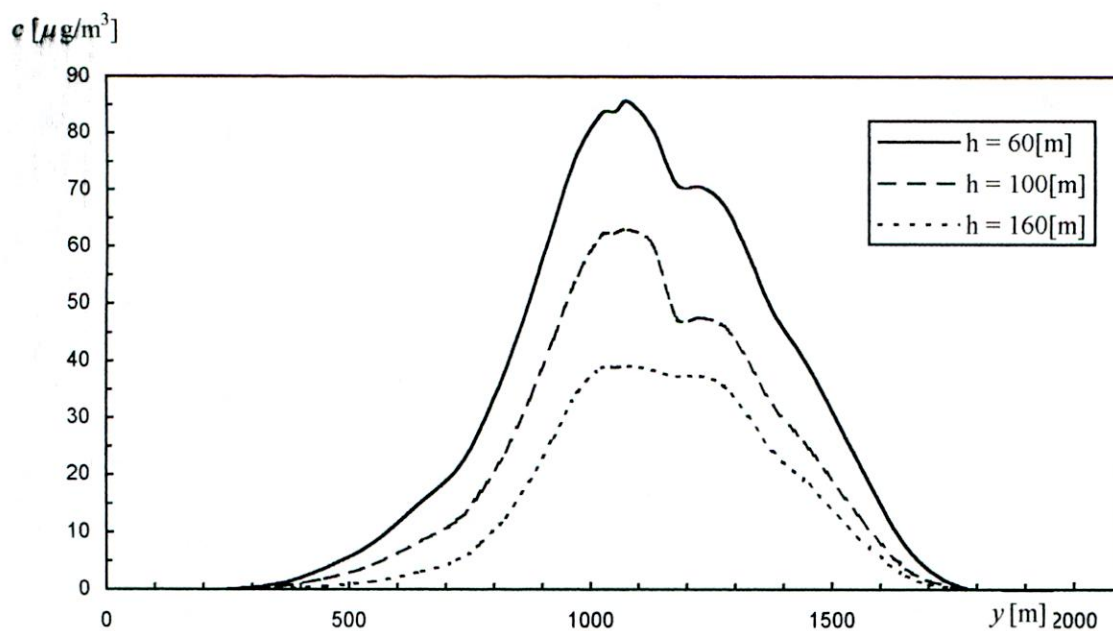


Figura 7.80 Concentración de SO_2 a 10 [m] de altura en $x = 3660$ [m] (h : altura de chimenea), para condiciones neutras

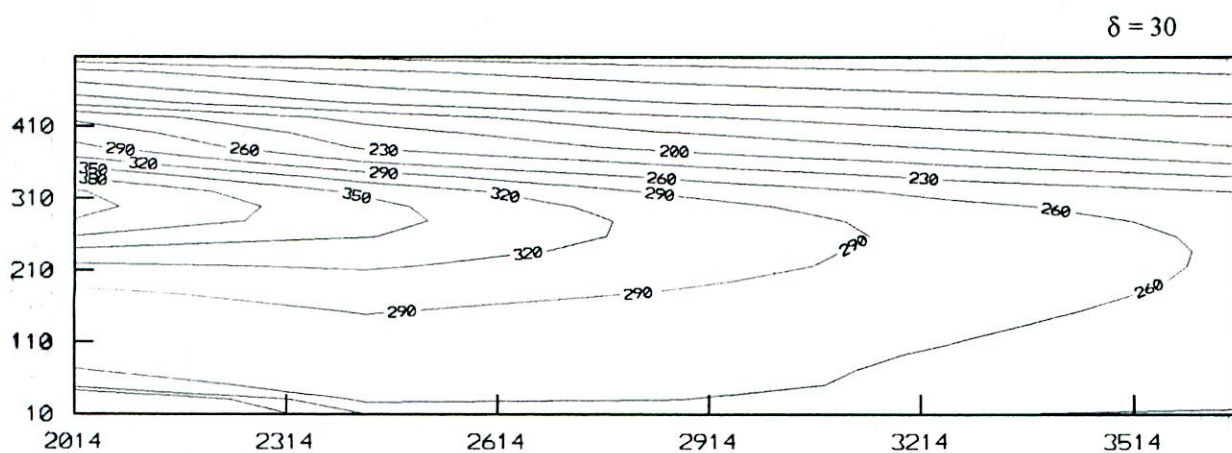


Figura 7.81 Concentración de SO₂ [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], en sección xz para $y = 1030$ [m], chimenea de 60[m], condiciones estables

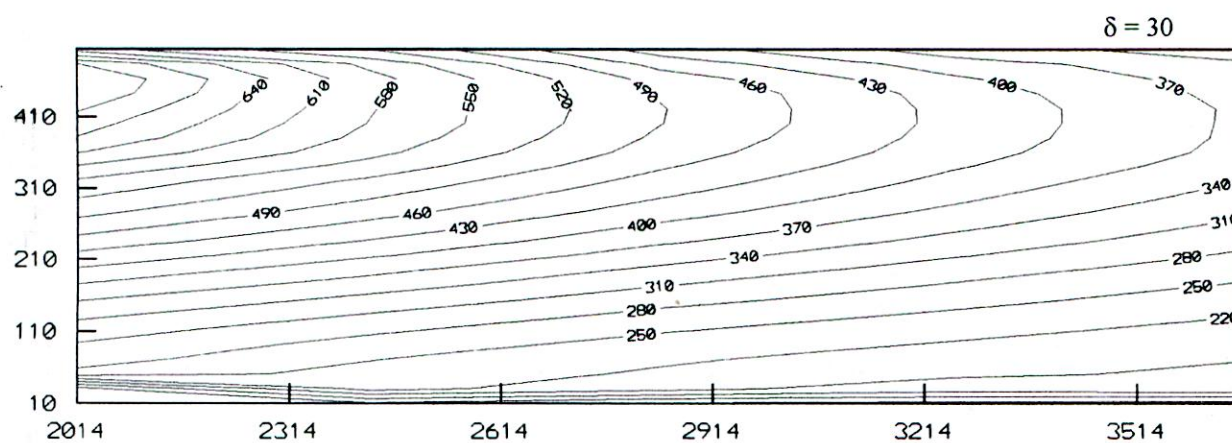


Figura 7.82 Concentración de SO₂ [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], en sección xz para $y = 1030$ [m], chimenea de 60 [m], condiciones neutras

8 Conclusiones

Los resultados obtenidos muestran que a pesar de la complejidad del flujo y de los fenómenos de difusión que tienen lugar cuando sustancias contaminantes son emitidas próximas a superficies altamente irregulares, los procesos físicos fundamentales que intervienen son identificables y abordables por una modelación matemática. Los modelos adoptados, particularmente los que se refieren al mecanismo de la turbulencia, no pretenden ser exactos, y conceptos como viscosidad turbulenta o difusión turbulenta proporcional al gradiente no son fáciles de justificar teóricamente. No obstante, se ha visto que estas hipótesis, desafiando a veces requisitos formales, han resultado útiles para predecir el comportamiento de flujos de esta naturaleza, y los resultados pueden considerarse satisfactorios. Los tiempos de computación son moderados, teniendo en cuenta la gran cantidad de datos calculados (para los casos 1 y 2 se resuelven 170.723 ecuaciones, y para el caso 3, 195.122 ecuaciones) y la pequeña envergadura del computador empleado.

Aunque no es posible contar en los casos analizados con información experimental con la cual comparar rigurosamente los resultados, la discusión en el capítulo anterior muestra que éstos presentan las características y fenómenos observados en situaciones de este tipo. Estos fenómenos, tales como las cavidades de recirculación detrás de edificios y colinas, el abatimiento de la pluma en la estela de obstáculos, la circulación transversal de aire en calles, etc., son bien conocidos y por lo tanto, para una situación específica su presencia podría incluso inferirse. Sin embargo, el poder cuantificar su magnitud, en términos de velocidades de viento, intensidad de la turbulencia y otros parámetros decisivos para la dispersión de contaminantes difícilmente puede lograrse sin recurrir a procedimientos de cálculo como los utilizados en este trabajo. Relaciones empíricas para efectuar estimaciones directas se han obtenido sólo para geometrías mucho más simples, tales como edificios aislados. Para grupos de edificios o centros urbanos, el flujo de aire y la dispersión generalmente están asociados en forma unívoca a la configuración de fuentes y edificaciones, y se hace muy difícil generalizar el comportamiento. Algunas aproximaciones postuladas para grupos simples de edificios han tenido una aplicación muy limitada, y han mostrado una gran discrepancia con valores medidos^[22]. Además, estos modelos sólo están orientados a calcular concentraciones en puntos alejados del grupo y no entre los edificios mismos. Ante esto se recurrió en el pasado a mediciones directas o a modelos

físicos en túneles de viento. Hoy en día la modelación numérica es una alternativa práctica y más económica, y un modelo computacional como el expuesto puede ser muy útil en estudios de ingeniería que deban resolver problemas concretos de contaminación ambiental involucrando fuentes situadas entre un conjunto de edificaciones o en sus cercanías.

Además de las emisiones en las calles de una ciudad, se podrían modelar con los mismos métodos emisiones desde chimeneas relativamente bajas rodeadas por construcciones, como sucede en complejos industriales. Esto permitiría un tratamiento adecuado de la pérdida de altura efectiva de chimenea y otras perturbaciones que sufre la pluma debido a efectos aerodinámicos de las estructuras circundantes, y que pueden influir en forma importante en las concentraciones producidas en zonas cercanas a la planta. Del mismo modo se podrían estudiar situaciones de polución local al interior de la planta misma debido, por ejemplo, a emisiones fugitivas. El método puede emplearse también en el diseño apropiado de sistemas de ventilación, ya que al conocer el patrón de flujo y las concentraciones de sustancias en las inmediaciones de paredes y techos de edificios, se pueden determinar las mejores localizaciones para las tomas de aire fresco y los ductos de evacuación. No es inusual que debido a una mala ubicación de éstas resulten sistemas de ventilación ineficientes, debido a la recirculación de una parte importante del flujo de descarga (se mencionan en la literatura casos de hasta un 50 % de presencia de los gases descargados en la toma de aire fresco). En todos estos casos la determinación del campo de flujo para la geometría particular del problema es esencial, y es poco probable que el análisis pueda efectuarse aplicando los modelos empíricos de dispersión disponibles, los que se basan en hipótesis muy idealizadas para los campos de flujo y la geometría. De hecho, en ciertos problemas urbanos la determinación del campo de flujo puede ser el objetivo (y no sólo un medio para obtener las concentraciones de contaminantes), como ocurre en el estudio de vientos en zonas peatonales. Esta área ha preocupado a arquitectos y urbanistas, debido a condiciones de viento molestas en calles cerca de edificios altos. Se ha observado que esto se debe a menudo a la deflexión hacia abajo del viento en la parte superior de los edificios, inducida por el gradiente de presión en sus costados a barlovento (un hecho observado en los resultados del caso 2). Esta aceleración es acompañada por el desarrollo de vórtices intensos cerca de las esquinas de estos edificios. La situación se ha remediado modificando el diseño de la base de los edificios, evitando calles estrechas entre edificios altos, y por el uso de corta-vientos en áreas abiertas. Modelos computacionales como el expuesto son un medio eficaz para ayudar a resolver estos problemas.

En el tercer caso resuelto, los resultados muestran cómo la distribución de la concentración obedece a condiciones locales de viento y turbulencia, impuestas por la topografía del terreno, produciéndose una distorsión tridimensional de la pluma. Los modelos gaussianos para difusión sobre terreno irregular utilizan coeficientes de dispersión que dependen únicamente de la distancia a la fuente y no toman en cuenta estas condiciones locales. Por lo mismo, la concentración en cualquier punto es calculada en base a la velocidad de viento que se registra en el lugar donde se ubica la chimenea. Adicionalmente, las correcciones que en tales modelos se introducen a la trayectoria de la pluma por efecto del terreno, sólo ajustan la altura de la pluma con respecto al nivel local de éste, pero no consideran la bifurcación o la desviación lateral que la pluma puede sufrir, de manera que para cada dirección del viento en la fuente, la pluma es tratada como una trayectoria bidimensional en dicha dirección. En estos modelos es reconocida la limitación para describir la difusión que ocurre en el lado de sotavento de las colinas, y en consecuencia, sólo se utiliza la información sobre la topografía del terreno mientras la altura sea monótonamente creciente a medida que aumenta la distancia a la fuente.

No se pretende con esto que los modelos de plumas gaussianos sean substituidos por modelaciones de flujos turbulentos en todos los casos en que la superficie no sea plana. Para estimar las concentraciones producidas por emisiones desde chimeneas altas, la modelación gaussiana puede servir como una primera aproximación, principalmente en áreas geográficas extensas, donde las perturbaciones producidas por el terreno son menores en relación a la escala a la cual se describe el campo de concentración. Además, este tipo de modelos proporciona una forma práctica de realizar tales estimaciones con un bajo costo computacional. Debe recordarse que este método se emplea fundamentalmente en estudios de contaminación con propósitos regulatorios, en los cuales se necesita comparar los resultados con normas ambientales, las que generalmente se expresan en términos de los máximos promedios horarios, diarios o anuales tolerados para la concentración de un contaminante dado. En cualquier caso, es preciso determinar la distribución de concentración en intervalos de una hora, durante un periodo prolongado, usualmente de hasta un año. Esto implica simular miles de situaciones distintas (para cada hora se tendrán direcciones y velocidades de viento, temperaturas, clases de estabilidad, etc. diferentes, obtenidas de registros meteorológicos), por lo que la rapidez de cálculo del método que se emplee adquiere una importancia decisiva. Una modelación completa del campo de flujo hora a hora es evidentemente inviable (por ahora), y podría utilizarse para estudiar con más detalle sólo las horas en que se producen las condiciones más adversas, determinadas

con el modelo gaussiano. Por otra parte, debido a que estos modelos son empleados oficialmente por organismos de regulación ambiental, la forma en que deben aplicarse se encuentra normalizada y los resultados por lo tanto no dependen de quien los obtenga. Modelaciones más completas requieren la formulación de condiciones de contorno que por ahora son discretionales.

Con respecto a esto último, un problema que puede presentarse al aplicar este tipo de modelaciones en regiones concretas, es la dificultad para establecer algunas condiciones de contorno. En los casos resueltos, los límites del dominio de solución se tomaron suficientemente alejados del sector de interés, de manera que las derivadas de las variables en ellos se aproximen a cero. En situaciones específicas el buscar límites para el dominio de solución donde se puedan suponer condiciones de contorno simples, puede llevar a una región de modelación demasiado extensa, con la consiguiente pérdida de resolución en la discretización de la zona de interés. Una solución posible a este problema es el formular una modelación de pequeña escala, en torno directamente a esta zona, acoplada en sus contornos con una modelación de gran escala tomada sobre un área geográfica mayor, en la cual las condiciones de contorno sean predecibles. El modelo de escala menor abarca por lo tanto un subconjunto de la malla de discretización del modelo de gran escala, y las condiciones de contorno en sus límites se determinan por la igualdad de flujos de masa, especies polutantes, y otras propiedades transportadas, en la interfaz con el otro modelo. Así, obteniendo primero esta solución de gran escala, se pueden formular condiciones de contorno razonables en un sub-dominio de la región, donde se tendrá una malla de discretización refinada localmente.

Finalmente, una ventaja importante de una modelación en base a las ecuaciones de transporte de las especies contaminantes es la posibilidad de introducir procesos físicos o químicos de remoción (o formación). Para incorporar, por ejemplo, la deposición seca basta con incluir en el término fuente de los volúmenes de control que limitan con el suelo, el flujo de masa depositada, calculado como el producto de la velocidad de deposición y la concentración. Asimismo, de contarse con la información necesaria sobre los mecanismos de reacción y la cinética química para especies reactivas, como los NO_x y el ozono, se pueden calcular sus concentraciones incluyendo estos procesos. Para ello, cada volumen de control de la malla de discretización puede tratarse como un reactor perfectamente mezclado, donde los coeficientes de transporte con respecto a los volúmenes de control vecinos proporcionan los flujos de entrada y salida de reactantes y productos. La rapidez neta de producción o consumo de las

diversas especies químicas puede obtenerse aplicando la ley de acción de masas, de acuerdo al conjunto de reacciones químicas considerado. Además, debido a que las concentraciones de las sustancias bajo análisis son muy reducidas, no existirá una acción significativa de ellas sobre otras variables principales del sistema global de ecuaciones de conservación, como la temperatura o la densidad. El sistema de ecuaciones para las concentraciones de especies, todas de la forma (5.1f), puede ser resuelto entonces desacoplado de las demás ecuaciones de conservación del modelo una vez resuelto el campo de flujo.

Nomenclatura

A	: área transversal
a	: coeficiente en la ecuación de transporte discretizada
C_K	: coeficientes de anisotropía para difusividad
C_v, C_p	: calores específicos a volumen y presión constantes
C_1, C_2	: constantes de turbulencia
c	: concentración de masa; velocidad del sonido
D	: difusividad molecular de masa
d_0	: desplazamiento de plano cero
e	: energía interna específica
F_i	: fuerza de cuerpo, por unidad de volumen
F_i	: flujo total por unidad de área de propiedad transportada
g	: aceleración de gravedad
H	: altura de la capa límite atmosférica
h	: altura de emisión
J	: flujo de masa difusivo por unidad de área
K	: difusividad turbulenta
k	: energía cinética turbulenta
L	: longitud de Monin–Obukhov
L	: escala espacial de turbulencia
\mathcal{L}_l	: escala integral de longitud lagrangiana
l	: longitud de mezcla
p	: presión
Pe	: número de Peclet
Pr	: número de Prandtl (térmico)
q_i	: vector de flujo de calor por unidad de área
R	: constante de gas ideal para el aire (287 [J/kmol K])
R	: radio de la tierra
R_L	: coeficiente de correlación lagrangiano
Ri	: número de Richardson
S_c	: fuente de sustancia por unidad de volumen
S_m	: fuente de masa por unidad de volumen
S_h	: fuente de calor por unidad de volumen
S_1, S_2	: coeficientes de linealización del término fuente
s	: entropía específica

T	: temperatura termodinámica
T_*	: temperatura de fricción
\mathcal{I}_L	: escala integral de tiempo lagrangiana
t	: tiempo
u	: componente x de la velocidad
u_i	: vector de velocidad
u_*	: velocidad de fricción
V	: volumen
v	: componente y de la velocidad
v_d	: velocidad de deposición seca
v_g	: velocidad de precipitación gravitacional
w	: componente z de la velocidad
x_i	: vector de posición
x, y	: coordenadas cartesianas horizontales
z	: coordenada cartesiana vertical
z_0	: parámetro de rugosidad
α	: difusividad térmica molecular
Γ	: coeficiente de difusión generalizado
Δ	: razón de expansión
δ	: delta de Dirac
δ_{ij}	: delta de Kronecker
ε	: razón de disipación de energía cinética turbulenta
ε_{ijk}	: tensor de Levi–Civita
θ	: temperatura potencial
κ	: constante de von Kármán
λ	: conductividad térmica
μ	: viscosidad dinámica
ν	: viscosidad cinemática
ρ	: densidad de masa
σ	: número de Prandtl turbulento generalizado
σ	: coeficiente de dispersión gaussiano
σ_{ij}	: tensor de esfuerzo
σ^2	: varianza
τ	: esfuerzo de corte
τ_{ij}	: tensor de esfuerzo desviático

- ϕ : variable dependiente generalizada de la ecuación de transporte
 ϕ_m, ϕ_h : funciones de similaridad
 Ω : velocidad angular
 ω : coeficiente de relajación

Subíndices

- B : nodo vecino en dirección z negativa
 b : frontera entre nodos P y B
 E : nodo vecino en dirección x positiva
 e : frontera entre nodos P y E
 c : concentración de masa
 ef : efectivo (turbulento + molecular)
 m : momentum
 N : nodo vecino en dirección y positiva
 n : frontera entre nodos P y N
 nr : normal a la pared
 h : calor
 P : nodo central
 S : nodo vecino en dirección y negativa
 s : frontera entre nodos P y S
 T : nodo vecino en dirección z positiva
 t : frontera entre nodos P y T
 tg : tangente a la pared
 W : nodo vecino en dirección x negativa
 w : frontera entre nodos P y W
 w : en la pared

Superíndices

- 0 : instante de tiempo anterior
 \sim : iteración anterior
 $'$: fluctuación turbulenta; término de corrección
 $*$: valor estimado

Referencias

- [1] Arya S. P. (1982), "Atmospheric Boundary Layers over Homogeneous Terrain", en *Engineering Meteorology* (E. Plate, Ed.), pp. 233–267, Elsevier Scientific Publish. Co., Amsterdam.
- [2] Batchelor, G. K. (1970), *An Introduction to Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, London.
- [3] Brown M. J., Arya S. P., Snyder W. H. (1997), "Plume Descriptors Derived from a Non-Gaussian Concentration Model", *Atmospheric Environment*, **31**, 183–189.
- [4] Brutsaert W. H. (1982), "Exchange Processes at the Earth-Atmosphere Interface", en *Engineering Meteorology* (E. Plate, Ed.), pp. 319–369, Elsevier Scientific Publish. Co., Amsterdam.
- [5] Chapman G. T., Tobak M. (1985), "Observations, Theoretical Ideas, and Modelling of Turbulent Flows – Past, Present and Future", en *Theoretical Approaches to Turbulence* (D. Dwoyer, M. Hussaini, R. Voigt, Eds.), pp. 19–49, Springer-Verlag, New York.
- [6] De Lange H. C., De Goey L. P. H. (1994), "Numerical Flow Modelling In a Locally Refined Grid", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **37**, 497–515.
- [7] Devaney R. L. (1987), *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*, Addison-Wesley, Redwood City.
- [8] Ferziger J. H. (1985), "Large Eddy Simulation: Its Role in Turbulence Research", en *Theoretical Approaches to Turbulence* (D. Dwoyer, M. Hussaini, R. Voigt, Eds.), pp. 51–72, Springer-Verlag, New York.
- [9] Fisher B. E. A. (1979), "Use of the Diffusion Approximation to Model Atmospheric Dispersion over Short and Long Distances", en *Mathematical Modelling of Turbulent Diffusion in the Environment* (C. J. Harris, Ed.), pp. 145–185, Academic Press, London.
- [10] Gangoiti G., Sancho J., Ibarra G., Alonso L., García J., Navazo M., Durana N., Ilardia J. (1997), "Rise of Moist Plumes from Tall Stacks in Turbulent and Stratified Atmospheres", *Atmospheric Environment*, **31**, 253–269.

- [11] Hanna, S. R. (1982), "Turbulent Diffusion: Chimneys and Cooling Towers", en *Engineering Meteorology* (E. Plate, Ed.), pp. 429–479, Elsevier Scientific Publish. Co., Amsterdam.
- [12] Hinze J. O. (1959), *Turbulence*, McGraw–Hill, New York.
- [13] Holnicki P., Kaluszko A., Kurowski M., Ostrowski R., Zochowski A. (1986), "An Urban-Scale Computer Model for Short-Term Prediction of Air Pollution", *Archiwum Automatyki i Telemekhaniki*, Tom. XXXI, pp. 51–71.
- [14] Hunt J. C. R., Britter R. E., J. S. Puttock (1979), "Mathematical Models of Dispersion of Air Pollution Around Buildings and Hills", en *Mathematical Modelling of Turbulent Diffusion in the Environment* (C. J. Harris, Ed.), pp. 145–185, Academic Press, London.
- [15] Hunt J. C. R., Simpson J. E. (1982), "Atmospheric Boundary Layers over Non-Homogeneous Terrain", en *Engineering Meteorology* (E. Plate, Ed.), pp. 269–318, Elsevier Scientific Publish. Co., Amsterdam.
- [16] Iványi Z., Mersich I. (1982), "Simulation of the Urban Air Pollution Based on a Numerical UBL Model", *Atmospheric Environment*, **16**, 1835–1849.
- [17] Jensen N. O., Busch N. E. (1982), "Atmospheric Turbulence", en *Engineering Meteorology* (E. Plate, Ed.), pp. 179–231, Elsevier Scientific Publish. Co., Amsterdam.
- [18] Kotake S., Sano T. (1981), "Simulation Model of Air Pollution in Complex Terrains Including Streets and Buildings", *Atmospheric Environment*, **15**, 1001–1009.
- [19] Kuo T. W., Bracco F. V. (1982), "On the Scaling of Impulsively Started Incompressible Turbulent Round Jets", *Journal of Fluids Engineering*, **104**, 191–197.
- [20] Launder B. E. (1985), "Progress and Prospects in Phenomenological Turbulence Models", en *Theoretical Approaches to Turbulence* (D. Dwoyer, M. Hussaini, R. Voigt, Eds.), pp. 155–186, Springer-Verlag, New York.
- [21] Lumley J. L. (1985), "Strange Attractors, Coherent Structures and Statistical Approaches", en *Theoretical Approaches to Turbulence* (D. Dwoyer, M. Hussaini, R. Voigt, Eds.), pp. 359–363, Springer-Verlag, New York.
- [22] Meroney R. N. (1982), "Turbulent Diffusion Near Buildings", en *Engineering Meteorology* (E. Plate, Ed.), pp. 481–525, Elsevier Scientific Publish. Co., Amsterdam.

- [23] Panofsky, H. A. (1982), "The Atmosphere", en *Engineering Meteorology* (E. Plate, Ed.), pp.1-32, Elsevier Scientific Publish. Co., Amsterdam.
- [24] Patankar S. V. (1980), *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill, NewYork.
- [25] Pielke R. A. (1984), *Mesoscale Meteorological Modeling*, Academic Press, San Diego.
- [26] Pirani M., da Silva M., Manzanares N. (1996), "Estudo Comparativo entre os Modelos de Turbulência $k-\epsilon$ e o Modelo Algébrico do Tensor de Reynolds para Altos Números de Reynolds Utilizando o Método dos Volumes Finitos", Proceedings of the 6th Brazilian Congress of Engineering and Thermal Sciences.
- [27] Pruppacher, H. R.(1982), "Cloud and Precipitation Physics and the Water Budget of the Atmosphere", en *Engineering Meteorology* (E. Plate, Ed.), pp.71-124, Elsevier Scientific Publish. Co., Amsterdam.
- [28] Robins A. G., Fackrell J. E. (1979), "Continuous Plumes – Their Structure and Prediction", en *Mathematical Modelling of Turbulent Diffusion in the Enviroment* (C. J. Harris, Ed.), pp.55-114, Academic Press, London.
- [29] Rodi W. (1982) "Examples of Turbulence Models for Incompressible Flows", *AIAA Journal*, **20**, 872-879.
- [30] Smith F. B., Blackall R. M. (1979), "The Application of Field-Experiment Data to the Parametrisation of the Dispersion of Plumes from Ground-Level and Elevated Sources", en *Mathematical Modelling of Turbulent Diffusion in the Enviroment* (C. J. Harris, Ed.), pp.201-236, Academic Press, London.
- [31] Trinity Consultants Inc. (1987), *User's Guide to the Rough Terrain Diffusion Model*, Dallas, Texas 75243.