



26
MEXICO UN 2027 ATG
INSTRUMENTO AS 30 ELIAZ
**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

7ey

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
ZARAGOZA

**MODELACION MATEMATICA DE FLUJOS
TURBULENTOS ATMOSFERICOS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A :
JAVIER MARTINEZ ROMERO

ASESOR: DR. HERMILO RAMIREZ LEON

MEXICO, D. F.

1995

FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS
SUPERIORES *ZARAGOZA*

JEFATURA DE LA CARRERA
DE INGENIERIA QUIMICA

02/JU/10/94

SR. JAVIER MARTINEZ ROMERO
P R E S E N T E.

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado para el Examen Profesional, le comunico que la Jefatura a mi cargo ha propuesto la siguiente designación:

PRESIDENTE:	ING. EDUARDO VAZQUEZ ZAMORA
VOCAL:	DR. HERMILO RAMIREZ LEON
SECRETARIO:	ING. JOSE LUIS MACIAS PEREZ
SUPLENTE:	ING. NARCISO CAMPERO GARNICA
SUPLENTE:	ING. JOSE BENJAMIN RANGEL GRANADOS

A T E N T A M E N T E
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"

México, D.F., 4 de noviembre de 1994


ING. JOSE BENJAMIN RANGEL GRANADOS
JEFE DE LA CARRERA DE
INGENIERIA QUIMICA

Irm

**A mis padres,
por su enseñanza,**

**y a mis hermanos,
por su apoyo.**

AGRADECIMIENTOS

**Al Dr. Hermilo Ramírez León por su asesoría para realizar este trabajo,
y en especial por su confianza y amistad.**



**Al Instituto de Investigaciones Eléctricas (IIE) por el apoyo y
facilidades otorgadas en el uso de sus instalaciones.**

**Al Centro de Cómputo de la UNAM por haber otorgado tiempo de
CPU en la supercomputadora CRAY-YMP 4/464**

A las personas que me apoyaron en la realización de este trabajo.

RESUMEN

Uno de los principales problemas que afectan hoy en día a la humanidad es la contaminación atmosférica. En el presente trabajo se presenta el estudio de una fuente de emisión contaminante de tipo puntal.

En el aspecto teórico se desarrolla un modelo físico matemático con el que se trata de representar la dinámica atmosférica y la evolución de un contaminante pasivo emitido desde una chimenea. Para ello se considera un modelo deducido de las ecuaciones fundamentales de la Mecánica de Fluidos para un flujo incompresible. La turbulencia atmosférica es considerada a partir de modelos de turbulencia de primer orden a dos ecuaciones.

El modelo presentado es resuelto en forma bidimensional mediante un método de discretización en diferencias finitas, e implementado en un programa de cómputo que permite analizar la evolución, en el espacio y en el tiempo, de los contaminantes en la atmósfera.

El programa de cómputo fue aplicado en la simulación de un jet plano turbulento emitido hacia una atmósfera adiabática, y los resultados fueron comparados con diferentes datos experimentales encontrados en la bibliografía. Los resultados obtenidos con el modelo fueron satisfactorios.

CONTENIDO

RESUMEN	i
CONTENIDO	ii
I. NOTACIÓN	vi
CAPITULO 1 INTRODUCCIÓN	
1.1 Descripción del problema	1
1.2 Importancia de los modelos	3
1.3 Los modelos existentes.....	4
1.4 Objetivo del trabajo	7
1.5 Organización del trabajo.....	7
CAPITULO 2 EL MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO	
2.1 Introducción	9
2.2 Ecuaciones básicas de la dinámica de fluidos.....	10
2.2.1 La ecuación de continuidad.....	10
2.2.2 Ecuación de la conservación de la cantidad de movimiento	11
2.2.3 Ley de Newton-Stokes	12
2.2.4 Ecuación de la conservación de la energía	13
2.2.5 Ley de Fourier	14
2.2.6 Ecuación de la conservación de especies	14
2.2.7 Ley de Fick.....	15
2.2.8 Ecuación de estado.....	15

2.2.9	Resumen de las ecuaciones instantáneas.....	16
2.3	Hipótesis de inicio	17
2.4	Sistema de Boussinesq.....	18
2.4.1	Ecuación de estado.....	20
2.4.2	Ecuación de continuidad.....	21
2.4.3	Ecuación de momentum.....	21
2.4.4	Ecuación de energía.....	22
2.4.5	Ecuación de conservación de especies.....	23
2.4.6	Ecuación de la divergencia de la velocidad.....	24
2.4.7	Ecuaciones del movimiento medio de desviación.....	26
2.5	Flujo turbulento.....	28
2.5.1	Teoremas de Reynolds.....	29
2.5.2	Ecuación de continuidad.....	31
2.5.3	Ecuación para la velocidad.....	31
2.5.4	Ecuación para la temperatura.....	33
2.5.5	Ecuación de concentración de la masa del contaminante.....	34
2.5.6	Ecuación de la densidad.....	35
2.5.7	Discusión de las ecuaciones medias.....	36

CAPITULO 3 LOS MODELOS DE TURBULENCIA

3.1	Introducción.....	37
3.2	Modelos de orden cero.....	38
3.2.1	Modelo de viscosidad turbulenta ν_T	38
3.2.2	Modelo de difusión turbulenta K_T	40
3.2.3	Modelo de difusión turbulenta K_C	40
3.3	Modelos de turbulencia de primer orden.....	41
3.3.1	Modelo $\kappa - \epsilon$	41
3.3.2	Modelo $\overline{\theta'}^2 - \epsilon_\theta$	45
3.3.3	Modelo $\overline{v_a'^2} - \epsilon_c$	49

CAPITULO 4 LOS MÉTODOS NUMÉRICOS DE SOLUCIÓN

4.1	Introducción.....	51
4.2	Discretización espacial.....	52
4.3	Discretización de ecuaciones.....	53

4.3.1	El método de diferencias finitas.....	54
4.3.2	Ecuación media de la velocidad vertical	57
4.3.3	Ecuación media de la velocidad horizontal	58
4.3.4	Ecuación de la energía cinética de la turbulencia	59
4.3.5	Ecuación de la disipación de la energía cinética de la turbulencia.....	60
4.3.6	Ecuación de la temperatura media.....	61
4.3.7	Ecuación de la varianza de temperatura	62
4.3.8	Ecuación de la disipación de la varianza de la temperatura	62
4.3.9	Ecuación media de la concentración de especies.....	63
4.3.10	Ecuación de la varianza de la concentración.....	64
4.3.11	Ecuación de la disipación de la varianza de las especies.....	65
4.4	El esquema de convección	65
4.5	Método de compresibilidad artificial	67
4.6	Análisis de esquemas numéricos.....	70
4.6.1	Consistencia	70
4.6.2	Estabilidad.....	71
4.6.3	Convergencia.....	71
4.7	El programa QUETZAL/II	72
 CAPITULO 5 ESTUDIO PARAMÉTRICO DE FLUJOS VERTICALES ATMOSFÉRICOS		
5.1	Introducción.....	76
5.2	Clasificación de los jets y sus características.....	77
5.3	Jet plano turbulento	79
5.3.1	Identificación de las zonas de un jet plano turbulento.....	80
5.3.2	Análisis de similitud	81
5.3.3	Obtención de la línea de expansión y el origen de similitud.....	84
 CAPITULO 6 ESTUDIO DE FLUJOS TURBULENTOS EN UNA ATMÓSFERA ADIABÁTICA		
6.1	Introducción.....	85
6.2	Caso de estudio	86
6.2.1	Definición del dominio.....	86
6.2.2	Perfiles de emisión.....	89
6.3	Condiciones iniciales.....	91
6.4	Condiciones de frontera.....	92

6.4.1	Condiciones de frontera para la línea de emisión	92
6.4.2	Condiciones de frontera para la línea de simetría	93
6.4.3	Condiciones límites para la frontera libre superior	94
6.4.4	Condiciones límites para la frontera libre derecha	95
6.4.5	Condiciones de frontera para la pared ficticia	95
6.5	Prueba de estacionaridad	97
6.6	Discusión de resultados	99
6.6.1	Resultados para el campo dinámico	100
6.6.2	Resultados para el campo térmico	119
6.6.3	Resultados de la concentración de especies	131
II.	PERSPECTIVAS	142
III.	CONCLUSIONES	146
IV.	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	148

I. NOTACION

LETRAS LATINAS

- A_W constante de similaridad para la velocidad vertical
 A_φ constante de similaridad para la temperatura o concentración
B término de Buoyancy de la energía cinética turbulenta
 B_W constante de perfiles gaussianos para la velocidad
 B_φ constante de perfiles gaussianos para la temperatura o concentración
 C_A parámetro del esquema de convección
 \bar{C}_α concentración de especies instantánea (fracción másica)
 $C_{\alpha 0}$ concentración de especies en la atmósfera (fracción másica)
 C_α concentración de especies de desviación (fracción másica)
 \bar{C}_α concentración de especies media de desviación (fracción másica)
 c_α fluctuación turbulenta de la concentración de especies de desviación
 $\overline{c_\alpha^2}$ varianza de la fluctuación de la concentración
 $C_{\varepsilon_1}, C_{\varepsilon_2}$ constantes de modelación de la ecuación de ε
 $C_{\varepsilon_{c1}}, C_{\varepsilon_{c2}}, C_{\varepsilon_{c3}}, C_{\varepsilon_{c4}}$ constantes de modelación de la ecuación de $\varepsilon_{c\alpha}$
 $C_{\varepsilon_{T1}}, C_{\varepsilon_{T2}}, C_{\varepsilon_{T3}}, C_{\varepsilon_{T4}}$ constantes de modelación de la ecuación de ε_θ
 C_μ constante de modelación en la ecuación de viscosidad turbulenta
 C_p capacidad calorífica a presión constante
 C_{p0} capacidad calorífica constante de la atmósfera
 D coeficiente de difusión de desviación
 \bar{D} coeficiente de difusión instantáneo
 D_0 coeficiente de difusión en la atmósfera en calma
 D_α difusividad de α
 D_φ diámetro de la salida de la chimenea
 E energía total

g_i	vector de aceleración de la gravedad
h	entalpía
H_ϕ	altura de la chimenea
k	conductividad térmica
K_C	difusividad turbulenta equivalente
K_{C1}, K_{C2}, K_{C3}	coeficientes de difusividad turbulenta (modelo de orden cero)
K_T	difusividad térmica turbulenta equivalente
K_{T1}, K_{T2}, K_{T3}	coeficientes de difusividad térmica turbulenta (modelo de orden cero)
L_a	escala típica de la atmósfera
L_E	línea de expansión dinámica
$L_{E,\phi}$	línea de expansión térmica/especies
L_s	escala típica del movimiento
M	número de Mach
\bar{P}	presión instantánea
P_0	presión en la atmósfera
P	presión de desviación
\bar{P}	presión media de desviación
p	fluctuación turbulenta de la presión
P	término de producción de energía cinética turbulenta
Pr	número de Prandtl
Pr_T	número de Prandtl turbulento
Q_i	conducción de calor
R	constante de los gases ideales
R_c	relación de las escalas de tiempo dinámico y de especies
R_θ	relación de las escalas de tiempo dinámico y térmico
R_0	constante del aire en la atmósfera
Ro	número de Rosby
Re	número de Reynolds
Ri	número de Richardson
Sc	número de Schmidt
Sc_T	número de Schmidt turbulento
t	tiempo
\bar{T}	temperatura instantánea
T_0	temperatura del estado de referencia

T_N	temperatura natural o atmosférica
T	desviación de temperatura
\bar{T}	temperatura media de desviación
U	velocidad horizontal
\vec{U}_j	vector de velocidad instantánea
U_j	desviación de velocidad con respecto de la atmósfera en calma
\bar{U}_j	velocidad media de desviación
u_j	fluctuación turbulenta de la velocidad de desviación
U_S	velocidad del sonido
$\overline{u_j c_\alpha}$	flujo turbulento de especies
$\overline{u_i u_j}$	esfuerzo de Reynolds
$\overline{u_i \theta}$	flujo turbulento de calor
\vec{V}	vector de velocidad en el método de compresibilidad artificial
W	velocidad vertical
W_m	velocidad vertical máxima en un plano horizontal
W_ϕ	velocidad máxima en la salida de la chimenea
x_i	coordenadas cartesianas
Z_D	altura adimensional de identificación de zonas de flujo
Z_ϕ	origen ficticio de similitud

LETRAS GRIEGAS

α	especie química contaminante
α_A	parámetro de decentramiento en el esquema de convección
α_N	difusividad térmica natural de la atmósfera
β	coeficiente de expansión volumétrica
β_c	parámetro del método de compresibilidad artificial
δ	semilongitud dinámica del jet
δ_ϕ	semilongitud térmica o de especies del jet
δ_{ij}	delta de Kronecker
Δt	incremento de tiempo
Δx_j	incremento espacial horizontal
Δz_j	incremento espacial vertical

$\Delta\varphi_m$	máxima diferencia de temperatura o concentración con respecto a la atmósfera en reposo en un plano horizontal
$\Delta\varphi_\varphi$	máxima diferencia de temperatura o concentración en la salida de la chimenea
ε	disipación de la energía cinética de la turbulencia
ε_θ	disipación de la varianza de la fluctuación turbulenta de temperatura
ε_c	disipación de la varianza de la fluctuación turbulenta de la concentración
γ	radio de calores específicos
Γ_{ij}	tensor de esfuerzos
η	variable de afinidad
η_φ	variable de afinidad térmica o de especies
φ	escalar (temperatura, concentración o cantidades turbulentas)
κ	energía cinética de la turbulencia
$\bar{\mu}$	viscosidad
μ_0	viscosidad en la atmósfera
μ	desviación de la viscosidad
$\bar{\mu}^*$	segundo coeficiente de viscosidad
μ_0^*	segundo coeficiente de viscosidad en la atmósfera
μ^*	desviación del segundo coeficiente de viscosidad
ν	viscosidad cinemática
ν_N	viscosidad cinemática natural
ν_T	viscosidad turbulenta
$\nu_{T1}, \nu_{T2}, \nu_{T3}$	coeficientes de viscosidad turbulenta (modelo de orden cero)
θ	fluctuación turbulenta de la temperatura de desviación
$\overline{\theta^2}$	varianza de la fluctuación de temperatura
$\bar{\rho}$	densidad
ρ_0	densidad atmosférica
ρ_N	densidad natural
ρ	desviación de la densidad
$\bar{\rho}$	densidad media de desviación
ρ'	fluctuación turbulenta de la densidad
σ_κ	constante de modelación de la ecuación de κ
σ_ε	constante de modelación de la ecuación de ε
σ_θ	constante de modelación de la ecuación de $\overline{\theta^2}$
$\sigma_{\varepsilon\theta}$	constante de modelación de la ecuación de ε_θ

σ_c	constante de modelación de la ecuación de $\overline{c_a^2}$
σ_{ε_c}	constante de modelación de la ecuación de ε_{c_a}
τ	escala de tiempo dinámico
τ_θ	escala de tiempo térmico
Ω	velocidad de rotación terrestre

SUBINDICES

0	estado de referencia
1,2,3	dirección espacial
i, j, k, l, m	índices espaciales
N	estado natural de la atmósfera
T	turbulencia
α	especie contaminante
ϕ	referencia a la salida de la chimenea
φ	relacionado a un escalar
c	eje de simetría

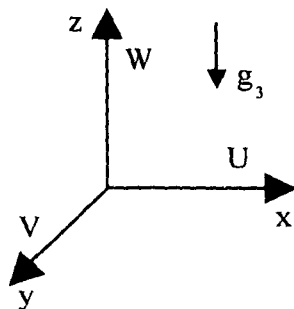
SUPERINDICES

n	etapa de tiempo
-----	-----------------

CONVENCIONES

$\frac{\partial}{\partial t}$	operador diferencial
$\nabla = \frac{\partial}{\partial x_j}$	operador nabla
$O(\)$	orden de magnitud
$\bar{\bar{c}}$	variable física instantánea
\bar{c}	variable física media
$\bar{c}_{i,j}^n$	variable en el punto i,j al tiempo n

Ejes:



CAPITULO 1

INTRODUCCION

1.1. DESCRIPCION DEL PROBLEMA

La contaminación del Medio, producto del desarrollo tecnológico, es uno de los principales problemas que afectan hoy en día a la humanidad. En cuanto a la polución del aire se destaca la contaminación producida por el tránsito vehicular y las emisiones de chimeneas industriales y de Centrales Termoeléctricas (CT's). Hoy en día se ha puesto de manifiesto un interés particular en controlar las emisiones de dichas fuentes con el objetivo de reducir su impacto al Medio ambiente, ya que algunos ecosistemas están siendo afectados seriamente. En lo que a este trabajo se refiere se considera el estudio de la contaminación producida por fuentes de tipo puntual (chimeneas) hacia la atmósfera, por medio de un modelo fisico-matemático que representa la dinámica de la atmósfera y consecuentemente la disipación de los contaminantes en ella.

La mayoría de los fenómenos de polución del aire ocurren en las partes bajas de la atmósfera denominada capa límite atmosférica PBL (planetary boundary layer), la cual se define como la región de la atmósfera que está directamente influenciada por la presencia de la superficie terrestre, y responde a fuerzas superficiales con una escala de tiempo de alrededor de una hora o menos; las fuerzas incluyen fuerzas de fricción, evaporación y transpiración, transferencia de calor,

emisiones contaminantes y modificaciones del flujo inducido por el terreno. A su vez la capa limite atmosférica (PBL) se divide verticalmente en 3 subcapas principales (Zannetti, 1990), a saber:

- La capa más cercana al terreno es la llamada subcapa laminar o de rugosidad, cuya altura es por lo general menor a 1m. En esta capa la turbulencia es intermitente y no está completamente desarrollada. En esta capa la viscosidad molecular es importante.
- La capa superficial SL (surface layer) cuya altura es de 100 a 200m. En esta capa, los flujos de momentum y calor se consideran independientes de la altura y las fuerzas debidas a la rotación terrestre son por lo general despreciables.
- La capa de transición TL (transition layer) que se encuentra aproximadamente entre 100 m y 2 Km de altura. El resto del aire en la tropósfera es llamado la atmósfera libre.

La variación con respecto del tiempo de las propiedades meteorológicas de cada capa afectan la dispersión de contaminantes. En las capas superficial y de transición los fenómenos de turbulencia prevalecen a los fenómenos moleculares. En la subcapa laminar y en la atmósfera libre la turbulencia no está completamente desarrollada y por lo tanto el movimiento molecular tiene un papel importante en la transferencia de masa y energía. La turbulencia tiene una gran capacidad de mezclado y su velocidad de difusión es de varios ordenes de magnitud mayor que la del movimiento molecular.

El problema fundamental a resolver por los modelos de contaminación del aire es el de predecir la concentración de una o más especies en el aire y su evolución en el espacio y en el tiempo. El estudio riguroso de este fenómeno implica el conocimiento de una gran cantidad de factores, de entre las cuales se destacan:

- La meteorología local.
- Condiciones y tipo de las emisiones.
- La microfísica y la química de la emisión.
- La química atmosférica.
- La capa limite atmosférica.
- La estructura turbulenta del flujo.
- La topografía local
- etc.

Estos factores, fáciles de mencionar, involucran ya el conocimiento y la aplicación de disciplinas como la Meteorología, la Química, la Mecánica de Fluidos, la Termodinámica, la Topografía, y otras. Así, un modelo "completo" debería ser:

- a) Físicamente realista y exacto.
- b) Universalmente exacto para diferentes:
 - Escalas temporales y espaciales.
 - Condiciones meteorológicas y topográficas.
 - Fuentes de emisión (puntuales, grandes áreas o líneas).
 - Especies de contaminantes.
- c) Soportado por datos disponibles.
- d) Fácil de usar y entender.
- e) Fácil de adaptar para ser corrido en cualquier computadora.
- f) Computacionalmente rápido.
- g) Evaluado contra observaciones experimentales.
- h) Completa validez con datos reales (para los diferentes casos).

Desafortunadamente, tal modelo "completo" no existe porque algunas de sus características inherentes son mutuamente excluyentes. Esto es porque cada modelo esta comprometido entre simplicidad y sofisticación; exactitud y factibilidad. Evidentemente este fenómeno es sumamente complejo de estudiar; la mayoría de los estudios de impacto ambiental se limitan a una modelación simple con los modelos gaussianos estándares, los cuales permiten obtener soluciones rápidas y a bajo costo; aunque los resultados que se obtienen con estos modelos pueden ser sólo de carácter indicativo.

1.2. IMPORTANCIA DE LOS MODELOS

Varios países han establecido leyes y regulaciones que pretenden controlar las emisiones contaminantes a la atmósfera, así como también se han implementado estándares de la calidad del aire y/o de las emisiones. En este sentido los programas de simulación de dispersión de contaminantes son una herramienta importante para poder planear las medidas que se tomarán para evitar daños importantes al Medio y por lo tanto a la especie humana

Los modelos de la calidad del aire son una herramienta esencial para muchos estudios de contaminación del aire. Los modelos de simulación de dispersión de contaminantes pueden ser utilizados como una herramienta para.

- Establecer legislaciones de control de emisiones contaminantes a la atmósfera, por ejemplo, determinar las emisiones máximas permitidas con las que se logra una calidad del aire estándar.

- Evaluación de propuestas de técnicas y estrategias de control de emisiones contaminantes, por ejemplo, evaluar el impacto de futuros controles.
- Seleccionar localizaciones de futuras fuentes contaminantes para minimizar su impacto en el Medio.
- Responsabilizar a los causantes de que se presenten altos niveles de contaminación del aire en una zona, por ejemplo, evaluar fuentes presentes y dar su relación con los niveles de contaminación registrados.
- Planear el control de contaminación del aire en accidentes, por ejemplo, definir estrategias de intervención inmediata para evitar altos niveles de concentración en una región o evacuar zonas donde se puedan presentar niveles peligrosos de contaminación.
- Demostrar que los estándares de calidad del aire para monóxido de carbono, hidrocarburos no quemados, bióxido de nitrógeno y oxidantes fotoquímicos no serán excedidos como resultado de nuevas fuentes.

Los modelos proveen de una importante herramienta para tomar decisiones concernientes a la protección ambiental, pero estos no resuelven el problema de la contaminación atmosférica.

1.3. LOS MODELOS EXISTENTES

Existen varios tipos de modelos que permiten el estudio de la dispersión de contaminantes; entre las clasificaciones más importantes de estos modelos se encuentran:

- Estructura básica del modelo: Determinístico o no-determinístico
- Tiempo de resolución: A estado estable o dependiente del tiempo
- Marco o referencia: Euleriano o Lagrangiano
- Dimensionalidad del dominio computacional: unidimensional, bidimensional, tridimensional o multinivel
- Métodos de solución del modelo: Analíticos o numéricos (varios métodos)

Con respecto a las características del sistema estudiado:

- Tamaño del dominio de estudio: local, regional, nacional, global
- Tiempo simulado: hora, día, mes, año, década
- Contaminantes de interés: SO_2 , óxidos de nitrógeno, hidrocarburos, partículas de materia, oxidantes fotoquímicos, contaminantes secundarios

La tabla 1.1 presenta un resumen de las escalas de aplicación, capacidades, datos requeridos y costos de entrada y costos de algunos modelos de contaminación del aire determinísticos.

MODELO	ESCALA DE APLICACION	CAPACIDAD	DATOS REQUERIDOS	COSTO DE COMPUTO
Pluma Gaussiana	Local, fuentes puntuales	Limitado	Disponibles fácilmente	Bajo
De Caja	Urbano	Muy limitado	Disponibles fácilmente	Bajo
Euleriano	Todas las escalas	Completo	Posiblemente difícil	Puede ser considerable
De trayectoria Lagrangiana	Urbano, regional, distancias largas	Limitado	Disponibles	Relativamente bajo
De trayectoria de partículas aleatorias	Todas las escalas	Completo	Difícil de obtener	Alto

Tabla 1.1 Características de algunos modelos determinísticos de polución del aire

Desde 1955 se han propuesto modelos para determinar la difusión de contaminantes a partir de una fuente puntual, una línea fuente o de una superficie fuente. De los métodos más utilizados, inclusive hoy en día son los modelos gaussianos que se apoyan en la metodología de Briggs (1970) llamada *two-step plume-path diffusion method*, y que consiste en un primer tiempo, en calcular la altura efectiva que es igual a la altura de la chimenea más una altura debida a los efectos de gravedad y a la cantidad de movimiento inicial del fluido. En un segundo tiempo, se considera una fuente puntual en la altura efectiva y se resuelve la ecuación de difusión simplificada, suponiendo que las velocidades laterales y verticales son nulas y despreciando el transporte del contaminante por las fluctuaciones de la velocidad, con respecto del transporte convectivo por esta misma velocidad. Los modelos que se apoyan en las formulaciones de Briggs son innumerables y algunos de los cuales están debidamente validados y son ampliamente recomendados por la EPA (Environment Protection Agency) en los Estados Unidos. Una de las principales ventajas que ofrecen estos modelos es su adaptabilidad ya que pueden instalarse en computadoras personales con un mínimo de datos. En la práctica generalmente se buscan soluciones "urgentes y económicas" razón por la cual se recurre con frecuencia a estos modelos. Sin embargo, y a pesar del desarrollo de estos modelos, los resultados son por lo general de carácter indicativo.

Otra metodología fue propuesta por Ching y Shir (1970), la cual consiste en estudiar el problema bidimensional de la difusión a partir de una fuente lineal de contaminación (calor y cantidad de movimiento), en una atmósfera local. Shir introduce coeficientes de viscosidad y de

difusividad turbulentos constantes y uniformes. El sistema de ecuaciones de conservación (no lineales) está asociado con una variable que evoluciona con el tiempo; las dos ecuaciones de la dinámica son transformadas en una ecuación de evolución de la vorticidad y una ecuación de Poisson para la función de corriente. En este método, las condiciones meteorológicas intervienen como variables dependientes en el cálculo. Este es uno de los trabajos pioneros en lo que a la modelación estadística de los procesos de dispersión atmosférica se refiere.

Se han desarrollado métodos más recientes quasi-tridimensionales y que dan el régimen permanente del problema a valores iniciales. Suponen que existe una dirección privilegiada del flujo, según lo cual las ecuaciones son de tipo parabólico, mientras que en las otras dos direcciones, las ecuaciones son de tipo elíptico. Estas formulaciones representan la turbulencia con términos de difusión con la introducción de coeficientes de difusión turbulenta. Taft (1974) desarrolló un modelo suponiendo que el viento en la dirección horizontal no es modificado por la torre y el jet. Los coeficientes de difusividad turbulenta son modelados conforme el esquema de Gawain y Pritchett (1969). Para comparar sus resultados a la medidas del sitio Taft estudio la evolución del jet hasta 1700 m a partir del punto de emisión.

Benqué (Benqué *et al.*, 1976) utilizó un método de pasos fraccionarios sobre las variables primitivas que resuelve el sistema de ecuaciones por planos sucesivos en una dirección. Si el número de Froude es igual a 1, supone que la velocidad longitudinal no es modificada y, mientras que el jet sea más influenciado por fuerzas de flotación, esta velocidad es dividida por un coeficiente comprendido entre 1 y 1.5. Los coeficientes de difusividad, varían con la altitud según la estabilidad de la atmósfera natural y son constantes en el tiempo; los coeficientes son deducidos de experimentos en túneles de viento.

Los estudios mencionados anteriormente, permiten estudiar la difusión del contaminante a distancias importantes a partir del punto de emisión. El éxito de estos modelos es que permiten predecir la contaminación en un tiempo corto de CPU; mejor aún, ellos se pueden adaptar fácilmente a computadoras pequeñas o personales (PC's). Sin embargo, estos modelos presentan serios inconvenientes. Por ejemplo: necesitan una hipótesis sobre la intensidad del viento en la dirección longitudinal, no permiten la rotación del viento con la altitud, los efectos de la turbulencia atmosférica son aproximados o completamente ignorados, al igual que los efectos producidos por obstáculos (estelas, remolinos, zonas de alta disipación, etc.). Los mecanismos de química atmosférica son por lo general ignorados. Otro inconveniente que presentan es que no son aplicables a zonas donde la topografía local es compleja ni a zonas costeras donde la humedad relativa es importante y, no consideran la estratificación de la atmósfera

La eficiencia de los modelos de turbulencia de orden superior y sus aplicaciones se han ido perfeccionando de acuerdo con la evolución de las computadoras. En la década de los 70's una amplia gamma de modelos estadísticos de orden superior apareció en la literatura, citemos por ejemplo Bradshaw *et al* (1967), Donnalson and Rosembraun (1968, 1970), Nee and Kovaznay (1961), Daly and Harlow (1970) y Rodi and Spalding (1970).

A partir de esta década, los modelos han sido impulsados por los trabajos de Launder, Rodi, Patankar y Spalding.

Evidentemente esta generación de modelos abarca los estudios sobre flujos atmosféricos que permiten la inclusión de la capa límite atmosférica, el flujo cortante, y en general los mecanismos de turbulencia atmosférica; estos modelos pueden tomar en cuenta la estabilidad atmosférica y han sido desarrollados por Donalson, Busch, Panofsky, Deardorff, etc. los modelos incluyen la dispersión de contaminantes en la atmósfera, activos y pasivos, y para flujos en dos y tres dimensiones y bajo condiciones de estabilidad aleatorias.

1.4. OBJETIVO DEL TRABAJO

El objetivo principal de este trabajo es el de contribuir con la modelación matemática de la dispersión de contaminantes en la atmósfera mediante la elaboración de un modelo fisico-matemático del cual se derivan ecuaciones estadísticas que permiten representar en forma rigurosa la dinámica atmosférica. Las ecuaciones fueron introducidas en el programa de computadora llamado **QUETZAL/II** que se desarrolla en el **IIE** y que se encuentra actualmente en etapa de optimización y aplicación.

1.5. ORGANIZACION DEL TRABAJO

El modelo que en este trabajo se desarrolla, incluye aspectos de los cuales carecen otros modelos, principalmente, toma en cuenta los efectos de la turbulencia atmosférica y plantea los elementos para la consideración de la química atmosférica. Como todos los modelos de turbulencia de orden superior el modelo consume tiempo de cálculo y una carga de memoria considerable. Debido a esto, el único inconveniente que presentan estos modelos es quizá la dimensión del dominio de estudio.

Este trabajo esta organizado en tres etapas: El aspecto teórico (Caps. 1-3), el aspecto numérico (Cap. 4) y las aplicaciones (Caps. 5 y 6) que tienen como objetivo validar tanto el modelo fisico-matemático como el esquema numérico.

En el presente capitulo 1 se enmarca el problema de la contaminación atmosférica, y la ayuda que los modelos de dispersión de contaminantes pueden dar. Así como también, se realiza una revisión de los tipos de modelos existentes en la actualidad.

En le capitulo 2 se introducen las ecuaciones fundamentales de la mecánica de fluidos, a saber: la cantidad de movimiento, de la entalpia, la ecuación de conservación de especies, una ecuación de estado para los gases perfectos y la ecuación de continuidad. Si bien se parte de estas ecuaciones en su forma básica, se consideran también algunas hipótesis simplificadoras: por ejemplo, en cuanto a la microfísica y química de la emisión y la compresibilidad del flujo. Además se toma en cuenta que la atmósfera es de naturaleza turbulenta. Obteniéndose al final del capitulo, el modelo fisico-matemático utilizado en este estudio.

En el capítulo 3 se describen los modelos de turbulencia de orden cero (modelo de viscosidad turbulenta y de difusión turbulenta) y los modelos de primer orden (modelo κ - ϵ , modelo $\overline{\theta^2} - \epsilon_\theta$ y $\overline{c_a^2} - \epsilon_c$). En los primeros modelos se introducen los conceptos de viscosidad y difusividad turbulenta y en los segundos, se desarrollan dos ecuaciones, una de evolución y otra de disipación, para la energía cinética de la turbulencia, la varianza de temperatura y la varianza de concentración.

En el capitulo 4 se describe el método numérico de solución del modelo fisico matemático desde la discretización de las ecuaciones básicas hasta el método de compresibilidad artificial y su convergencia. Se describe además el algoritmo del programa **QUETZAL/II** y la combinación de los parámetros de control que regulan la solución de los diferentes modelos.

En el capitulo 5 se describen los diferentes tipos de flujos emitidos verticalmente; así como el estudio paramétrico de un flujo atmosférico vertical, y las diferentes zonas que lo conforman y parámetros que permiten representarlo.

En el capitulo 6 se presenta el estudio de un caso simple (jet plano turbulento), con el objeto de validar el modelo. En este capitulo se aplica el programa de cómputo **QUETZAL/II**, y se presentan los resultados obtenidos de la simulación comparándose con resultados experimentales de diferentes autores

Al final se presentan las conclusiones obtenidas en este trabajo y las perspectivas de la continuación del estudio que como un programa de trabajo se realizará en el IIE.

CAPITULO 2

EL MODELO FISICO-MATEMATICO

2.1. INTRODUCCION

Las leyes de la dinámica de fluidos están bien establecidas y pueden ser formuladas de varias maneras. El caso más habitual es el de suponer que el comportamiento de un sistema físico está completamente determinado por las leyes de conservación.

El concepto de conservación significa que la variación de una *cantidad* (intensiva) de flujo conservada dentro de un volumen dado es debido al efecto total de alguna fuente interna y el flujo de *cantidad* que atraviesa la frontera. Los flujos y las fuentes son en general, dependientes tanto de las coordenadas espacio-tiempo como del movimiento del fluido; los flujos asociados son vectores para una cantidad escalar y tensores para una cantidad vectorial. El flujo de una cantidad es generado de dos contribuciones: una debido al transporte convectivo del fluido, el cual puede incluir o generar el movimiento turbulento, y la otra debida al movimiento molecular, el cual está siempre presente, aun cuando el fluido está en reposo, y expresa la tendencia de un fluido a llegar al equilibrio y la uniformidad.

El estado de un fluido se considera conocido si, en cualquier instante de tiempo, los campos de velocidad y un número mínimo de propiedades estáticas (presión, densidad) son conocidos en cualquier punto

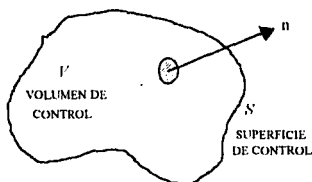
Existen tres leyes físicas fundamentales que, a excepción de los fenómenos relativistas y nucleares, se aplican a todos y cada uno de los flujos, independientemente de la naturaleza del fluido que se esté considerando: ley de la conservación de la masa (ecuación de continuidad y ecuación de conservación de especies cuando se aplica en un medio no homogéneo), segunda ley de Newton (ecuación de momentum) y primera ley de la termodinámica (ecuación de energía).

2.2. ECUACIONES BASICAS DE LA DINAMICA DE FLUIDOS

2.2.1. La ecuación de continuidad

La ley de la conservación de la masa establece que la masa no puede ser creada ni destruida, sólo transformada. Aplicando la ley de conservación de la masa a un volumen de control fijo de tamaño infinitesimal (fig. 2.1) se tiene la siguiente ecuación de continuidad:

$$\oint_S \bar{\rho} \bar{U} \cdot dS + \frac{\partial}{\partial t} \int_V \bar{\rho} dV = 0 \quad (2.1)$$



donde $\bar{\rho}$ es la densidad del fluido, \bar{U} es la velocidad de flujo, t es el tiempo, S es la superficie de control y V es el volumen de control.

La forma integral (2.1) es considerada como la formulación básica de la ley de conservación y de hecho la expresión válida más general, debido a que sigue siendo válida en la presencia de variaciones discontinuas de las propiedades del fluido. La ley de conservación de la masa es de naturaleza cinemática, esto es, independiente de la naturaleza del fluido o de las fuerzas que actúan sobre este. No existe flujo difusivo para el transporte de masa, lo cual significa que solamente puede ser transportada por convección.

Considerado la continuidad de las propiedades del fluido, aplicando el teorema de la divergencia de Gauss y asumiendo la forma diferencial equivalente, la ecuación de continuidad puede escribirse como:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} = -(\nabla \cdot \bar{\rho} \bar{U}) \quad (2.2)$$

El vector de velocidad másica $\bar{\rho} \bar{U}$ es el flujo de materia y su divergencia representa la velocidad total con que disminuye el flujo de materia por unidad de volumen. La ecuación anterior expresa que la velocidad con que aumenta la densidad en el interior de un elemento pequeño de volumen fijo en el espacio, es igual a la velocidad neta de entrada de densidad de flujo de materia en el elemento dividida por su volumen.

2.2.2. Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento

La transferencia de Momentum en un fluido incluye el estudio del movimiento de los fluidos así como las fuerzas que producen dicho movimiento. A partir de la segunda ley de Newton del movimiento se sabe que la fuerza se relaciona directamente con la rapidez de cambio del momento de un sistema.

La segunda ley de Newton se puede enunciar de la siguiente manera: "La rapidez de cambio de Momentum de un sistema es igual a la fuerza neta que actúa sobre el sistema y ocurre en la dirección de la fuerza neta". El enunciado se divide en dos partes; la primera, es que esta ley pertenece a un sistema específico y segunda, que consta de dirección y magnitud de manera que es una expresión vectorial. Aplicando la segunda ley de Newton a un fluido y considerando un enfoque de volumen de control, se tiene la expresión para la conservación del Momentum:

$$\sum F = \oint_S \bar{\rho} \bar{U} \bar{U} \cdot dS + \frac{\partial}{\partial t} \int_V \bar{\rho} \bar{U} dV \quad (2.3)$$

SUMA DE
FUERZAS
EXTERNAS

FLUJO
NETO DE
MOMENTUM

RAPIDEZ DE
CAMBIO DE
MOMENTUM

a esta relación se le conoce en mecánica de fluidos como el teorema del Momentum.

La suma de fuerzas externas son las que se deben al esfuerzo normal (en los que se incluyen las fuerzas de presión y una contribución viscosa) y al esfuerzo cortante (fuerzas tangenciales), y las fuerzas tales como la gravedad que se ejercen sobre un cuerpo

Considerado la continuidad de las propiedades del fluido, aplicando el teorema de la divergencia de Gauss y sustituyendo la suma de fuerzas por los esfuerzos correspondientes, se obtiene la ecuación de momentum en su forma diferencial equivalente.

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \bar{U} = -[\nabla \cdot \bar{\rho} \bar{U} \bar{U}] - \nabla \bar{P} - [\nabla \cdot \Gamma] + \bar{\rho} g - 2\Omega \bar{\rho} \bar{U} \quad (2.4)$$

VELOCIDAD DE CAMBIO DE MOMENTUM	INCREMENTO DE MOMENTUM POR CONVECCIÓN	FUERZAS DE PRESIÓN	INCREMENTO DE MOMENTUM POR TRANSPORTE (VISCOSO)	FUERZA DE GRAVEDAD	FUERZA DE CORIOLIS
---------------------------------	---------------------------------------	--------------------	---	--------------------	--------------------

La cantidad de movimiento que entra y sale del elemento de volumen es función de dos mecanismos: por convección, es decir, debido al flujo global del fluido, y por transporte molecular, o sea, a causa de los gradientes de velocidad.

2.2.3. Ley de Newton-Stokes

La ecuación de momentum (2.4) puede representar el movimiento de todos los fluidos; el nivel de aplicación o la generalidad se limita al introducir expresiones aproximadas para el tensor de esfuerzos Γ .

Para todos los gases que pueden ser tratados como un medio continuo, y para la mayoría de los líquidos, se ha observado que el esfuerzo en un punto es linealmente dependiente de la velocidad de deformación del fluido (Bird *et al.*, 1987). Un fluido que se comporta de esta manera es llamado *fluido newtoniano*. La ley de Newton establece que el esfuerzo cortante es proporcional al gradiente negativo de la velocidad local, es decir, que va de una región de mayor a una de menor velocidad, y se expresa:

$$\Gamma_{ij} = -\bar{\mu} \nabla \bar{U} \quad (2.5)$$

La constante de proporcionalidad $\bar{\mu}$ en la ecuación anterior se denomina *viscosidad dinámica* y es la propiedad que presenta un fluido de resistir la rapidez con la que tiene lugar la deformación cuando las fuerzas cortantes actúan sobre el fluido. En el tensor de esfuerzos cortantes el subíndice i representa la dirección del eje normal al plano de acción del esfuerzo cortante, mientras el subíndice j representa la dirección de acción del esfuerzo cortante.

La relación de Newton para la viscosidad es válida solamente para flujos laminares paralelos. Stokes extendió el concepto de viscosidad a los flujos newtonianos tridimensionales y obtuvo la siguiente ecuación del tensor de esfuerzos:

$$\Gamma_{ij} = -\bar{\mu} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \bar{\mu}^* \frac{\partial \bar{U}_m}{\partial x_m} \quad (2.6)$$

En esta ecuación δ_{ij} es la delta de Kronecker, y $\bar{\mu}^*$ es llamado el segundo coeficiente de viscosidad

2.2.4. Ecuación de la conservación de la energía

La primera ley de la termodinámica aplicada a un fluido que pasa a través de un elemento estacionario de volumen conduce a la ecuación de energía:

$$\frac{\partial \bar{\rho} E}{\partial t} = -(\nabla \cdot \bar{\rho} \bar{U} E) - (\nabla \cdot Q) + \bar{\rho}(\bar{U} \cdot g) - (\nabla \cdot \bar{P} \bar{U}) - (\nabla \cdot [\bar{\Gamma} \cdot \bar{U}]) \pm G \quad (2.7)$$

VELOCIDAD DE GANANCIA DE ENERGÍA	ENTRADA DE ENERGÍA POR CONVECCIÓN	ENTRADA DE ENERGÍA POR CONDUCCIÓN	TRABAJO PRODUCIDO POR FUERZAS DE GRAVEDAD	TRABAJO PRODUCIDO POR FUERZAS DE PRESIÓN	TRABAJO PRODUCIDO POR FUERZAS VISCOSAS	FUENTE DE ENERGÍA
----------------------------------	-----------------------------------	-----------------------------------	---	--	--	-------------------

donde E representa la energía total definida por:

$$E = e + \frac{\bar{U}^2}{2} + \text{energía potencial} + \dots \quad (2.8)$$

y e es la energía interna que corresponde a la energía relacionada con los movimientos fortuitos de translación e internos de las moléculas, y $\frac{1}{2}\bar{U}^2$ es la energía cinética que corresponde a la energía relacionada con el movimiento observable del fluido. La energía potencial es incluida en la ecuación de energía (2.7) en forma implícita.

Considerando que no existe ninguna fuente de energía (G), despreciando las fuerzas de Coriolis¹ y considerando que la energía total es la suma de la energía interna y la energía cinética, se puede escribir entonces la siguiente ecuación para la energía cinética:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \bar{\rho} \bar{U}^2 \right) = - \left(\nabla \cdot \frac{1}{2} \bar{\rho} \bar{U}^2 \bar{U} \right) - (\nabla \cdot \bar{P} \bar{U}) - \bar{P}(-\nabla \cdot \bar{U}) - (\nabla \cdot [\bar{\Gamma} \cdot \bar{U}]) - (\bar{\Gamma} \cdot \nabla \bar{U}) + \bar{\rho}(\bar{U} \cdot g) \quad (2.9)$$

INCREMENTO DE ENERGÍA CINÉTICA	ENTRADA DE ENERGÍA DEBIDO AL FLUJO GLOBAL	TRABAJO PRODUCIDO POR FUERZAS DE PRESIÓN	CONVERSIÓN REVERSIBLE EN ENERGÍA INTERNA	TRABAJO PRODUCIDO POR FUERZAS VISCOSAS	CONVERSIÓN IRREVERSIBLE EN ENERGÍA INTERNA	TRABAJO PRODUCIDO POR FUERZAS DE GRAVEDAD
--------------------------------	---	--	--	--	--	---

o bien la siguiente ecuación para la energía interna o energía calorífica:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} e) = - (\nabla \cdot \bar{\rho} e \bar{U}) - (\nabla \cdot Q) - \bar{P}(\nabla \cdot \bar{U}) - (\bar{\Gamma} \cdot \nabla \bar{U}) \quad (2.10)$$

INCREMENTO DE ENERGÍA INTERNA	ENTRADA DE ENERGÍA DEBIDO AL FLUJO GLOBAL	ENTRADA DE ENERGÍA POR CONDUCCIÓN	AUMENTO REVERSIBLE DE ENERGÍA POR COMPRESIÓN	AUMENTO IRREVERSIBLE DE ENERGÍA POR DISIPACIÓN VISCOSA
-------------------------------	---	-----------------------------------	--	--

Ahora, utilizando la definición de entalpía:

$$\bar{h} = e + \frac{\bar{P}}{\bar{\rho}} \quad (2.11)$$

se puede obtener una ecuación de entalpía a partir de la ecuación de energía interna, la cual es:

¹ Las fuerzas de Coriolis son aquellas relacionadas con el movimiento de rotación terrestre.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}\tilde{h}) + (\nabla \cdot \tilde{\rho}\tilde{U}\tilde{h}) = \frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + U(\nabla \cdot \tilde{P}) - (\nabla \cdot Q) - (\Gamma \cdot \nabla \tilde{I}) \quad (2.12)$$

Esta forma de la ecuación de energía es ampliamente utilizada ya que a partir de esta ecuación se puede obtener una ecuación para calcular perfiles de temperatura.

2.2.5. Ley de Fourier

La ley de Fourier de la conducción del calor establece que el flujo de calor por conducción es proporcional al gradiente negativo de la temperatura, por lo tanto, el flujo de calor por conducción es de una zona de mayor a una zona de menor temperatura. La ley de Fourier para un flujo tridimensional es:

$$Q = -\tilde{k}\nabla\tilde{T} \quad (2.13)$$

donde \tilde{k} es el coeficiente de conductividad térmica, el cual se supone independiente de la dirección, cuando se aplica en un medio isotrópico. Este coeficiente es una propiedad de los medios conductores de calor y, al igual que la viscosidad dinámica, está en función de la temperatura y varía de manera significativa con la presión en el caso de gases a presiones altas (Bird, 1987).

2.2.6. Ecuación de la conservación de especies

Las ecuaciones anteriores de continuidad, momentum y energía son suficientes cuando se consideran flujos homogéneos; sin embargo cuando se estudian flujos que transportan varias sustancias debe considerarse la ecuación de conservación de especies. Esta ecuación aplicada a un elemento diferencial de volumen, expresada en términos de concentración másica $\tilde{\rho}\tilde{C}_\alpha$ es:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}\tilde{C}_\alpha}{\partial t} = -(\nabla \cdot \tilde{\rho}\tilde{C}_\alpha\tilde{U}) - (\nabla \cdot D_\alpha) + R_\alpha \quad (2.14)$$

INCREMENTO EN LA CONCENTRACIÓN DE LA ESPECIE α	ENTRADA DE α POR CONVECCIÓN	ENTRADA DE α POR DIFUSIÓN MOLECULAR	GENERACIÓN O DESFAPARICIÓN DE α POR REACCIÓN QUÍMICA
---	--	---	--

En esta ecuación $\tilde{\rho}$ representa la densidad de la mezcla dada por:

$$\tilde{\rho} = \sum \tilde{\rho}_\alpha \quad (2.15)$$

y \tilde{C}_α es la fracción másica definida por:

$$\tilde{C}_\alpha = \frac{\tilde{\rho}_\alpha}{\tilde{\rho}} \quad (2.16)$$

La ecuación (2.14) describe los perfiles de concentración del componente α en una mezcla y representa una ecuación de continuidad para la especie α . Existe una ecuación de especies para cada una de las especies químicas presentes en el fluido. Sumando las n ecuaciones de este tipo se obtiene la ecuación de continuidad para la mezcla que es de la misma forma que la ecuación de continuidad para un fluido homogéneo, ecuación (2.2). En un problema determinado puede reemplazarse cualquiera de las n ecuaciones de especies por la ecuación de continuidad para la mezcla. En la ecuación (2.14) no se toman en cuenta la difusión térmica, de presión y forzada, ya que sus efectos son muy pequeños en comparación con los de la difusión pura debida a gradientes de concentración (Welty *et al*, 1982).

2.2.7. Ley de Fick

Cuando un sistema contiene dos o más componentes cuyas concentraciones varían de un punto a otro, presenta una tendencia natural a transferir la masa, haciendo mínimas las diferencias de concentración dentro del sistema, este transporte molecular de materia es llamado difusión ordinaria o difusión molecular. La ley de Fick de la difusión establece que la especie α se difunde de una zona de mayor concentración a una zona de menor concentración, y puede expresarse en la forma:

$$D_\alpha = -\tilde{\rho}\tilde{D}\nabla\tilde{C}_\alpha \quad (2.17)$$

En la bibliografía se utilizan distintas formas, matemáticamente equivalentes, de la ley de Fick. La ecuación (2.17) se da en términos de la concentración másica $\tilde{\rho}\tilde{C}_\alpha$, donde \tilde{C}_α representa la fracción másica, $\tilde{\rho}$ representa la densidad total definida por la suma de las densidades parciales de todos los componentes, *ec.* (2.15), y \tilde{D} es un coeficiente denominado coeficiente de difusión molecular.

2.2.8. Ecuación de estado

Para poder cerrar un sistema de ecuaciones de dinámica de fluidos es necesario establecer relaciones entre las variables termodinámicas ($\tilde{P}, \tilde{\rho}, \tilde{T}, \tilde{e}, \tilde{h}$), así como relacionar las propiedades de transporte (μ, k) con las variables termodinámicas. Las relaciones de este tipo son conocidas como ecuaciones de estado. De acuerdo al principio de estado de la termodinámica, el estado termodinámico local es fijado por dos variables independientes termodinámicas cualesquiera,

siempre que la composición química del fluido no este cambiando debido a difusión o a reacciones químicas de velocidad finita.

En este estudio utilizaremos la ecuación de estado clásica conocida como la ley de los gases ideales:

$$\bar{p} = \bar{\rho} \bar{R} \bar{T} \quad (2.18)$$

en la que \bar{R} es la constante del gas². Para un gas perfecto existen también las siguientes relaciones:

$$e = C_v \bar{T} \quad \bar{h} = C_p \bar{T} \quad \gamma = \frac{C_p}{C_v} \quad C_v = \frac{\bar{R}}{\gamma - 1} \quad C_p = \frac{\gamma \bar{R}}{\gamma - 1} \quad (2.19)$$

donde C_v es el calor específico a volumen constante, C_p es el calor específico a presión constante y γ es la relación de calores específicos. Para el aire a condiciones estándar, $R = 287 \text{ m}^2/\text{s}^2 \text{ } ^\circ\text{K}$ y $\gamma = 1.4$.

2.2.9. Resumen de las ecuaciones instantáneas

En las secciones previas se han introducido las ecuaciones, y ciertos desarrollos, que permiten el estudio de fluidos newtonianos aunado a los conceptos de gases ideales. En esta sección se presenta un resumen de dichos conceptos

Las ecuaciones que se consideran gobiernan el movimiento de un gas perfecto, newtoniano se presentan en la tabla 2.1. Estas ecuaciones son escritas en notación diferencial ya que es más conveniente para el tipo de solución numérica que se considera, (Cap. 4). La ecuación de la ley de Newton, Fourier y de Fick han sido incluidas en las ecuaciones de momentum, energía y conservación de especies respectivamente, con el fin de manejar un menor número de ecuaciones.

²La constante del gas es la constante universal de los gases ideales entre el peso molecular del gas.

I. ECUACIONES INSTANTANEAS	
La ley de los gases perfectos:	
$\bar{P} = \bar{\rho} \bar{R} \bar{T}$	(I.a)
La ecuación de continuidad:	
$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{U}_j}{\partial x_j} = 0$	(I.b)
La ecuación de momentum:	
$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{U}_j}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{U}_j \bar{U}_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\mu} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \bar{\mu}^* \frac{\partial \bar{U}_m}{\partial x_m} \right] + \bar{\rho} g_i - 2\Omega \bar{\rho} \bar{U}$	(I.c)
La ecuación de la energía:	
$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{h}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{U}_j \bar{h}}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{k} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} \right) + \bar{\Gamma}_{ij} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j}$	(I.d)
La ecuación de conservación de especies:	
$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{C}_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{C}_\alpha \bar{U}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \bar{D} \frac{\partial \bar{C}_\alpha}{\partial x_j} \right) + R_\alpha$	(I.e)

Tabla 2.1 Ecuaciones básicas de la dinámica de fluidos

2.3. HIPOTESIS DE INICIO

El sistema de ecuaciones (I) es de interacciones sumamente complejas y para resolverlo se recurre generalmente al auxilio de ciertas hipótesis simplificadoras las cuales están en función del tipo de aplicación que se pretende dar. En este caso se considera un flujo que es descargado a la atmósfera a partir de una fuente puntual; las hipótesis consideradas son:

- Se considera un modelo para flujos tipo Boussinesq.
- Se considera una capa límite atmosférica.
- Se considera que el fluido es newtoniano.

- El fluido se considera incompresible.
- No se consideran reacciones químicas y los efectos fotoquímicos son despreciados.
- Se considera que el fluido se comporta como un gas ideal.
- Se considera el número de Rosby suficientemente grande, de tal forma que la aceleración complementaria de Coriolis sea despreciable:

$$Ro = \frac{\text{velocidad característica del fluido}}{\text{velocidad de rotación de la Tierra}} = \frac{W_\phi}{\Omega L} \quad (2.20)$$

Por ejemplo si $L = 500$ m, $W_\phi = 10$ m/s y $\Omega = 7.222 \times 10^{-5}$ rad/s; $Ro \approx 277$

Por lo tanto los efectos de la rotación terrestre no son tomados en cuenta.

- No se consideran topografías locales.
- No se considera la humedad relativa del aire.

2.4. SISTEMA DE BOUSSINESQ

Las hipótesis de Boussinesq consisten en suponer que la atmósfera está permanentemente en un estado de desviación con respecto a una atmósfera adiabática en reposo; las ecuaciones para el movimiento de un fluido dentro de la capa límite atmosférica son deducidas bajo este contexto. Las variables termodinámicas del sistema de ecuaciones son consideradas mediante el siguiente esquema:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{p} &= p_0 + p \\ \tilde{\rho} &= \rho_0 + \rho \\ \tilde{T} &= T_0 + T \\ \tilde{U}_j &= 0 + U_j \\ \tilde{C}_\alpha &= C_{\alpha 0} + C_\alpha \\ \tilde{\mu} &= \mu_0 + \mu \\ \tilde{\mu} &= \mu_0 + \mu \\ \tilde{k} &= k_0 + k \\ \tilde{\rho} \tilde{D} &= \rho_0 D_0 + \rho D_0 + \rho_0 D + \rho D \end{aligned} \right\} \quad (2.21)$$

es decir, las variables son descompuestas en el valor del estado de equilibrio atmosférico, denotado por el subíndice "0", y un valor de desviación.

- El estado termodinámico real de la atmósfera es reemplazado por un estado aerostático y adiabático. Lo cual implica que:
 - ♦ La variación de la densidad sea pequeña:

$$\left| \frac{\bar{\rho} - \rho_0}{\rho_0} \right| \ll 1 \quad (2.22)$$

donde ρ_0 es la densidad del estado de referencia.

- La variación de la temperatura sea despreciable:

$$\left| \frac{\bar{T} - T_0}{T_0} \right| \ll 1 \quad (2.23)$$

donde T_0 es la temperatura del estado de referencia

- La presión varía en forma despreciable:

$$\left| \frac{\bar{P} - P_0}{P_0} \right| \ll 1 \quad (2.24)$$

donde P_0 es la presión estática del estado de referencia

- El número de Mach (M) del flujo es pequeño:

$$M \approx \frac{|\bar{U}|}{U_s} \ll 1 \quad (2.25)$$

donde U_s es la velocidad del sonido en el aire (330 m/s)

- El calor generado por esfuerzos viscosos puede ser despreciado en la ecuación de energía termodinámica, ya que este término es del orden M^2 .
- Las escalas verticales del movimiento son pequeñas comparadas con la escala de la altura atmosférica, L_a ³:

$$L_a = \left| \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho_0}{\partial x_3} \right|^{-1} \quad (2.26)$$

es decir, que se asume convección superficial.

- Si se considera que la región de la atmósfera de interés es de pequeña extensión comparada con la escala atmosférica, entonces, las variaciones en los coeficientes de transporte molecular (μ_0 , $k_{(k)}$, D_0) pueden ser despreciadas y considerarse como constantes a través de todo el fluido.

En la aproximación Boussinesq, los flujos son tratados como incompresibles pero con una densidad que depende muchas veces de la temperatura; la variación de la densidad puede ser significativa cuando es multiplicada por la aceleración de la gravedad.

³El espesor de una atmósfera aerostática de densidad constante es de alrededor de 8 Km (Donalson, 1973).

En las siguientes secciones se introduce el sistema de ecuaciones definido como de Boussinesq.

2.4.1. Ecuación de estado.

El modelo de turbulencia y de transporte de materia se desarrolla en la capa superficial de la atmósfera. Si se considera que la materia a ser transportada no es en concentraciones muy elevadas, puede suponerse que no existen efectos directos sobre la constante del aire en la atmósfera en la que ocurre el transporte; ésta puede tomarse como constante y designarse como R_0 . Si además, se expande la ley de los gases ideales (1.a) de acuerdo al esquema (2.21), se obtiene una ecuación que representa la ecuación de estado de la atmósfera en reposo:

$$P_0 = R_0 \rho_0 T_0 \quad (2.27)$$

y otra ecuación que representa la ecuación de estado de la desviación con respecto a la atmósfera en reposo.

$$P = R_0 (\rho_0 T + \rho T_0 + \rho T) \quad (2.28)$$

Relacionando estas dos últimas ecuaciones se puede escribir:

$$\frac{P}{P_0} = \frac{T}{T_0} + \frac{\rho}{\rho_0} + \frac{\rho T}{\rho_0 T_0} \quad (2.29)$$

considerando las hipótesis de Boussinesq (2.22) y (2.23) la ecuación anterior toma la forma:

$$\frac{P}{P_0} = \frac{T}{T_0} + \frac{\rho}{\rho_0} \quad (2.30)$$

Además, los cambios en la presión P en un flujo incompresible son del orden de $\rho_0 U_j^2$, así que:

$$\frac{T}{T_0} + \frac{\rho}{\rho_0} = O\left(\frac{U_j^2}{R_0 T_0}\right) = O(\gamma M^2) \quad (2.31)$$

Por lo tanto, se pueden despreciar los efectos de los cambios de presión inducido por el movimiento sobre la variación de la densidad, lo cual está de acuerdo con la hipótesis (2.25), y de donde finalmente se obtiene:

$$\rho = -\frac{\rho_0}{T_0} T \quad (2.32)$$

la cual está relacionada con la eliminación del término de trabajo por presión en la ecuación de energía.

2.4.2. Ecuación de continuidad.

Aplicando la expansión (2.21) a la ecuación de continuidad (1.b) se obtiene:

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = 0 \quad (2.33)$$

de donde la ecuación de continuidad para el movimiento de desviación resulta:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_0 U_j + \rho U_j) = 0 \quad (2.34)$$

2.4.3. Ecuación de momentum.

Despreciando las fuerzas de Coriolis y sustituyendo la expansión (2.21) en la ecuación de momentum (1.c), puede deducirse la variación de la presión de un fluido en equilibrio aerostático:

$$\frac{\partial P_0}{\partial x_i} = -\rho_0 g_i \quad (2.35)$$

y la ecuación de momentum para el movimiento de desviación:

$$\begin{aligned} (\rho_0 + \rho) \frac{\partial U_i}{\partial t} + (\rho_0 + \rho) U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \left\{ U_j \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_0 U_j + \rho U_j) \right] \right\} = \\ - \frac{\partial P}{\partial x_i} - \rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu_0 + \mu) \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} (\mu_0^* + \mu^*) \frac{\partial U_m}{\partial x_m} \right] \end{aligned} \quad (2.36)$$

La ecuación (2.36) puede ser simplificada notando que en los dos primeros términos del lado izquierdo se pueden despreciar ρ en comparación con ρ_0 , de acuerdo con la hipótesis (2.22). De la misma manera se puede despreciar μ comparada con μ_0 y μ^* comparado con μ_0^* . Además, el término entre llaves $\{ \}$ del lado izquierdo es cero en virtud de la ecuación (2.34), con lo que la expresión anterior se reduce a

$$\rho_0 \frac{\partial U_i}{\partial t} + \rho_0 U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} - \rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_0 \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \mu_0 \frac{\partial U_m}{\partial x_m} \quad (2.37)$$

2.4.4. Ecuación de energía.

Considerando la capacidad calorífica constante C_{p_0} , sustituyendo la definición de entalpía ($d\bar{h} = C_{p_0} d\bar{T}$), y despreciando el último término de la ecuación de energía (I.d), de acuerdo a una hipótesis de Boussinesq; la ecuación de energía puede escribirse como:

$$C_{p_0} \left[\frac{\partial \bar{p}\bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{p}U_j \bar{T}}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + U_j \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{k} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} \right] \quad (2.38)$$

Esta ecuación referida al estado de referencia permite deducir la siguiente expresión:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(k_0 \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right) = (C_{p_0} - R_0) \rho_0 \frac{\partial T_0}{\partial t} \approx 0 \quad (2.39)$$

Considerando los conceptos dados por (2.21) la ecuación de energía para el movimiento de desviación se escribe como:

$$C_{p_0}(\rho_0 + \rho) \frac{\partial T}{\partial t} + C_{p_0}(\rho_0 + \rho) U_j \frac{\partial T}{\partial x_j} + \left\{ C_{p_0}(T_0 + T) \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_0 U_j + \rho U_j) \right] \right\} = \quad (2.40)$$

$$U_j \left[\frac{\partial P_0}{\partial x_j} - C_{p_0}(\rho_0 + \rho) \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial P}{\partial t} + U_j \frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(k_0 + k) \frac{\partial T}{\partial x_j} + k \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right]$$

En esta ecuación, como en la de momentum, se puede despreciar ρ comparado con ρ_0 en los primeros dos términos, y el término entre llaves $\{ \}$ es cero en virtud de la ecuación (2.34). Del lado derecho de la ecuación, el término en los primeros corchetes se puede despreciar debido a que la atmósfera básica es isentrópica (Donaldson, 1973), es decir:

$$\frac{\partial P_0}{\partial x_j} = C_{p_0} \rho_0 \frac{\partial T_0}{\partial x_j} = \frac{P_0}{T_0} \frac{C_{p_0}}{R_0} \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \quad (2.41)$$

y, por aproximación de la capa límite utilizada, el término en los segundos corchetes [] es pequeño comparado con el segundo término en el lado izquierdo de la ecuación. Los dos términos en el lado derecho que contiene P, llamados:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + U_j \frac{\partial P}{\partial x_j},$$

representan el calentamiento del fluido debido al movimiento y son de orden M^2 comparado con los otros términos en la ecuación y por lo tanto se pueden despreciar. Finalmente despreciando k comparado con k_0 en el último término del lado derecho, la ecuación de energía será:

$$C_p \rho_0 \frac{\partial T}{\partial t} + C_p \rho_0 U_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k_0 \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \quad (2.42)$$

2.4.5. Ecuación de conservación de especies

Si se considera que en la atmósfera de referencia no existen perturbaciones ni contaminación alguna, se puede deducir que:

$$\frac{\partial C_{a_0}}{\partial t} + \frac{\partial C_{a_0}}{\partial x_j} = 0 \quad (2.43)$$

Si además, se considera el transporte de un contaminante inerte, por lo que se elimina el término de reacción química en la ecuación (1.e), y se sustituye la expansión (2.21) en la ecuación de conservación de especies (1.e) y se utiliza el resultado anterior se tiene que:

$$\begin{aligned} \rho_0 \frac{\partial C'_a}{\partial t} + (\rho_0 + \rho) U_j \frac{\partial C'_a}{\partial x_j} + (C_{a_0} + C'_a) \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_0 U_j + \rho U_j) \right] = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho_0 D_0 \frac{\partial C'_a}{\partial x_j} + \rho D_0 \frac{\partial C'_a}{\partial x_j} + \rho_0 D \frac{\partial C'_a}{\partial x_j} + \rho D \frac{\partial C'_a}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (2.44)$$

Despreciando ρ en comparación de ρ_0 , y D en comparación de D_0 , y tomando el término entre corchetes igual a cero en virtud de la ecuación (2.34), la ecuación anterior puede ser escrita del mismo orden de exactitud que las otras ecuaciones, obteniéndose:

$$\rho_0 \frac{\partial C'_a}{\partial t} + \rho_0 U_j \frac{\partial C'_a}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho_0 D_0 \frac{\partial C'_a}{\partial x_j} \right) \quad (2.45)$$

2.4.6. Ecuación de la divergencia de la velocidad

Combinando las ecuaciones (2.34), (2.42) y (2.32) se puede encontrar una expresión para la divergencia del campo de la velocidad. Si la ecuación de la densidad (2.32) se sustituye en la ecuación de continuidad (2.34), se puede obtener:

$$-\rho_0 \frac{\partial T}{\partial t} - \rho_0 U_j \frac{\partial T}{\partial x_j} + (T_0 - T) \frac{\partial \rho_0 U_j}{\partial x_j} + \rho_0 U_j \frac{T}{T_0} \frac{\partial T_0}{\partial x_j} = 0 \quad (2.46)$$

Despreciando T comparado con T_0 en el tercer término, se puede llegar a la expresión⁴:

$$\rho_0 T_0 \frac{\partial U_j}{\partial x_j} + \rho_0 T_0 U_j \left(\frac{\partial \ln \rho_0}{\partial x_j} + \frac{T}{T_0} \frac{\partial \ln T_0}{\partial x_j} \right) = \rho_0 \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_0 U_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (2.47)$$

donde se puede despreciar el término $(T/T_0)(\partial \ln T_0 / \partial x_j)$ comparado con $\partial \ln \rho_0 / \partial x_j$. Si la ecuación resultante se compara con la ecuación de energía (2.42), se encuentra que:

$$\frac{\partial U_j}{\partial x_j} = -\frac{U_j}{\rho_0} \frac{\partial \rho_0}{\partial x_j} + \frac{R_0}{C_p \rho_0} \frac{1}{P_0} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k_0 \frac{\partial T}{\partial x_j} + k \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right) \quad (2.48)$$

Esta ecuación establece que debe haber una divergencia de velocidad en un punto donde un volumen de aire se mueve en la dirección vertical (la dirección del gradiente de ρ_0) así que el aire puede expandirse o contraerse al nivel de presión del equilibrio atmosférico. También se establece que cualquier elemento atmosférico que gana o pierde calor por conducción hacia el aire inmediatamente vecino, deberá expandirse o contraerse para mantener su presión a la de equilibrio atmosférico.

La ecuación de la divergencia de la velocidad se simplifica considerablemente si se considera que la región de la atmósfera de interés es de pequeña extensión comparada con la escala atmosférica (Donaldson, 1973). Si se analiza el orden de magnitud de la ec. (2.48), tomando la escala típica de la atmósfera L_a , definida en la ecuación (2.26), y una escala típica mucho menor del movimiento del fluido en cuestión como L_s , la ec. (2.48) puede entonces ser escrita como:

⁴Para la obtención de la ecuación se utiliza la regla de derivación del logaritmo natural: $\frac{d}{dx} \ln y = \frac{1}{y} \frac{dy}{dx}$

$$\frac{\partial U_j}{\partial x_j} = -\frac{U_j}{L_a} \left[1 - O \left(\frac{R_0 L_a}{C_{p_0} U_j P_0} \frac{1}{L_s} \frac{k_0 \Delta T + k T_0}{L_s} \right) \right] \quad (2.49)$$

que puede reescribirse en la forma:

$$\frac{\partial U_j}{\partial x_j} = -\frac{U_j}{L_a} \left\{ 1 - O \left[\frac{k_0}{\mu_0 C_{p_0} \rho_0 U_j L_s} \left(\frac{\Delta T L_a}{T_0 L_s} + \frac{k}{k_0} \right) \right] \right\} \quad (2.50)$$

En general, deberemos tener $L_a \Delta T / L_s T_0$ del orden 10 o menor⁵ y, ya que el número de Prandtl $\mu_0 C_{p_0} / k_0$ es del orden de la unidad y k/k_0 es pequeño, la ec. (2.50) resulta:

$$\frac{\partial U_j}{\partial x_j} = -\frac{U_j}{L_a} \left[1 - O \left(\frac{10}{Re} \right) \right] \quad (2.51)$$

Aquí el número de Reynolds Re está definido como $\rho_0 u_j L_s / \mu_0$. Puede notarse que, a menos que la escala en cuestión sea tan pequeña que el Reynolds sea del orden 10, la causa primaria de la divergencia del campo de velocidad será básicamente el gradiente de la densidad en una atmósfera sin disturbios, es decir, podemos escribir la ecuación (2.48) como:

$$\frac{\partial U_j}{\partial x_j} = -\frac{U_j}{\rho_0} \frac{\partial \rho_0}{\partial x_j} \quad (2.52)$$

Por otro lado, en la ecuación de movimiento la divergencia de la velocidad se encuentra en el término viscoso, es decir:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_0 \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \mu_0 \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_0 \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \frac{\mu_0^* U_k}{\rho_0} \frac{\partial \rho_0}{\partial x_k} \right] \quad (2.53)$$

El orden de la magnitud del término en los corchetes del miembro izquierdo es $\mu_0 U_j / L_s$ mientras que en el miembro derecho es del orden de $\mu_0 U_j / l_a$. De donde se puede deducir que el efecto de la divergencia de la velocidad en el término viscoso de la ecuación de momentum es sumamente pequeño y que puede despreciarse, de esta forma podemos escribir:

⁵ T_0/L_a es del orden $1^\circ\text{K}/100\text{m}$ y, en general, este estudio se enmarca a flujos atmosféricos con gradientes por encima del orden de $10^\circ\text{K}/100\text{m}$

$$\frac{\partial U_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.54)$$

Este resultado implica que para el tipo de flujos que se estudian la divergencia del campo de velocidad no contribuye de manera significativa en los diferentes mecanismos de las ecuaciones. El resultado dado por (2.54) permite simplificar aún más las ecuaciones descritas en esta sección, como se enuncia a continuación:

2.4.7. Ecuaciones del movimiento medio de desviación.

Combinando las ecuaciones (2.35) y (2.41) se tiene:

$$\frac{\partial T_0}{\partial x_i} = -\frac{g_i}{C_{p0}} \quad (2.55)$$

la cual da, si $g_i = g\delta_{i3}$:

$$\frac{\partial T_0}{\partial x_3} = -\frac{g}{C_{p0}} = \text{Cte.} \quad (2.56)$$

Considerando que la atmósfera de interés (atmósfera natural) es la atmósfera del estado de referencia, entonces, se puede cambiar el subíndice "0" por el subíndice "N", si además las ecuaciones de momentum (2.37), energía (2.42) y especies (2.45) se dividen entre la densidad y se introduce en las ecuaciones la viscosidad cinemática ν_N y la difusividad térmica α_N , definidos por:

$$\nu_N = \frac{\mu_N}{\rho_N} \quad (2.57)$$

$$\alpha_N = \frac{k_N}{\rho_N C_{pN}} \quad (2.58)$$

y si se considera también la incompresibilidad del flujo dada por la ec. (2.54), se puede obtener el siguiente sistema de ecuaciones:

Para la atmósfera en reposo:

$$P_N = R_N \rho_N T_N \quad (2.59)$$

$$\frac{\partial P_N}{\partial x_i} = -\rho_N g_i \quad (2.60)$$

$$\frac{\partial P_N}{\partial x_j} = C_{PN} \rho_N \frac{\partial T_N}{\partial x_j} = -\rho_N g \quad (2.61)$$

Para movimiento de desviación:

II. SISTEMA DE BOUSSINESQ	
$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_N} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{T}{T_N} g_i + \nu_N \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j^2}$	(II.a)
$\frac{\partial T}{\partial t} + U_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \alpha_N \frac{\partial^2 T}{\partial x_j^2}$	(II.b)
$\frac{\partial C_a}{\partial t} + U_j \frac{\partial C_a}{\partial x_j} = D_N \frac{\partial^2 C_a}{\partial x_j^2}$	(II.c)
$\rho = -\frac{\rho_N}{T_N} T$	(II.d)
$\frac{\partial U_i}{\partial x_j} = 0$	(II.e)

Tabla 2.2 Sistema de ecuaciones de Boussinesq

Este sistema de ecuaciones es universalmente conocido como "*ecuaciones de Boussinesq para un flujo estratificado*" y son las ecuaciones clásicas para flujos atmosféricos.

Con frecuencia se considera una simplificación más. En vista del hecho de que el número de Prandtl:

$$Pr = \mu C_p k \quad (2.62)$$

y el número de Schmidt:

$$Sc = \rho l \mu \quad (2.63)$$

para el aire son cercanos a 1, y si se supone que estos números son, de hecho, iguales a 1, entonces las ecuaciones de movimiento son simplificadas significativamente mediante las relaciones:

$$k_N = \mu_N C_{PN} \quad (2.64)$$

$$D_N = \mu_N / \rho_N \quad (2.65)$$

2.5. FLUJO TURBULENTO

El sistema de ecuaciones II es aplicable a flujos turbulentos, sin embargo este no puede resolverse numéricamente en forma directa ya que las variables que aparecen en ellas son cantidades instantáneas cuyas escalas de tiempo y espacio del movimiento son muy pequeñas; cualquier aproximación que se considere sobre estas variables involucra una complejidad numérica que rebasa las computadoras más potentes de hoy en día. Como ejemplo puede citarse las simulaciones directas que consumen una gran cantidad de memoria y tiempos excesivos de CPU, en computadoras CRAY, sólo para resolver casos simples o fenómenos locales, como son estelas producidas por un obstáculo, formación de vórtices, etc. (Lesieur, 1993). Se considera que se requieren por lo menos 10 puntos de malla para resolver adecuadamente un remolino turbulento, para un flujo típico. 10^5 puntos pueden requerirse para resolver solo 1 cm^3 del campo de flujo.

En lo que a este trabajo se refiere, y debido a que la capa atmosférica terrestre es de naturaleza turbulenta (excepto posiblemente en condiciones muy estables), se ha optado por una descomposición estadística de las variables en analogía con el comportamiento espectral de ellas en el espacio y en el tiempo.

Las variables $F(x, t)$ se descomponen entonces en la suma de sus valores medios $\bar{F}(x, t)$ y un residuo $f(x, t)$ llamado fluctuación turbulenta, fig. (2.1), tal que:

$$F = \bar{F} + f \quad (2.66)$$

donde \bar{F} es un valor promediado en el tiempo definido como:

$$\bar{F} = \frac{1}{t_0} \int_{t_0}^{t+t_0} F dt \quad (2.67)$$

El promedio de F se lleva a cabo en un intervalo de tiempo t_0 que es grande con respecto al tiempo de oscilación turbulenta, pero pequeño en relación con el tiempo de variación de las propiedades de flujo debido a otros factores no turbulentos. La predicción de flujos turbulentos se basa únicamente en promedios en el tiempo de propiedades turbulentas, desde que estas varían

mucho más gradualmente en el espacio y no se requiere una malla demasiado fina para la solución numérica.

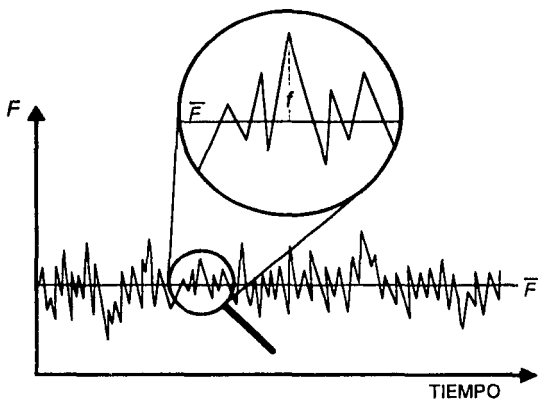


Figura 2.1 Fluctuaciones de una cantidad turbulenta

Con esta aproximación el sistema de ecs. II se transforma en un sistema de ecuaciones estadísticas sobre el cual, nuevas aproximaciones serán tomadas.

2.5.1. Teoremas de Reynolds

Los postulados introducidos por Reynolds permiten obtener las ecuaciones estadísticas. Estos conceptos se aplican sobre las variables físicas:

1. Linealidad:

$$\begin{aligned}\overline{F+G} &= \overline{F} + \overline{G} \\ \overline{aF} &= a \overline{F} \\ \overline{\tilde{a}} &= a\end{aligned}\tag{2.68}$$

donde F y G son funciones del espacio y del tiempo, a es una constante cualquiera y la tilde sobre las funciones ($\tilde{\quad}$) es un operador que indica promedio.

2. Conmutatividad con las operaciones de derivación y de integración:

$$\frac{\overline{\partial F}}{\partial s} = \frac{\partial \overline{F}}{\partial s} \quad (2.69)$$

$$\overline{\int F ds} = \int \overline{F} ds$$

donde s representa indiferentemente x_j o t .

3. Invarianza:

$$\overline{\overline{F \cdot G}} = \overline{F \cdot G} \quad (2.70)$$

el último axioma es esencial para desarrollar la teoría, implica en particular las siguientes propiedades importantes:

$$\overline{\overline{F}} = \overline{F}$$

$$\overline{\overline{f}} = \overline{f - \overline{F}} = 0 \quad (2.71)$$

$$\overline{\overline{F \cdot G}} = \overline{F \cdot G}$$

$$\overline{\overline{F \cdot g}} = 0$$

donde f y g son las fluctuaciones turbulentas de las funciones F y G respectivamente.

Debe notarse que el promedio de un producto no lineal entre fluctuaciones turbulentas ($\overline{fg, f^2}$) no necesariamente es cero.

Tomando las ecuaciones de Boussinesq y siguiendo la técnica utilizada por Reynolds (1894), se desarrollan las ecuaciones para las propiedades medias de una capa límite atmosférica turbulenta. Para hacer esto, se expresan las variables físicas como la suma de un valor medio de la variable y una fluctuación instantánea sobre la media, de acuerdo a la ecuación (2.66), obteniéndose el siguiente esquema:

$$\left. \begin{aligned} P &= \overline{P} + p \\ T &= \overline{T} + \theta \\ \rho &= \overline{\rho} + \rho' \\ U_i &= \overline{U}_i + u_i \\ C_a &= \overline{C}_a + c_a \end{aligned} \right\} \quad (2.72)$$

2.5.2. Ecuación de continuidad

Aplicando el esquema (2.72) en la ecuación de continuidad (II,e) se obtiene como resultado:

$$\frac{\partial(\bar{U}_j + u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (2.73)$$

una vez esta ecuación es promediada y se le aplican los axiomas de Reynolds se obtiene:

$$\frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.74)$$

de donde se deduce que:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.75)$$

La última ecuación implica que:

$$\frac{\partial(u_j \varphi)}{\partial x_j} = u_j \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} + \varphi \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \quad (2.76)$$

una vez que es promediada y se aplican los teoremas de Reynolds, se simplifique a:

$$\frac{\partial(\overline{u_j \varphi})}{\partial x_j} = \overline{u_j} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \quad (2.77)$$

donde φ es cualquier fluctuación turbulenta. Esta última ecuación es utilizada en simplificaciones posteriores.

2.5.3. Ecuación para la velocidad

Aplicando la descomposición de Reynolds a la ecuación de momentum se tiene:

$$\frac{\partial(\bar{U}_i + u_i)}{\partial t} + (\bar{U}_j + u_j) \frac{\partial(\bar{U}_i + u_i)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_N} \frac{\partial(\bar{P} + p)}{\partial x_i} + \frac{g_i}{T_N} (\bar{T} + \theta) + \nu_N \frac{\partial^2(\bar{U}_i + u_i)}{\partial x_j^2} \quad (2.78a)$$

desarrollando la ecuación anterior se obtiene:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial t} \right) + \left(\bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \bar{U}_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = \\ & - \frac{1}{\rho_N} \left(\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + \frac{g_i}{T_N} (\bar{T} + \theta) + \nu_N \left(\frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right) \end{aligned} \quad (2.78b)$$

A continuación se analizan cada uno de los términos considerando los axiomas de Reynolds:

- término de razón cambio:

$$\overline{\left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial t} \right)} = \overline{\left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial t} \right)} = \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} \right) = \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} \quad (2.79a)$$

- término de advección:

$$\begin{aligned} \overline{\left(\bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \bar{U}_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)} &= \overline{\left(\bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \bar{U}_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)} \\ &= \left(\bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \\ &= \left(\bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \overline{u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} \right) \end{aligned} \quad (2.79b)$$

- término de presión:

$$\frac{1}{\rho_N} \overline{\left(\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial p}{\partial x_i} \right)} = \frac{1}{\rho_N} \overline{\left(\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial p}{\partial x_i} \right)} = \frac{1}{\rho_N} \left(\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{\rho_N} \left(\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} \right) \quad (2.79c)$$

- término de buoyancy:

$$\overline{\frac{g_i}{T_N} (\bar{T} + \theta)} = \frac{g_i}{T_N} (\bar{T} + \bar{\theta}) = \frac{g_i}{T_N} \bar{T} \quad (2.79d)$$

- término de difusión viscosa:

$$\nu_N \overline{\left(\frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right)} = \nu_N \overline{\left(\frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right)} = \nu_N \left(\frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j^2} \right) = \nu_N \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j^2} \quad (2.79e)$$

sustituyendo estos desarrollos en la ecuación original se tiene:

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \left(\bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \overline{u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} \right) = -\frac{1}{\rho_N} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\bar{T}}{T_N} g_i + \nu_N \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j^2} \quad (2.80)$$

reacomodando la ecuación y sustituyendo la ecuación (2.77) (donde $\varphi = u_i$) en la ecuación anterior, se obtiene:

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_N} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\bar{T}}{T_N} g_i + \nu_N \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j^2} - \frac{\partial(\overline{u_i u_j})}{\partial x_j} \quad (2.81)$$

Esta es la ecuación utilizada para el movimiento medio de una capa atmosférica. Se observa que a partir del término de advección se ha introducido un esfuerzo efectivo turbulento, llamado esfuerzo de Reynolds, el cual es de magnitud $\rho_0 u_i u_j$. Cabe mencionar que es justamente la no linealidad del término advectivo una de las dificultades más importantes en la Mecánica de Fluidos, ella implica, en principio, que las soluciones de las ecuaciones de Navier-Stokes impliquen desarrollos teóricos y numéricos complicados.

2.5.4. Ecuación para la temperatura

Aplicando la descomposición de Reynolds a la ecuación de energía se tiene:

$$\frac{\partial(\bar{T} + \theta)}{\partial t} + (\bar{U}_i + u_i) \frac{\partial(\bar{T} + \theta)}{\partial x_j} = \alpha_N \frac{\partial^2(\bar{T} + \theta)}{\partial x_j^2} \quad (2.82a)$$

desarrollando esta ecuación:

$$\left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) + \left(\bar{U}_i \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} + \bar{U}_i \frac{\partial \theta}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right) = \alpha_N \left(\frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_j^2} \right) \quad (2.82b)$$

Promediando cada término y aplicando los teoremas de Reynolds:

- término de la razón de cambio de temperatura:

$$\overline{\left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial t} \right)} = \left(\overline{\frac{\partial \bar{T}}{\partial t}} + \overline{\frac{\partial \theta}{\partial t}} \right) = \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} \right) = \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} \quad (2.83a)$$

- término de advección:

$$\begin{aligned}
 \left(\overline{U_i \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j}} + \overline{U_i} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} \right) &= \left(\overline{U_i \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j}} + \overline{U_i} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} + \overline{u_i \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j}} + \overline{u_i \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j}} \right) \\
 &= \left(\overline{U_i} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} + \overline{U_i} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} + \overline{u_i} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} + \overline{u_i} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} \right) \\
 &= \left(\overline{U_i} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} + \overline{u_i} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} \right)
 \end{aligned} \quad (2.83b)$$

• término de difusión:

$$\alpha_N \left(\frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 \overline{\theta}}{\partial x_j^2} \right) = \alpha_N \left(\frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 \overline{\theta}}{\partial x_j^2} \right) = \alpha_N \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x_j^2} \quad (2.83c)$$

sustituyendo los términos en la ecuación de energía se tiene:

$$\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} + \left(\overline{U_i} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} + \overline{u_i} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} \right) = \alpha_N \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x_j^2} \quad (2.84)$$

reacomodando la ecuación e incluyendo la ecuación (2.77) (donde $\varphi = \theta$) se obtiene la ecuación media de la temperatura:

$$\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} + \overline{U_i} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} = \alpha_N \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x_j^2} - \frac{\partial \overline{u_i \theta}}{\partial x_j} \quad (2.85)$$

donde se introduce un término de turbulencia a partir del término de advección, en forma similar que en la ecuación de la velocidad.

2.5.5. Ecuación de concentración de la masa del contaminante

Aplicando la descomposición de Reynolds a la ecuación de conservación de especies se tiene:

$$\frac{\partial (\overline{c_a} + c_a)}{\partial t} + (\overline{U_i} + u_i) \frac{\partial (\overline{c_a} + c_a)}{\partial x_j} = D_N \frac{\partial^2 (\overline{c_a} + c_a)}{\partial x_j^2} \quad (2.86a)$$

reacomodando se llega a la ecuación:

$$\left(\frac{\partial \overline{c_a}}{\partial t} + \frac{\partial c_a}{\partial t} \right) + \left(\overline{U_i} \frac{\partial \overline{c_a}}{\partial x_j} + \overline{U_i} \frac{\partial c_a}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial \overline{c_a}}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial c_a}{\partial x_j} \right) = D_N \left(\frac{\partial^2 \overline{c_a}}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 c_a}{\partial x_j^2} \right) \quad (2.86b)$$

Promediando cada término y aplicando los teoremas de Reynolds:

- término de la razón de cambio:

$$\overline{\left(\frac{\partial \bar{c}_a}{\partial t} + \frac{\partial c_a}{\partial t}\right)} = \left(\overline{\frac{\partial \bar{c}_a}{\partial t}} + \overline{\frac{\partial c_a}{\partial t}}\right) = \left(\frac{\partial \bar{c}_a}{\partial t} + \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial t}\right) = \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial t} \quad (2.87a)$$

- término de advección:

$$\begin{aligned} \overline{\left(\bar{U}_i \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial x_j} + \bar{U}_i \frac{\partial c_a}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial c_a}{\partial x_j}\right)} &= \left(\bar{U}_i \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial x_j} + \bar{U}_i \frac{\partial c_a}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial c_a}{\partial x_j}\right) \\ &= \left(\bar{U}_i \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial x_j} + \bar{U}_i \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial x_j} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial c_a}{\partial x_j}\right) \\ &= \left(\bar{U}_i \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial c_a}{\partial x_j}\right) \end{aligned} \quad (2.88b)$$

- término de difusión molecular:

$$D_N \overline{\left(\frac{\partial^2 \bar{c}_a}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 c_a}{\partial x_j^2}\right)} = D_N \left(\frac{\partial^2 \bar{c}_a}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}_a}{\partial x_j^2}\right) = D_N \frac{\partial^2 \bar{c}_a}{\partial x_j^2} \quad (2.89c)$$

sustituyendo los términos en la ecuación de conservación de especies se tiene:

$$\frac{\partial \bar{c}_a}{\partial t} + \left(\bar{U}_i \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial c_a}{\partial x_j}\right) = D_N \frac{\partial^2 \bar{c}_a}{\partial x_j^2} \quad (2.90)$$

reacomodando la ecuación y sustituyendo la ecuación (2.77) (donde $\varphi = c_a$) se obtiene la ecuación media de la concentración de especies:

$$\frac{\partial \bar{c}_a}{\partial t} + \bar{U}_i \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial x_j} = D_N \frac{\partial^2 \bar{c}_a}{\partial x_j^2} - \frac{\partial \bar{u}_i c_a}{\partial x_j} \quad (2.91)$$

al igual que en las ecuaciones medias de velocidad y temperatura, se introduce un término turbulento, que resulta del término de advección.

2.5.6. Ecuación de la densidad

Aplicando el esquema (2.72) a la ecuación de estado y aplicando los teoremas de Reynolds se obtiene la ecuación:

$$\bar{\rho} = -\frac{\rho_N \bar{T}}{T_N} \quad (2.92)$$

2.5.7. Discusión de las ecuaciones medias.

A partir de la descomposición estadística de Reynolds, aplicada a las ecuaciones de Boussinesq, se obtuvo el sistema de ecuaciones de la tabla 2.3.

III. SISTEMA DE ECUACIONES MEDIAS	
$\frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_j} = 0$	(III.a)
$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_N} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\bar{T}}{T_N} g_i + \nu_N \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j^2} - \frac{\overline{\partial(u_i u_j)}}{\partial x_j}$	(III.b)
$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{U}_i \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} = \alpha_N \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x_j^2} - \frac{\overline{\partial(\bar{T} \theta)}}{\partial x_j}$	(III.c)
$\frac{\partial \bar{C}_\alpha}{\partial t} + \bar{U}_i \frac{\partial \bar{C}_\alpha}{\partial x_j} = D_N \frac{\partial^2 \bar{C}_\alpha}{\partial x_j^2} - \frac{\overline{\partial(\bar{C}_\alpha c_\alpha)}}{\partial x_j}$	(III.d)
$\bar{\rho} = -\frac{\rho_N \bar{T}}{T_N}$	(III.e)

Tabla 2.3 Sistema de ecuaciones medias

Debido a los tensores de segundo orden que aparecen en las ecuaciones medias (III.b), (III.c) y (III.d) este sistema de ecuaciones es abierto. Resulta evidente que el procedimiento estadístico introduce una pérdida de información que debe de compensarse por las hipótesis que se consideran para reproducir el comportamiento turbulento del fluido. Debido a la no liberalidad de los términos de advección en las ecuaciones de la Mecánica de Fluidos, todo sistema de ecuaciones contiene más incógnitas que ecuaciones. En el capítulo siguiente se abundará sobre la representación de los tensores de Reynolds, deduciendo para ello algunos modelos de turbulencia.

CAPITULO 3

LOS MODELOS DE TURBULENCIA

3.1. INTRODUCCION

En el capítulo anterior se derivaron las ecuaciones estadísticas que permiten el estudio de la dispersión de contaminantes en la atmósfera, la consideración de este procedimiento introduce nuevas incógnitas que es necesario representar de alguna forma. Estas incógnitas son las que generan el desarrollo de la modelación matemática de la turbulencia en Mecánica de Fluidos, con variables aleatorias centradas en un punto.

Particularmente son los términos $\overline{u_i u_j}$, $\overline{u_i \theta}$, $\overline{u_i c_a}$ que aparecen en las ecuaciones medias (III.b), (III.c) y (III.d) respectivamente. las que introducen el problema de la cerradura de las ecuaciones, las leyes suplementarias llamadas comúnmente "leyes de cerradura" conducen a un sistema de ecuaciones que permite ser resuelto mediante algún procedimiento numérico. En la bibliografía suelen encontrarse tres tipos de modelos, a saber: los modelos algebraicos o modelos de orden cero, los modelos de primer orden y modelos de orden superior.

Los modelos de orden cero y de orden uno consisten en representar los momentos de segundo orden por medio de coeficientes turbulentos ν_T , K_T y K_c . para las tensiones de Reynolds, el flujo de calor y el flujo de masa respectivamente. Si estos coeficientes son representados mediante ecuaciones empíricas o ajustados mediante optimizaciones numéricas o experimentales, se dice

que existe una modelación de orden uno. Si los coeficientes son representados mediante una ecuación de evolución, que generalmente es la energía cinética de la turbulencia, el modelo se dice que es de primer orden y a una ecuación; en otros desarrollos se consideran dos ecuaciones de evolución, una para la energía cinética de la turbulencia y otra para su disipación, en este caso se dice que se trata de un modelo de turbulencia de primer orden a dos ecuaciones.

Existen otros métodos conocidos como de "orden superior" desarrollados recientemente, los cuales consisten en establecer una ecuación de evolución para los momentos de segundo orden, donde los coeficientes equivalentes no intervienen más. Estos métodos son los más prometedores ya que permiten representar el comportamiento de un fenómeno físico que evoluciona en el tiempo y en el espacio con mayor claridad. Sin embargo, la solución numérica de estas ecuaciones requiere de computadoras de gran capacidad, además de un tiempo elevado de CPU y en consecuencia un alto costo.

En este trabajo se incluyen en las ecuaciones los coeficientes (ν_T, K_T, K_ϵ) , los cuales son evaluados con modelos de "orden cero", es decir como constantes a ser optimizadas dependiendo del flujo de que se trate; y se incluyen modelos "de primer orden a dos ecuaciones", para lo cual se desarrollan dos ecuaciones de evolución, una relacionada con los mecanismos que contribuyen a la creación de la turbulencia" y otra, relacionada con los mecanismos que "destruyen la turbulencia".

3.2. MODELOS DE ORDEN CERO

Estos modelos consisten en evaluar coeficientes de viscosidad, conductividad y difusión turbulentos equivalentes (ν_T, K_T, K_ϵ) , los cuales no son una propiedad física del fluido, contrariamente a la viscosidad molecular ν_N , a la conductividad térmica α_N y a la difusión molecular D_N , sino más bien son parámetros que caracterizan los efectos de la turbulencia de un flujo. Evidentemente estos coeficientes no son definidos para flujos laminares o en ausencia de movimiento. En toda generalidad estos coeficientes deberían ser un tensor de cuarto orden; sin embargo, dada la complejidad de cálculo que este tensor implicaría, se considera una hipótesis de isotropía que permite representar este tensor mediante un escalar (Sini, 1986) en un determinado flujo.

3.2.1. Modelo de viscosidad turbulenta ν_T

Este coeficiente relaciona las tensiones de Reynolds $\overline{u_i u_j}$ con los gradientes medios de velocidad; en otras palabras, el tensor de cantidad de movimiento, por analogía con la ley de

viscosidad de Newton, puede ligarse al tensor de deformación de velocidades medias introduciendo el coeficiente de viscosidad turbulenta equivalente (Boussinesq, 1877). Para un modelo de orden cero, esto es:

$$-\overline{u_i u_j} + \frac{\overline{u_j u_j}}{3} \delta_{ij} = \nu_T \left(\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.1)$$

Muchas soluciones se han propuesto para evaluar el coeficiente de viscosidad turbulenta ν_T (Launder y Spalding, 1972). En general, el análisis dimensional muestra que puede considerarse proporcional a una escala de longitud (que puede ser el diámetro de la chimenea de emisión o una relación que tome en cuenta la longitud de mezcla) y una escala de velocidad (que puede ser la velocidad de emisión máxima o una relación que involucre la energía cinética de la turbulencia).

Se puede considerar, además, un modelo que tome en cuenta la anisotropía del flujo, lo cual implica que deben de definirse tres coeficientes de viscosidad, esto es:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\overline{u_i u_j} + \frac{\overline{u_j u_j}}{3} \right) = (\nu_{T1} \delta_{i1} \delta_{jm} + \nu_{T2} \delta_{i2} \delta_{2m} + \nu_{T3} \delta_{i3} \delta_{3m}) \frac{\partial^2 \overline{U}_i}{\partial x_l \partial x_m} \quad (3.2)$$

Si se considera la hipótesis de que existe isotropía en los planos horizontales, se puede escribir $\nu_{T1} = \nu_{T2}$; en cuanto al coeficiente ν_{T3} este dependerá de la estratificación, teniendo en cuenta además la producción o la destrucción de la energía cinética turbulenta por las fuerzas de gravedad.

El valor de estos coeficientes fueron deducidos de mediciones experimentales para casos simples (Gaillard, 1980). Así por ejemplo, pueden considerarse los siguientes valores:

La representación de las tensiones de Reynolds, para un flujo bidimensional en función de la viscosidad turbulenta equivalente puede escribirse como:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(-\overline{u_1 u_1} + \frac{\overline{u_1 u_1}}{3} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} (-\overline{u_1 u_3}) = \nu_{T1} \frac{\partial^2 \overline{U}}{\partial x_1 \partial x_1} + \nu_{T3} \frac{\partial^2 \overline{U}}{\partial x_3 \partial x_3} \quad (3.3)$$

en el caso de suponer isotropía en todos los planos se puede escribir:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (-\overline{u_i u_j}) = \nu_T \frac{\partial^2 \overline{U}}{\partial x_i \partial x_i} \quad (3.4)$$

3.2.2. Modelos de difusión turbulenta K_T

Este modelo está representado por la ec. (3.23) donde el coeficiente K_T puede calcularse a partir del número de Prandtl turbulento definido por:

$$Pr_T = \frac{\nu_T}{K_T} \quad (3.5)$$

cuyo valor, según la literatura, varía entre 0.5-0.7, para flujos libres.

Considerando la anisotropía del flujo, el flujo de calor turbulento puede modelarse como:

$$-\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u_i \theta}) = (K_{T1} \delta_{i1} \delta_{1m} + K_{T2} \delta_{i2} \delta_{2m} + K_{T3} \delta_{i3} \delta_{3m}) \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x_i \partial x_m} \quad (3.6)$$

y para un flujo bidimensional:

$$-\frac{\partial}{\partial x_1}(\overline{u_3 \theta}) - \frac{\partial}{\partial x_3}(\overline{u_1 \theta}) = K_{T1} \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x_1 \partial x_1} + K_{T3} \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x_3 \partial x_3} \quad (3.7)$$

en el caso de considerar isotropía en todos los planos, se tiene:

$$-\frac{\partial}{\partial x_3}(\overline{u_i \theta}) = K_T \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x_i \partial x_i} \quad (3.8)$$

donde los valores de los coeficientes K_T están ligados a los valores de los coeficientes ν_T por medio del número de Prandtl turbulento.

3.2.3. Modelo de difusión turbulenta K_C

En este modelo el coeficiente K_C puede ligarse al coeficiente de difusión turbulenta ν_T por medio del número de Schmidt turbulento definido por:

$$Sc_T = \frac{\nu_T}{K_C} \quad (3.9)$$

En forma análoga a (3.6) se puede escribir la ecuación para el flujo de especies:

$$-\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u_i c_a}) = (K_{C1} \delta_{i1} \delta_{1m} + K_{C2} \delta_{i2} \delta_{2m} + K_{C3} \delta_{i3} \delta_{3m}) \frac{\partial^2 \overline{C_a}}{\partial x_i \partial x_m} \quad (3.10)$$

y para un flujo bidimensional

$$-\frac{\partial}{\partial x_3}(\overline{u_1 c_a}) - \frac{\partial}{\partial x_1}(\overline{u_3 c_a}) = K_{C1} \frac{\partial^2 \overline{C_a}}{\partial x_1 \partial x_1} + K_{C3} \frac{\partial^2 \overline{C_a}}{\partial x_3 \partial x_3} \quad (3.11)$$

en el caso de considerar isotropía en todos los planos, se tiene:

$$-\frac{\partial}{\partial x_3}(\overline{u_1 c_a}) = K_C \frac{\partial^2 \overline{C_a}}{\partial x_i \partial x_i} \quad (3.12)$$

3.3. MODELOS DE TURBULENCIA DE PRIMER ORDEN

Son los modelos de turbulencia más utilizados para la simulación de flujos turbulentos debido a que se adaptan con relativa facilidad a un gran número de flujos. Sin embargo, estos modelos no reproducen adecuadamente todos los mecanismos que intervienen en el proceso de creación/destrucción de la turbulencia; por ejemplo, no reproduce adecuadamente flujos fuertemente disipativos o flujos con una dirección principal, ya que estos modelos consideran una isotropía local de la turbulencia. No obstante, pueden representar satisfactoriamente los flujos que en este trabajo se consideran.

3.3.1. Modelo κ - ϵ

De manera clásica las tensiones de Reynolds son esquematisadas por analogía a la expresión de esfuerzos moleculares en un flujo laminar (Boussinesq, 1877):

$$-\overline{u_i u_j} = \nu_T \left(\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \kappa \quad (3.13)$$

en la que ν_T es el coeficiente de viscosidad turbulenta que, a diferencia de los modelos de orden cero, ya no es una constante, sino que evoluciona en el espacio y en el tiempo.

El modelo de dos ecuaciones κ - ϵ que se desarrolla surge de la base de representar la viscosidad turbulenta equivalente ν_T mediante la siguiente expresión:

$$\nu_T = C_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (3.14)$$

donde se considera una ecuación de evolución de la energía cinética de la turbulencia κ y otra de su disipación ϵ . El coeficiente C_μ se determina experimentalmente a partir de la hipótesis de equilibrio (producción=disipación), o puede ser calculado a partir de relaciones empíricas

destinadas a adaptar el valor de esta constante a cada problema en particular; para los flujos en atmósfera libre $C_\mu=0.09$, sin embargo el valor de este coeficiente no es universal.

a) Ecuación de la energía cinética de la turbulencia

A partir de la ecuación media de la velocidad puede llegar a obtenerse una ecuación exacta para los esfuerzos de Reynolds y a partir de esta puede llegar a obtenerse una expresión exacta de la ecuación de evolución de la energía cinética de la turbulencia $\kappa = \frac{1}{2} \overline{u_i u_i}$, en la siguiente forma:

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \overline{U_j} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} = \underbrace{-\overline{u_i u_j} \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j}}_P - \underbrace{\beta g_i \overline{u_i \theta}}_B - \underbrace{v_N \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_j}}_C + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\underbrace{v_N \frac{\partial \kappa}{\partial x_j}}_{\text{TRANSPORTE DIFUSIVO: VISCONO}} - \underbrace{\frac{u_m u_m u_j}{2}}_{\text{CONVECTIVO}} - \underbrace{\frac{u_j p}{\rho_N}}_{\text{FLUCTUACIONES DE PRESIÓN}} \delta_{ij} \right) \quad (3.15)$$

RAZÓN DE CAMBIO DE κ TÉRMINO DE ADVECCIÓN P B C TRANSPORTE DIFUSIVO: VISCONO CONVECTIVO FLUCTUACIONES DE PRESIÓN

TÉRMINO DE PRODUCCIÓN PRODUCCIÓN/DESTRUCCIÓN POR FUERZAS DE ARQUIMEDÉS DISIPACIÓN

Esta ecuación implica que la velocidad de cambio de la energía cinética de la turbulencia (κ) está balanceada por diferentes procesos físicos. La energía cinética turbulenta es producida principalmente por la interacción de los esfuerzos de Reynolds y los gradientes de velocidad media, esto es, por el término (P) en la ec. (3.15), (Rodi, 1982), este término de producción (P) es modelado utilizando la ecuación que define el tensor de Reynolds obteniéndose:

$$-\overline{u_i u_j} \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} = v_T \left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} \quad (3.16a)$$

En situaciones de flujos con buoyant, la energía cinética turbulenta puede ser producida o destruida por un intercambio con la energía potencial del sistema, este proceso esta representado por el término (B) en la ec. (3.15), y puede modelarse utilizando la ecuación de flujo de calor turbulento, ec. (3.23), y la definición del número de Prandtl turbulento, que se incluirá posteriormente, obteniéndose:

$$\beta g_i \overline{u_i \theta} = \beta g_i \frac{v_T}{Pr_T} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_i} \quad (3.16b)$$

Un análisis de orden de magnitud demuestra que el término de transporte viscoso es despreciable a números de Reynolds elevados (Mompean, 1989). El término de difusión convectiva y el término de difusión por fluctuaciones de presión pueden ser modelados conjuntamente con ayuda de la ley del primer gradiente de la manera siguiente:

$$\frac{u_m u_m}{2} u_j + \frac{p}{\rho_N} u_i \delta_{ij} = - \frac{v_T}{\sigma_\kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \quad (3.16c)$$

El término de disipación (ε) transfiere directamente la energía cinética de la turbulencia en energía interna del fluido por acción viscosa y es siempre un término disipativo. Este término es calculado por medio de una ecuación de evolución.

Sustituyendo los términos modelados en la ecuación de κ se tiene la ecuación modelada para la energía cinética de la turbulencia:

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} = P + B + \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu_T \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right) \quad (3.17)$$

donde los términos P y B se definen de la siguiente manera:

$$P = \nu_T \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \quad (3.18)$$

$$B = \beta g_m \frac{\nu_T \bar{\theta}}{\rho_T \partial x_m} \quad (3.19)$$

y σ_κ es una constante de modelación, conocida también como el número de Prandtl de la energía cinética.

b) Ecuación de la disipación de la energía cinética de la turbulencia

La ecuación exacta para la disipación ε , puede ser obtenida a partir de la ecuación media de la velocidad (Sini, 1986), obteniéndose:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = & -2 \nu_N \overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_m} \frac{\partial u_j}{\partial x_m} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - 2 \nu_N^2 \overline{\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_m \partial x_m}} - 2 \nu_N \beta g_i \overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_m} \frac{\partial \theta}{\partial x_m}} \\ & - 2 \nu_N \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \left(\overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_m} \frac{\partial u_j}{\partial x_m}} + \overline{\frac{\partial u_m}{\partial x_i} \frac{\partial u_m}{\partial x_j}} \right) - 2 \nu_N \overline{u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_m} \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_m \partial x_m}} \\ & + \nu_N \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x_j \partial x_j} - \nu_N \frac{\partial}{\partial x_j} \left(u_j \overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_m} \frac{\partial u_i}{\partial x_m}} \right) - 2 \frac{\nu_N}{\rho_N} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\frac{\partial p}{\partial x_m} \frac{\partial u_j}{\partial x_m}} \right) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Los términos de producción por agitación y disipación de ε son modelados conjuntamente. La modelación toma en cuenta la influencia de fuerzas de flotación como función de B (Rodi, 1978), por lo tanto:

$$-2 v_N \frac{\partial u_i}{\partial x_m} \frac{\partial u_j}{\partial x_m} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - 2 v_N^2 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_m \partial x_m} = C_{\epsilon_1} \frac{\epsilon}{\kappa} (P + C_{\epsilon_3} B) - C_{\epsilon_2} \frac{\epsilon^2}{\kappa} \quad (3.21a)$$

donde (P) y (B) representan la producción total de la energía cinética de la turbulencia, y fueron definidos en las ecs. (3.18) y (3.19).

A partir de un análisis de orden de magnitud (Mompean, 1989) se puede demostrar que a grandes números de Reynolds los términos de difusión viscosa y de producción-destrucción por movimiento medio, son despreciables en comparación con los demás términos.

Asociando los términos de difusión por agitación y difusión por fluctuaciones de presión, estos términos pueden ser modelados utilizando la ley del primer gradiente (Mompean, 1989):

$$u_j v_N \frac{\partial u_i}{\partial x_m} \frac{\partial u_i}{\partial x_m} + 2 v_N \left(\frac{\partial p}{\partial x_m} \frac{\partial u_j}{\partial x_m} \right) = - \frac{v_T}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \quad (3.21b)$$

La ecuación modelada de la disipación de la energía cinética es entonces:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + U_j \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = C_{\epsilon_1} \frac{\epsilon}{\kappa} (P + C_{\epsilon_3} B) - C_{\epsilon_2} \frac{\epsilon^2}{\kappa} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{v_T}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) \quad (3.22)$$

donde se introducen cuatro constantes de modelación, las cuales son determinadas experimentalmente.

c) Constantes del modelo κ - ϵ

El número de Prandtl de la turbulencia que aparece en la ecuación (3.19) es generalmente obtenida por la optimización del decaimiento en la altitud de la temperatura media sobre la vertical. Su valor para flujos en atmósfera libre se encuentra en el rango 0.5-0.7.

CONSTANTES DEL MODELO κ - ϵ	
$C_{\epsilon_1} = 0.09$	para flujos en atmósfera libre. Chen y Rodi (1980)
$\sigma_\kappa = 1.0$	recomendado por Launder y Spalding (1972)
$\sigma_\epsilon = 1.3$	recomendado por Launder y Spalding (1974)
$C_{\epsilon_3} = 1.44$	recomendado por Chen y Rodi (1980)
$C_{\epsilon_2} = 1.92$	recomendado por Shiestel (1982)
$C_{\epsilon_4} = 0 - 0.2$	cuando $B < 0$
$C_{\epsilon_4} = 1.0$	cuando $B > 0$
$Pr_T = 0.5$	recomendado por Chen y Rodi (1980)

Tabla 3.1. Constantes del modelo estándar κ - ϵ

En lo que respecta a los valores de las constantes empíricas introducidas por el modelo, las cuales son determinadas experimentalmente, se considerarán los valores de la tabla (3.1).

El valor de las constantes es muy sensible; por ejemplo, una modificación del 5% sobre C_{ϵ_1} o C_{ϵ_2} introducen una variación aproximada sobre la expansión del jet del 20% (Chen y Rodi, 1980).

3.3.2. Modelo $\overline{\theta^2} - \epsilon_{\theta}$

El flujo de calor turbulento es calculado a partir de la ecuación:

$$-\overline{u_i \theta} = K_T \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} \quad (3.23)$$

en la que K_T es el coeficiente de difusividad turbulenta equivalente, que caracteriza los efectos de la turbulencia sobre los cambios térmicos, siendo calculado a partir de la definición del número de Prandtl turbulento, ec.(3.5). La experiencia muestra que K_T al igual que ν_T son variables en un flujo dado y de un flujo a otro, sin embargo el número de Prandtl aparece sensiblemente constante en un mismo flujo y varía muy poco de un flujo a otro. En lo que a este trabajo respecta se tomará como constante en todo el dominio concernido.

Por otro lado, para estimar los mecanismos de producción destrucción del campo térmico, en analogía con el cuerpo dinámico se desarrollaron las ecuaciones para el cálculo de la varianza de temperatura y de su disipación.

a) Ecuación de la varianza de temperatura

La ecuación exacta de la ecuación para la varianza de temperatura, (Sini, 1986), es:

$$\underbrace{\frac{\partial \overline{\theta^2}}{\partial t}}_{\text{VELOCIDAD DE CAMBIO}} + \underbrace{\overline{U_j} \frac{\partial \overline{\theta^2}}{\partial x_j}}_{\text{CONVECCIÓN}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_N \frac{\partial \overline{\theta^2}}{\partial x_j} - \overline{u_j \theta^2} \right)}_{\substack{\text{DIFUSIÓN:} \\ \text{MOLECULAR} \quad \text{CONVECTIVA}}} - \underbrace{2\overline{u_j \theta} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j}}_{\text{PRODUCCIÓN}} - 2\alpha_N \underbrace{\frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j}}_{\text{DISIPACIÓN}} \quad (3.24)$$

El término de difusión por transporte molecular es despreciable a grandes números de Reynolds; el término de difusión por convección es modelado adaptando la ley del primer gradiente simple a correlaciones triples, (Mompean, 1989):

$$-\overline{u_j \theta^2} = \frac{\nu_T}{\sigma_{\theta}} \frac{\partial \overline{\theta^2}}{\partial x_j} \quad (3.25a)$$

en la que σ_{θ} es una constante de modelación

El término de producción se mantiene sin modificaciones, mientras que la disipación (ε_θ) es calculada con una ecuación de evolución, a desarrollarse posteriormente, obteniéndose así, la ecuación modelada de la varianza de temperatura:

$$\frac{\overline{\partial\theta^2}}{\partial t} + \overline{U_j} \frac{\partial\overline{\theta^2}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{v_T}{\sigma_\theta} \frac{\partial\overline{\theta^2}}{\partial x_j} \right) - 2\overline{u_j\theta} \frac{\partial\overline{T}}{\partial x_j} - 2\varepsilon_\theta \quad (3.26)$$

donde σ_θ es una constante de modelación.

b) *Ecuación de la disipación de la varianza de temperatura.*

El término de disipación en la ecuación (3.26) puede ser determinado, ya sea, por una ecuación de transporte, o por la relación entre las escalas de tiempo dinámico y térmico.

El segundo procedimiento para calcular la disipación de la energía cinética de la turbulencia toma en cuenta las escalas de tiempo dinámico y térmico. La escala de tiempo dinámico τ caracteriza la escala de tiempo de la turbulencia dinámica y puede expresarse como (Mompean, 1989):

$$\tau = \frac{\kappa}{\varepsilon} \quad (3.27)$$

Por su parte, la escala de tiempo térmico τ_θ representa la escala característica de las fluctuaciones de temperatura y puede expresarse como (Mompean, 1989):

$$\tau_\theta = \frac{\overline{\theta^2}}{2\varepsilon_\theta} \quad (3.28)$$

La relación de las escalas de tiempo dinámico y térmico puede considerarse como constante (Mompean, 1989) y expresarse como:

$$R_\theta = \frac{\tau_\theta}{\tau} \quad (3.29)$$

Incluyendo las escalas de tiempo en la ecuación anterior y despejando la disipación de la varianza de la temperatura, se tiene:

$$\varepsilon_\theta = \frac{\overline{\theta^2}}{2R_\theta} \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.30)$$

El valor del parámetro R_θ depende del tipo de flujo que se esté estudiando, para flujos libres suele encontrarse en la bibliografía valores entre 0.4-0.5.

Ahora, si se considera una ecuación de transporte para la disipación de la varianza de la temperatura, puede obtenerse una ecuación exacta (Mompean, 1989), en la siguiente forma:

$$\frac{\partial \varepsilon_\theta}{\partial t} + \overline{U_j} \frac{\partial \varepsilon_\theta}{\partial x_j} = -2\alpha_N \overline{\frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j}} - 2\alpha_N u_j \overline{\frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i}} - 2\alpha_N \overline{\frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_j}}$$

VELOCIDAD
DE CAMBIO

CONVECCIÓN

FUENTE POR INTERACCIÓN DE
TURBULENCIA-GRAD. DE TEMP. MEDIA

FUENTE POR INTERACCIÓN
FLUCTUACIÓN TEMP.-GRAD. VEL. MEDIA

$$-2\alpha_N \overline{\frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial \theta}{\partial x_j}} - 2 \left(\alpha_N \overline{\frac{\partial^2 \theta}{\partial x_i \partial x_j}} \right)^2 - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_N \frac{\partial \varepsilon_\theta}{\partial x_j} - u_j \varepsilon'_\theta \right) \quad (3.31)$$

INTERACCIÓN ENTRE GRAD. DE
FLUCTUACIONES TURBULENTAS

DISIPACIÓN
MOLECULAR

DIFUSIÓN
MOLECULAR

DIFUSIÓN
CONVECTIVA

A partir de un análisis de orden de magnitud (Mompean, 1989), se puede demostrar que a grandes números de Reynolds, el segundo de los términos fuente por interacción turbulencia-gradiente de temperatura media, y el término de difusión molecular, pueden ser despreciados en comparación con los demás términos de la ecuación.

Para el primero de los términos fuente por interacción turbulencia-gradiente de temperatura media y el término fuente por interacción fluctuación de temperatura-gradiente de velocidad media, Chung y Sung (1984) proponen la inclusión de la producción de la energía cinética de la turbulencia (P) y un término suplementario de producción de los efectos de flotabilidad (B), así que:

$$-2\alpha \overline{\frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j}} - 2\alpha \overline{\frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_j}} = -C'_{\varepsilon_{T1}} \frac{\varepsilon_\theta}{\theta^2} \overline{u_j \theta} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} + C'_{\varepsilon_{T2}} (P + B) \frac{\varepsilon_\theta}{K} \quad (3.32a)$$

El término de difusión convectiva se modela de la siguiente manera:

$$-\overline{u_j \varepsilon'_\theta} = \frac{v_T}{\sigma_{\varepsilon_\theta}} \frac{\partial \varepsilon_\theta}{\partial x_j} \quad (3.32b)$$

El término de interacción entre gradientes de fluctuaciones turbulentas y el de disipación molecular pueden ser modelados empleando las escalas de temperatura dinámica y térmica, (Newman *et al.*, 1981):

$$-2\alpha \frac{\overline{\partial\theta}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial U_j}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial\theta}}{\partial x_j} - 2 \left(\alpha \frac{\overline{\partial^2\theta}}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 = -C_{\epsilon T_3} \epsilon_\theta \frac{\epsilon}{\kappa} - C_{\epsilon T_4} \frac{(\epsilon_\theta)^2}{\theta^2} \quad (3.32c)$$

Sustituyendo cada término modelado en la ecuación exacta de la disipación de la varianza de la temperatura se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \epsilon_\theta}{\partial t} + \overline{U_j} \frac{\partial \epsilon_\theta}{\partial x_j} = & -C_{\epsilon T_1} \frac{\epsilon_\theta}{\theta^2} \overline{u_j \theta} \frac{\overline{\partial T}}{\partial x_j} + C_{\epsilon T_2} (P+B) \frac{\epsilon_\theta}{\kappa} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{v_T}{\sigma_\theta} \frac{\partial \epsilon_\theta}{\partial x_j} \right) \\ & - C_{\epsilon T_3} \epsilon_\theta \frac{\epsilon}{\kappa} - C_{\epsilon T_4} \frac{(\epsilon_\theta)^2}{\theta^2} \end{aligned} \quad (3.33)$$

donde se introducen cinco constantes de modelación, las cuales son determinadas experimentalmente.

c) *Constantes del modelo* $\overline{\theta^2} - \epsilon_\theta$

El valor de las constantes empíricas de modelación se obtienen experimentalmente. En la tabla 3.1 se encuentran valores recomendados por diferentes autores. El valor de las constantes varía ligeramente de un autor a otro y dependen también del tipo de flujo¹, por lo que estas pueden ser optimizadas.

CONSTANTES DEL MODELO $\overline{\theta^2} - \epsilon_\theta$	
$\sigma_\theta = 0.7$	recomendado por Spalding (1971)
$\sigma_{\epsilon_\theta} = 1.0$	valor generalmente utilizado.
$C_{\epsilon T_1} = 1.96$	definido por Newman et al ² (1981)
$C_{\epsilon T_2} = 0.80$	definido por Chung and Sung (1984).
$C_{\epsilon T_3} = 0.80$	definido por Newman et al (1981).
$C_{\epsilon T_4} = 2.0$	definido por Chung and Sung (1984).
$Pr_T = 0.5 - 0.7$	para flujos libres

Tabla 3.2. Constantes del modelo $\overline{\theta^2} - \epsilon_\theta$

¹Los valores de las constantes han sido obtenidos, principalmente, a partir de flujos de tipo jet plano.

²Newman et al (1981) realizaron un estudio a partir de medidas experimentales de procesos de evolución de θ^2 para flujos homogéneos con y sin gradientes de temperatura media.

3.3.3. Modelo $\overline{c_\alpha^2} - \varepsilon_c$

Este modelo es deducido a partir de una estrecha analogía con la ecuación de la temperatura y esta representado por la ecuación que define el flujo de masa turbulento:

$$-\overline{u_j c_\alpha} = K_c \frac{\partial \overline{C_\alpha}}{\partial x_j} \quad (3.34)$$

en donde K_c es calculado mediante el número de Schmidt turbulento, ec. (3.9).

Por otro lado, para estimar los mecanismos de producción destrucción del campo de la concentración de la especie α , en analogía con el cuerpo dinámico y térmico se desarrollan las ecuaciones para el cálculo de la varianza de la concentración de α y de su disipación.

a) Ecuación de la varianza de las especies

La ecuación de la varianza de la concentración de especies $\overline{c_\alpha^2}$, en su forma modelada, y en analogía con la ecuación de la varianza de temperatura, puede escribirse:

$$\frac{\partial \overline{c_\alpha^2}}{\partial t} + \Gamma_j \frac{\partial \overline{c_\alpha^2}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{v_T}{\sigma_c} \frac{\partial \overline{c_\alpha^2}}{\partial x_j} \right) - 2\overline{u_i c_\alpha} \frac{\partial \overline{C_\alpha}}{\partial x_j} - 2\varepsilon_c \quad (3.35)$$

en donde σ_c es una constante de modelación, y ε_c es la disipación de la varianza de la concentración de especies.

b) Ecuación de la disipación de la varianza de las especies

La disipación de la varianza de la concentración de especies puede calcularse por medio de escalas de tiempo o por medio de una ecuación de evolución.

La ecuación de la disipación de la varianza de la concentración de α a partir de escalas de tiempo, por analogía con la temperatura, es:

$$\varepsilon_c = \frac{\overline{c_\alpha^2}}{2R_c} \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.36)$$

donde R_c es la relación de las escalas de tiempo de concentraciones y dinámico. Considerando la analogía de las ecuaciones de la temperatura y concentración, y considerando que ambas cantidades son escalares, se puede considerar que el valor de R_c es igual al valor de R_θ .

Por otra parte la ecuación de evolución de la disipación de $\overline{c_\alpha^2}$, en su forma modelada, y en analogía con la ecuación de la disipación de la varianza de la fluctuación de la temperatura (3.33), puede escribirse en la forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial t} + \overline{U_j} \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial x_j} = & -C_{\varepsilon c 1} \frac{\varepsilon_c}{c_\alpha^2} \overline{u_j} c_\alpha \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} + C_{\varepsilon c 2} (P+G) \frac{\varepsilon_c}{\kappa} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\nu_T}{\sigma_{\varepsilon c}} \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial x_j} \right) \\ & - C_{\varepsilon c 3} \varepsilon_c \frac{\varepsilon}{\kappa} - C_{\varepsilon c 4} \frac{(\varepsilon_c)^2}{c_\alpha^2} \end{aligned} \quad (3.37)$$

donde se introducen cuatro constantes de modelación.

c) *Constantes del modelo $\overline{c_\alpha^2} - \varepsilon_c$*

Las constantes de modelación del modelo $\overline{c_\alpha^2} - \varepsilon_c$ no son encontradas en la literatura y se propone, que por la analogía existente entre las ecuaciones de la temperatura y de la concentración de α , y considerando que ambas cantidades son escalares inertes, serán utilizadas las mismas constantes que utiliza el modelo de la temperatura, como se muestra en la tabla 3.3.

CONSTANTES DEL MODELO $\overline{c_\alpha^2} - \varepsilon_c$
$\sigma_c = 0.7$
$\sigma_{\varepsilon_c} = 1.00$
$C'_{\varepsilon c 1} = 1.96$
$C'_{\varepsilon c 2} = 0.80$
$C'_{\varepsilon c 3} = 0.80$
$C'_{\varepsilon c 4} = 2.00$
$Sc_\gamma = 0.5 - 0.7$

Tabla 3.3. Constantes del modelo $\overline{c_\alpha^2} - \varepsilon_c$

CAPITULO 4

**LOS METODOS NUMERICOS DE
SOLUCION**

EL PROGRAMA QUETZAL/II

4.1. INTRODUCCION

Un sistema de ecuaciones como el que se ha obtenido en los capítulos anteriores, tiene que ser resuelto, evidentemente, por vía numérica. Para esto, debe elegirse un método de discretización del modelo físico-matemático, el cual involucra dos componentes: la discretización espacial y la discretización de ecuaciones. En este trabajo se ha optado por resolver el modelo mediante un esquema de diferencias finitas en una malla tipo *MAC* (fig. 4.1). Para lo cual se modificó un programa de computadora, llamado **QUETZAL/II**, el cual permite considerar los modelos de turbulencia desarrollados en etapas anteriores, así como la combinación entre ellos, de acuerdo a la definición de los parámetros presentados en la tabla (4.1).

Se considera además, el método de compresibilidad artificial para la solución de la ecuación de continuidad.

Parámetro	0	1
MDL	Modelo ν_T	Modelo $\kappa - \varepsilon$
MTH	Modelo K_T	Modelo $\overline{\theta^2} - \varepsilon_\theta$
MTC	Modelo K_c	Modelo $\overline{c_a^2} - \varepsilon_c$

Tabla 4.1 Definición de los parámetros MDL., MTH.y MTC.

En este trabajo se ha considerado un dominio bidimensional, lo que permite simplificar la solución numérica del modelo matemático, además de disminuir el tiempo de cómputo.

4.2. DISCRETIZACION ESPACIAL

La discretización espacial consiste en construir una malla por medio de la cual, el dominio físico continuo sea reemplazado por un número finito de puntos, donde los valores numéricos de las variables serán determinados. La exactitud de la aproximación numérica depende también del tamaño de la malla, ya que el error de la simulación numérica tiende a disminuirse cuando el tamaño de la malla se reduce, y la rapidez de esta variación está caracterizada por el *orden* de la discretización numérica de las ecuaciones. La solución numérica depende también del tipo y forma de la malla.

Considerando que los dominios de interés en estudios atmosféricos son de grandes dimensiones, y además, que alejándose de la chimenea los gradientes de las variables son menores, se puede utilizar una malla que crezca conforme se aleja de la chimenea, y su geometría dependerá del caso de estudio, pudiéndose imponer una malla con diferentes zonas, en donde en cada zona la malla tenga diferentes incrementos o que crezca uniformemente.

En este estudio se ha considerado la malla MAC (denominada de esta forma por sus siglas en inglés Marker-and-Cell), desarrollada en los Alamos, en la cual los escalares son evaluados en el centro de las mallas y las cantidades vectoriales en las caras correspondientes, como se indica en la fig. 4.1.

La fig. 4.1 esquematiza la malla MAC para un dominio bidimensional, que además es irregular, es decir, el tamaño de cada celda de la malla puede ser diferente. Para obtener los valores numéricos en todos los puntos de la malla es necesario considerar una doble malla en un dominio de estudio, es decir, una malla de cálculo y una de interpolación. En la malla de cálculo es

en donde se resuelven las ecuaciones discretizadas de la variable de interés, y en la malla de interpolación se calculan dichas variables por medio de una interpolación lineal.

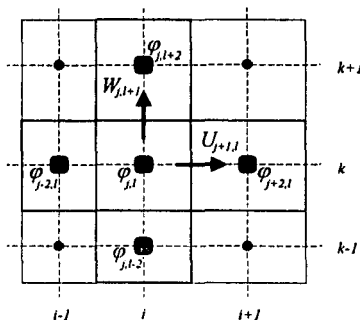


Figura 4.1 Malla de discretización MAC, φ representa los escalares.

4.3. DISCRETIZACION DE ECUACIONES

El proceso de discretización de ecuaciones consiste en pasar de una función continua a una función discreta que resulta en intervalos finitos de tiempo y espacio que permite la transformación de las ecuaciones diferenciales a operaciones algebraicas que involucran los valores de las variables en los puntos de la malla.

Un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE) dependiente del tiempo, como es el caso, requiere de un esquema de integración en el tiempo. Así, la derivada temporal se discretiza como:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\varphi^{n+1} - \varphi^n}{\Delta t} \quad (4.1)$$

donde φ representa cualquier variable dependiente del tiempo. Con lo cual se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas a un nivel de tiempo dado como una función de las variables en un paso de tiempo previo.

El sistema de ecuaciones del modelo físico-matemático es un sistema parabólico en el tiempo e hiperbólico en el espacio; para resolverlo se ha elegido un método de diferencias finitas. El esquema general de la solución de las ecuaciones que se ha elegido es el siguiente:

$$[\varphi_{j,l}]^{n+1} = [\varphi_{j,l}]^n + \Delta t [\text{Convección} + \text{Difusión} + \dots]^n \quad (4.2)$$

en la que (i,j) representan los índices en el espacio y (n) el índice temporal; así, las ecuaciones son resueltas de acuerdo a las condiciones establecidas en una etapa de tiempo anterior, relacionándose en un proceso de cálculo por el incremento de tiempo dado por Δt . La estructura dada por la ecuación (4.2) es la misma que se considera dentro del programa de cómputo y tiene la ventaja de conocer la evolución, en el espacio y en el tiempo, de los diversos mecanismos que intervienen en las ecuaciones.

4.3.1. El método de diferencias finitas

El método de diferencias finitas se basa en las propiedades de la serie de Taylor cuya expresión general es:

$$\varphi_{j+1} = \varphi_j + \Delta x_j \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_j + \frac{1}{2} (\Delta x_j)^2 \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right|_j + \frac{1}{n!} (\Delta x_j)^n \left. \frac{\partial^n \varphi}{\partial x^n} \right|_j + \dots + O(\Delta x_j^m) \quad (4.3)$$

es decir, que el valor de la función φ_{j+1} evaluado en x_{j+1} puede obtenerse a partir de una expansión en el punto x_j . La distancia espacial entre x_j y x_{j+1} es $\Delta x_j = x_{j+1} - x_j$. El término $O(\Delta x_j^m)$ es el error de truncamiento, y m representa la potencia de Δx_j en el que el error de truncamiento tiende a cero. Ahora por ejemplo, si consideramos un error de truncamiento de primer orden, $O(\Delta x_j)$, y despejamos la primera derivada de φ , se obtiene una aproximación de la primera derivada de primer orden de la siguiente forma:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_j = \frac{\varphi_{j+1} - \varphi_j}{\Delta x_j} + O(\Delta x_j) \quad (4.4)$$

Considerando una malla cualquiera, las fórmulas de diferencias para las derivadas en un punto pueden construirse incluyendo cualquier número de puntos adyacentes, y en general el orden de aproximación se incrementa con el número y el arreglo de los nodos que se incluyen. En cualquier esquema numérico debe considerarse un balance entre el orden de aproximación y el número de puntos.

En este estudio se calculan las derivadas a partir de un esquema de tres puntos centrales, considerando una malla no homogénea como la que se indica en la fig. 4.2.

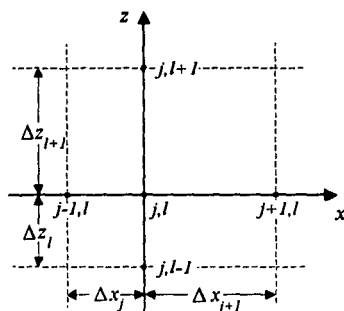


Figura 4.2 Malla no homogénea.

La primera derivada de una función φ con respecto de x en el punto j,l y en un esquema de tres puntos, considerando la malla de la fig. 4.2, puede ser obtenida con una expresión de la forma (Hirsch, 1988):

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{j,l} = a \varphi_{j+1,l} + b \varphi_{j-1,l} + c \varphi_{j,l} \quad (4.5)$$

Los coeficientes (a,b,c) son encontrados a partir de la expansión de la serie de Taylor de los puntos $\varphi_{j+1,l}$, desarrollo a la derecha, y $\varphi_{j-1,l}$, desarrollo a la izquierda, alrededor del punto $\varphi_{j,l}$:

$$\varphi_{j-1,l} = \varphi_{j,l} - \Delta x_j \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{j,l} + \left(\frac{\Delta x_j^2}{2} \right) \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right|_{j,l} + O(\Delta x_j^3) \quad (4.6)$$

$$\varphi_{j+1,l} = \varphi_{j,l} + (\alpha_j \Delta x_j) \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{j,l} + \frac{(\alpha_j \Delta x_j)^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right|_{j,l} + O(\Delta x_j^3) \quad (4.7)$$

en donde se ha considerado el siguiente parámetro geométrico:

$$\alpha_j = \frac{\Delta x_{j+1}}{\Delta x_j} \quad (4.8)$$

multiplicando la ec. (4.7) por a , la ec. (4.6) por b y sumando $c\varphi_{j,l}$ se obtiene:

$$a\varphi_{j+1,l} + b\varphi_{j-1,l} + c\varphi_{j,l} = (a+b+c)\varphi_{j,l} - \Delta x_j(a\alpha_j - b)\frac{\partial\varphi}{\partial x}\Big|_{j,l} + \left(\frac{\Delta x_j^2}{2}\right)(a\alpha_j^2 + b)\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\Big|_{j,l} + O(\Delta x_j^3) \quad (4.9)$$

Comparando la ecuación anterior con la ec. (4.5) se obtienen las condiciones:

$$a + b + c = 0 \quad \Delta x_j(a\alpha_j - b) = -1 \quad a\alpha_j^2 + b = 0 \quad (4.10)$$

resolviendo este sistema de ecuaciones se encuentran los coeficientes a, b, c :

$$a = \frac{1}{\alpha_j(\alpha_j + 1)\Delta x_j}, \quad b = -\frac{\alpha_j^2}{\alpha_j(\alpha_j + 1)\Delta x_j}, \quad c = \frac{\alpha_j^2 - 1}{\alpha_j(\alpha_j + 1)\Delta x_j} \quad (4.11)$$

que al sustituirse en la ecuación (4.5) se obtiene la ecuación de la primera derivada en la dirección x :

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x}\Big|_{j,l} = \frac{\varphi_{j+1,l} + (\alpha_j^2 - 1)\varphi_{j,l} - \alpha_j^2\varphi_{j-1,l}}{\alpha_j(\alpha_j + 1)\Delta x_j} + O(\Delta x_j^2) \quad (4.12)$$

Siguiendo un procedimiento análogo, se pueden obtener las siguientes derivadas en esquemas de diferencias finitas de tres puntos:

- Primera derivada de φ con respecto a z :

$$\frac{\partial\varphi}{\partial z}\Big|_{j,l} = \frac{\varphi_{j,l+1} + (\alpha_l^2 - 1)\varphi_{j,l} - \alpha_l^2\varphi_{j,l-1}}{\alpha_l(\alpha_l + 1)\Delta z_l} \quad (4.13)$$

donde:

$$\alpha_l = \frac{\Delta z_{l+1}}{\Delta z_l} \quad (4.14)$$

- Segunda derivada de φ con respecto a x :

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\Big|_{j,l} = 2\left(\frac{\varphi_{j+1,l} - (\alpha_j + 1)\varphi_{j,l} + \alpha_j\varphi_{j-1,l}}{\alpha_j(\alpha_j + 1)\Delta x_j^2}\right) \quad (4.15)$$

- Segunda derivada de φ con respecto a z :

$$\left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \right|_{j,j} = 2 \left(\frac{\varphi_{j,j+1} - (\alpha_l + 1)\varphi_{j,j} + \alpha_l \varphi_{j,j-1}}{\alpha_l(\alpha_l + 1)\Delta z_l^2} \right) \quad (4.16)$$

- Derivada cruzada:

$$\left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z \partial x} \right|_{j,j} = \frac{1}{\alpha_l(\alpha_l + 1)\Delta x_l} \frac{1}{\alpha_j(\alpha_j + 1)\Delta x_j} \left\{ \varphi_{j+1,j+1} + (\alpha_l^2 - 1)\varphi_{j+1,j} - \alpha_l^2 \varphi_{j+1,j-1} + (\alpha_l^2 - 1) \right. \\ \left. \left[\varphi_{j,j+1} + (\alpha_l^2 - 1)\varphi_{j,j} - \alpha_l^2 \varphi_{j,j-1} \right] - \alpha_l^2 \left[\varphi_{j-1,j+1} + (\alpha_l^2 - 1)\varphi_{j-1,j} - \alpha_l^2 \varphi_{j-1,j-1} \right] \right\} \quad (4.17)$$

donde se considera un esquema de cinco puntos para poder considerar las dos direcciones, fig. 4.2

Los esquemas antes mencionados han sido optimizados utilizando funciones geométricas representando flujos como los que aquí se estudian (Ramírez, 1991).

4.3.2. Ecuación media de la velocidad vertical

La discretización de la ecuación de velocidad media, ec. (III.b), en su componente vertical, de acuerdo al esquema (4.2), es:

$$\overline{W}_{j,j}^{n+1} = \overline{W}_{j,j}^n + \Delta t \left[\text{CONVECW}_{i,k} - \text{VOM}_{j,j} \left(\left. \frac{\partial \rho}{\partial z} \right|_{j,j} - \text{DIFFW}_{1,i,k} \right) - g \frac{\overline{T} - T_N}{T_N} - \text{DIFFW}_{2,i,k} \right]^n \quad (4.18)$$

donde

$$\text{VOM}_{j,j} = \frac{1}{\rho_N} \quad (4.19a)$$

y los macrotérminos se definen como:

- Advección:

$$\text{CONVECW}_{i,k} = -\overline{U} \frac{\partial \overline{W}}{\partial x} - \overline{W} \frac{\partial \overline{W}}{\partial z} \quad (4.19b)$$

La ecuación (4.19b) es la definición de la convección; sin embargo al utilizarla directamente introduce problemas de estabilidad numérica, por ello se ha recurrido a la utilización de un esquema que permite estabilizar dicho mecanismo; este esquema es presentado a detalle en la sección 4.4. En las ecuaciones posteriores se utiliza el mismo esquema para el término de convección.

- Gradiente de presión:

$$\left. \frac{\partial P}{\partial z} \right|_{j,l}^n = \frac{P_{j,l+1}^n - P_{j,l-1}^n}{\Delta z_l} \quad (4.19c)$$

- Difusión molecular:

$$\text{DIFFW1}_{i,k} = \mu_0 \left(2 \frac{\partial^2 \bar{W}}{\partial z \partial z} + \frac{\partial^2 \bar{W}}{\partial x \partial x} + \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial x \partial z} \right) \quad (4.19d)$$

- Difusión turbulenta:

La difusión turbulenta se evalúa de diferente forma según el modelo de turbulencia utilizado.

a) modelo algebraico (MDL=0):

$$\text{DIFFW2}_{i,k} = \nu_{T1} \frac{\partial^2 \bar{W}}{\partial x \partial x} + \nu_{T3} \frac{\partial^2 \bar{W}}{\partial z \partial z} \quad (4.19e)$$

b) modelo de primer orden (MDL=1):

$$\text{DIFFW2}_{i,k} = \frac{\overline{\partial w}}{\partial x} + \frac{\overline{\partial w}}{\partial z} \quad (4.19f)$$

4.3.3. Ecuación media de la velocidad horizontal

La discretización de la ecuación de velocidad media, ec. (III.b), en su componente horizontal, de acuerdo al esquema (4.2), es:

$$\bar{U}_{j,l}^{n+1} = \bar{U}_{j,l}^n + \Delta t \left[\text{CONVECU}_{i,k} - \text{VOM}_{j,l} \left(\left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{j,l} - \text{DIFFU1}_{i,k} \right) - \text{DIFFU2}_{i,k} \right]^n \quad (4.20)$$

donde el término VOM fue definido en la ec. (4.19), y los macrotérminos se definen como:

- Advección:

$$\text{CONVECU}_{i,k} = -\bar{U} \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} - \bar{W} \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} \quad (4.21a)$$

- Gradiente de presión:

$$\left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{j,j}^n = \frac{P_{j+1,j}^n - P_{j-1,j}^n}{\Delta x_j} \quad (4.21b)$$

- Difusión molecular:

$$\text{DIFFU}_{i,k} = \mu \left(2 \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial x \partial x} + \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial z \partial z} + \frac{\partial^2 \bar{W}}{\partial x \partial z} \right) \quad (4.21c)$$

- Difusión turbulenta:

La difusión turbulenta se evalúa de diferente forma según el modelo de turbulencia utilizado.

a) modelo algebraico (MDL=0):

$$\text{DIFFU}_{2,i,k} = \nu_{T1} \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial x \partial x} + \nu_{T3} \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial z \partial z} \quad (4.21d)$$

b) modelo de primer orden (MDL=0):

$$\text{DIFFU}_{2,i,k} = \frac{\overline{\partial u u}}{\partial x} + \frac{\overline{\partial w w}}{\partial z} \quad (4.21e)$$

4.3.4. Ecuación de la energía cinética de la turbulencia

La ecuación de la energía cinética de la turbulencia, ec. (3.17), es discretizada de acuerdo al esquema (4.2):

$$\kappa_{j,j}^{n+1} = \kappa_{j,j}^n + \Delta t \left[\text{CONVECK}_{i,k} + P_{j,j}^n + B_{j,j}^n + \text{DISSK}_{i,k} + \text{DIFFK}_{i,k} \right]^n \quad (4.22)$$

donde los macrotérminos se definen como:

- Convección:

$$\text{CONVECK}_{i,k} = -\bar{U} \frac{\partial \kappa}{\partial x} - \bar{W} \frac{\partial \kappa}{\partial z} \quad (4.23a)$$

- Producción:

a) término de producción:

$$P_{j,j}^n = v_{T,j,l} \left[2 \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{W}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{W}}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (4.23b)$$

b) término de producción o destrucción por fuerzas de flotación:

$$B_{j,j}^n = -v_{T,j,l} g \beta \frac{1}{Pr_T} \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \right) \quad (4.23c)$$

• Disipación:

$$DISS\kappa_{i,k} = -\varepsilon \quad (4.23d)$$

• Difusión:

$$DIFF\kappa_{i,k} = \frac{v_{T,j,l}}{\sigma_\kappa} \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \kappa}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{\sigma_\kappa} \left(\frac{\partial v_T}{\partial x} \frac{\partial \kappa}{\partial x} + \frac{\partial v_T}{\partial z} \frac{\partial \kappa}{\partial z} \right) \quad (4.23e)$$

4.3.5. Ecuación de la disipación de la energía cinética de la turbulencia

La ecuación de la disipación de la energía cinética de la turbulencia, ec.(3.22), es discretizada de acuerdo al esquema (4.2):

$$\varepsilon_{j,j}^{n+1} = \varepsilon_{j,j}^n + \Delta t \left[CONVEC\varepsilon_{i,k} + PROD\varepsilon_{i,k} + DISS\varepsilon_{i,k} + DIFF\varepsilon_{i,k} \right]^n \quad (4.24)$$

donde los macrotérminos se definen como:

• Convección:

$$CONVEC\varepsilon_{i,k} = -\bar{U} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} - \bar{W} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \quad (4.25a)$$

• Producción:

$$PROD\varepsilon_{i,k} = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon_{j,l}^n}{\kappa_{j,l}^n} \left(P_{j,l}^n + B_{j,l}^n \right) \quad (4.25b)$$

• Disipación:

$$\text{DISS}_{\epsilon_{i,k}} = -C_{\epsilon_2} \frac{(\epsilon_{j,l}^n)^2}{\kappa_{j,l}^n} \quad (4.25c)$$

- Difusión:

$$\text{DIFF}_{\epsilon_{i,k}} = \frac{v_{Tj,l}}{\sigma_{\epsilon}} \left(\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{\sigma_{\epsilon}} \left(\frac{\partial v_T}{\partial x} \frac{\partial \epsilon}{\partial x} + \frac{\partial v_T}{\partial z} \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \right) \quad (4.25d)$$

4.3.6. Ecuación de la temperatura media

La ecuación de temperatura media, ec. (III.c), puede discretizarse de acuerdo al esquema (4.2), obteniéndose:

$$\bar{T}_{j,l}^{n+1} = \bar{T}_{j,l}^n + \Delta t [\text{CONVECT}_{i,k} + \text{DIFFT1}_{i,k} - \text{DIFFT2}_{i,k}]^n \quad (4.26)$$

donde los macrotérminos se definen como:

- Advección:

$$\text{CONVECT}_{i,k} = -\bar{U} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} - \bar{W} \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \quad (4.27a)$$

- Difusión molecular:

$$\text{DIFFT1}_{i,k} = \alpha_N \left[\frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x \partial x} + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial z \partial z} \right] \quad (4.27b)$$

- Difusión turbulenta:

La difusión turbulenta se evalúa de diferente forma según el modelo de turbulencia utilizado.

a) modelo algebraico (MTH=0):

$$\text{DIFFT2}_{i,k} = K_{T1} \frac{\partial^2 \bar{W}}{\partial x \partial x} + K_{T3} \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial z \partial z} \quad (4.27c)$$

b) modelo de primer orden (MTH=1):

$$\text{DIFFT2}_{i,k} = \frac{\partial \bar{u} \bar{\theta}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{w} \bar{\theta}}{\partial z} \quad (4.27d)$$

4.3.7. Ecuación de la varianza de temperatura

La ecuación de la varianza de temperatura, ec. (3.26), es discretizada de acuerdo al esquema (4.2):

$$\overline{\theta^2} \Big|_{j,j}^{n+1} = \overline{\theta^2} \Big|_{j,j}^n + \Delta t \left[\text{CONVEC} \theta_{i,k} + \text{DIFF} \theta_{i,k} + \text{PROD} \theta_{i,k} + \text{DISS} \theta_{i,k} \right]^n \quad (4.28)$$

donde los macrotérminos se definen como:

- Convección:

$$\text{CONVEC} \theta_{i,k} = -\overline{U} \frac{\partial \overline{\theta^2}}{\partial x} - \overline{W} \frac{\partial \overline{\theta^2}}{\partial z} \quad (4.29a)$$

- Difusión:

$$\text{DIFF} \theta_{i,k} = \frac{v_{T,j,l}}{\sigma_\theta} \left(\frac{\partial^2 \overline{\theta^2}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \overline{\theta^2}}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{\sigma_\theta} \left(\frac{\partial v_T}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\theta^2}}{\partial x} + \frac{\partial v_T}{\partial z} + \frac{\partial \overline{\theta^2}}{\partial z} \right) \quad (4.29b)$$

- Producción:

$$\text{PROD} \theta_{i,k} = -2 \left[\overline{u} \theta \frac{\partial \overline{T}}{\partial x} + \overline{w} \theta \frac{\partial \overline{T}}{\partial z} \right] \quad (4.29c)$$

- Disipación:

$$\text{DISS} \theta_{i,k} = -2 \varepsilon_{\theta,j,l} \quad (4.29d)$$

4.3.8. Ecuación de la disipación de la varianza de temperatura

La ecuación de la disipación de la varianza de temperatura, ec. (3.33), es discretizada de acuerdo al esquema (4.2):

$$\varepsilon_{\theta,j,l}^{n+1} = \varepsilon_{\theta,j,l}^n + \Delta t \left[\text{CONVEC} \varepsilon_{\theta,k} + \text{PRODE} \varepsilon_{\theta,k} + \text{DIFF} \varepsilon_{\theta,k} + \text{DISS} \varepsilon_{\theta,k} \right]^n \quad (4.30)$$

donde los macrotérminos se definen como:

- Convección:

$$\text{CONVECE}_{\theta,k} = -\bar{U} \frac{\partial \varepsilon_{\theta}}{\partial x} - \bar{W} \frac{\partial \varepsilon_{\theta}}{\partial z} \quad (4.31a)$$

- Producción:

$$\text{PRODE}_{\theta,k} = C_{\varepsilon T2} \frac{\varepsilon_{\theta,kl}^n}{K_{jl}^n} (P_{jl}^n + B_{jl}^n) - C_{\varepsilon T1} \frac{\varepsilon_{\theta}}{\theta} \left(\bar{u} \theta \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} + \bar{w} \theta \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \right) \quad (4.31b)$$

donde los términos P y B fueron definidos en las ecs. (4.23c) y (4.23d), respectivamente.

- Difusión:

$$\text{DIFFE}_{\theta,k} = \frac{v_{Tj,l}}{\sigma_{\varepsilon\theta}} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_{\theta}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{\theta}}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{\sigma_{\varepsilon\theta}} \left(\frac{\partial v_T}{\partial x} \frac{\partial \varepsilon_{\theta}}{\partial x} + \frac{\partial v_T}{\partial z} \frac{\partial \varepsilon_{\theta}}{\partial z} \right) \quad (4.31c)$$

- Disipación:

$$\text{DISS}_{\theta,k} = -C_{\varepsilon T3} \frac{\varepsilon}{K} \varepsilon_{\theta} - C_{\varepsilon T4} \frac{(\varepsilon_{\theta})^2}{\theta^2} \quad (4.31d)$$

4.3.9. Ecuación media de la concentración de especies

La ecuación media de la concentración de especies, ec. (III.d), puede discretizarse de acuerdo al esquema (4.2), obteniéndose:

$$\bar{C}_{\alpha,j,l}^{n+1} = \bar{C}_{\alpha,j,l}^n + \Delta t [\text{CONVECC}_{i,k} + \text{DIFFC1}_{i,k} - \text{DIFFC2}_{i,k}]^n \quad (4.32)$$

donde los macrotérminos se definen como:

- Advección:

$$\text{CONVECC}_{i,k} = -\bar{U} \frac{\partial \bar{C}_{\alpha}}{\partial x} - \bar{W} \frac{\partial \bar{C}_{\alpha}}{\partial z} \quad (4.33a)$$

- Difusión molecular:

$$\text{DIFFC1}_{i,k} = D_N \left[\frac{\partial^2 \bar{C}_{\alpha}}{\partial x \partial x} + \frac{\partial^2 \bar{C}_{\alpha}}{\partial z \partial z} \right] \quad (4.33b)$$

- Difusión turbulenta:

La difusión turbulenta se evalúa de diferente forma según el modelo de turbulencia utilizado.

a) modelo algebraico (MTC=0):

$$\text{DIFFC}_{2_{i,k}} = K_{c1} \frac{\partial^2 \bar{W}}{\partial x \partial x} + K_{c3} \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial z \partial z} \quad (4.33c)$$

b) modelo de primer orden (MTC=1):

$$\text{DIFFC}_{2_{i,k}} = \frac{\partial \overline{uc}_\alpha}{\partial x} + \frac{\partial \overline{wc}_\alpha}{\partial z} \quad (4.33d)$$

4.3.10. Ecuación de la varianza de concentración

La ecuación de la varianza de las concentraciones, ec. (3.35), es discretizada de acuerdo al esquema (4.2):

$$\overline{c_\alpha^2}^{n+1}_{j,l} = \overline{c_\alpha^2}^n_{j,l} + \Delta t [\text{CONVECC}_{i,k} + \text{DIFFC}_{i,k} + \text{PRODC}_{i,k} + \text{DISSC}_{i,k}]^n \quad (4.34)$$

donde los macrotérminos se definen como:

- Convección:

$$\text{CONVECC}_{i,k} = -\bar{U} \frac{\partial \overline{c_\alpha^2}}{\partial x} - \bar{W} \frac{\partial \overline{c_\alpha^2}}{\partial z} \quad (4.35a)$$

- Difusión:

$$\text{DIFFC}_{i,k} = \frac{v_{Tj,l}}{\sigma_c} \left(\frac{\partial^2 \overline{c_\alpha^2}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \overline{c_\alpha^2}}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{\sigma_c} \left(\frac{\partial v_T}{\partial x} + \frac{\partial \overline{c_\alpha^2}}{\partial x} + \frac{\partial v_T}{\partial z} + \frac{\partial \overline{c_\alpha^2}}{\partial z} \right) \quad (4.35b)$$

- Producción:

$$\text{PRODC}_{i,k} = -2 \left[\overline{uc}_\alpha \frac{\partial \overline{c_\alpha}}{\partial x} + \overline{wc}_\alpha \frac{\partial \overline{c_\alpha}}{\partial z} \right] \quad (4.35c)$$

- Disipación:

$$\text{DISSC}_{i,k} = -2 \epsilon_{c_{j,l}} \quad (4.35d)$$

4.3.11. Ecuación de la disipación de la varianza de las especies

La ecuación de la disipación de la varianza de las especies, ec. (3.37), es discretizada de acuerdo al esquema (4.2):

$$\varepsilon_{c,j,l}^{n+1} = \varepsilon_{c,j,l}^n + \Delta t \left[\text{CONVEC} \varepsilon_{c_i,k} + \text{PROD} \varepsilon_{c_i,k} + \text{DIFF} \varepsilon_{c_i,k} + \text{DISS} \varepsilon_{c_i,k} \right]^n \quad (4.36)$$

donde los macrotérminos se definen como:

- Convección:

$$\text{CONVEC} \varepsilon_{c_i,k} = -\bar{U} \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial x} - \bar{W} \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial z} \quad (4.37a)$$

- Producción:

$$\text{PROD} \varepsilon_{c_i,k} = C_{\varepsilon c 2} \frac{\varepsilon_{c,j,l}^n}{\kappa_{j,l}^n} (P_{j,l}^n + B_{j,l}^n) - C_{\varepsilon c 1} \frac{\varepsilon_c}{c_a^2} \left(\overline{w c_a} \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial x} + \overline{w c_a} \frac{\partial \bar{c}_a}{\partial z} \right) \quad (4.37b)$$

donde los términos P y B fueron definidos en las ecs. (4.23c) y (4.23d), respectivamente.

- Difusión:

$$\text{DIFF} \varepsilon_{c_i,k} = \frac{\nu_{T,j,l}}{\sigma_{\varepsilon \theta}} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_c}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{\sigma_{\varepsilon c}} \left(\frac{\partial \nu_T}{\partial x} \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial x} + \frac{\partial \nu_T}{\partial z} \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial z} \right) \quad (4.37c)$$

- Disipación:

$$\text{DISS} \varepsilon_{c_i,k} = -C_{\varepsilon T 3} \frac{\varepsilon}{\kappa} \varepsilon_c - C_{\varepsilon T 4} \frac{(\varepsilon_c)^2}{c_a^2} \quad (4.37d)$$

4.4. EL ESQUEMA DE CONVECCION

En secciones anteriores se mencionó que debido a la no linealidad del término convectivo en las ecuaciones de Navier-Stokes, se recurría al tratamiento estadístico de las ecuaciones; este mismo término representa un problema complejo de resolver numéricamente; para ello se ha recurrido a un esquema *upwind* (ponderado hacia adelante) desarrollado por Ramirez (1991), el cual ha mostrado ser estable en flujos atmosféricos. La metodología adoptada es la siguiente: sea

A una variable cualquiera (\bar{W} , \bar{U} , \bar{T} , κ , ϵ , etc.) a ser transportada; entonces el esquema convectivo, en la etapa de tiempo $n+1$, tiene la forma siguiente:

$$\text{ADVEC}(A_{j,l}) = \text{ADVECX}(A_{j,l}) + \text{ADVE CZ}(A_{j,l}) \quad (4.38)$$

En donde se tiene, para la dirección horizontal:

$$\text{ADVECX}(A_{j,l}) = \frac{\text{ADVECX}_{j,l}}{\Delta x_j + \Delta x_{j+1}} \quad (4.39)$$

donde:

$$\text{ADVECX}_{j,l} = (\text{COX}_{j+1,l} - U_{j+1,l}^n + \text{COX}_{j-1,l})A_{j,l} - (\text{COX}_{j+1,l})A_{j+2,l} - (\text{COX}_{j-1,l} - U_{j-1,l}^n)A_{j-2,l} \quad (4.40)$$

en la que:

$$\text{COX}_{j,l} = U_{j,l}^n \left[\frac{\Delta x_j}{\Delta x_j + \Delta x_{j+1}} (1 - \alpha_A) + \frac{\alpha_A}{2} \right] - \frac{\alpha_A}{2} |U_{j,l}^n| \quad (4.41)$$

De la misma forma, para la dirección vertical se tiene:

$$\text{ADVE CZ}(A_{j,l}) = \frac{\text{ADVE CZ}_{j,l}}{\Delta z_j + \Delta z_{j+1}} \quad (4.42)$$

$$\text{ADVE CZ}_{j,l} = (\text{COZ}_{j,l+1} - W_{j,l+1}^n + \text{COZ}_{j,l-1})A_{j,l} - (\text{COZ}_{j,l+1})A_{j,l+2} - (\text{COZ}_{j,l-1} - W_{j,l-1}^n)A_{j,l-2} \quad (4.43)$$

$$\text{COZ}_{j,l} = W_{j,l}^n \left[\frac{\Delta z_j}{\Delta z_j + \Delta z_{j+1}} (1 - \alpha_A) + \frac{\alpha_A}{2} \right] - \frac{\alpha_A}{2} |W_{j,l}^n| \quad (4.44)$$

En estos desarrollos α_A ($0 \leq \alpha_A \leq 1$) es un parámetro de decentramiento cuyo valor inicial es 0.7; este valor se optimiza periódicamente en el curso de la evolución de la solución mediante el siguiente procedimiento:

1. Determinación de la velocidad máxima en todo el dominio:

$$\text{VMAX} = \max(|U_{j,l}|, |W_{j,l}|) \quad (4.45)$$

2. Cálculo de un coeficiente α :

$$\alpha_A = C_{j,l} \cdot \text{VMAX} \cdot \Delta t / \Delta M_{\min} \quad (4.46)$$

en la que C_A es un parámetro igual a 0.93, Δt el paso de tiempo y ΔM_{\min} el valor de la malla más pequeña.

3. Selección del coeficiente alfa:

$$\alpha_A^{n+1} = \min(\alpha_A^n, 1.0) \quad (4.47)$$

4.5. METODO DE COMPRESIBILIDAD ARTIFICIAL

Suponiendo que todos los campos son conocidos en el instante $t = n\Delta t$, la resolución de las ecuaciones medias de la velocidad, ecs. (4.18) y (4.20), permite obtener en cada nodo del dominio, una primera aproximación de la velocidad a la etapa $(n+1)$. La primera aproximación de la velocidad $(n+1)$ es representada por las condiciones impuestas en las condiciones iniciales. Luego, cuando el campo de velocidades es calculado en todo el dominio, estas velocidades no satisfacen, evidentemente, la ecuación de continuidad, ec.(III.a), para ello es necesario que en cada paso de tiempo, se este verificando dicha ecuación y con este propósito se introduce el método iterativo de compresibilidad artificial, desarrollado por Chorin en 1967 (Peyret, 1982).

Conforme evolucionan en el tiempo, la solución de las ecuaciones deben satisfacer la ecuación de continuidad en el dominio; esto implica que para un dominio discretizado esta ecuación deberá satisfacerse en cada una de las celdas de cálculo (fig. 4.1). Así la ecuación de la divergencia, ec. (III.a), escrita en una etapa $(n+1)$ debe de satisfacer matemáticamente la siguiente relación:

$$\text{div } \bar{v}^{n+1} = 0 \quad (4.48)$$

Esta condición generalmente no se cumple y es más fuerte al inicio de los cálculos (fig. 4.3); por ello, para ajustar la ecuación de continuidad se ha introducido el método de compresibilidad artificial. El método de compresibilidad artificial funciona de la siguiente manera: Considérese la ecuación de movimiento en la siguiente forma:

$$\bar{v}^{n+1} = \bar{v}^n + \bar{f}^n + \Delta t [\text{otros mecanismos}]^n \quad (4.49)$$

suponiendo que todos los campos son conocidos a la etapa $(n+1)$, la solución de la ecuación (4.49), permite obtener, en cada nodo del dominio, una primera aproximación de la velocidad a la etapa $(n+1)$.

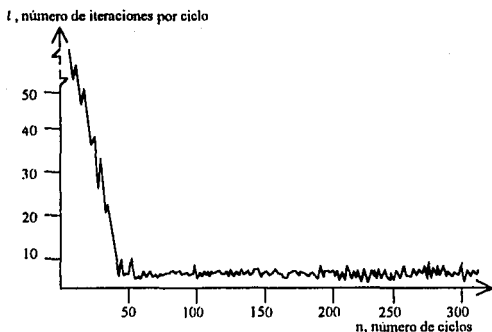


Figura 4.3. Aspecto indicativo de la convergencia del método de compresibilidad artificial.

Evidentemente la ecuación de continuidad (4.48) no se verifica en cada célula de cálculo; a partir de este campo aproximado, un proceso iterativo permite ajustar conjuntamente \bar{p}^{n+1} y P^{n+1} de tal forma que se verifique:

$$\operatorname{div} \bar{v}^{n+1} = \varepsilon \rightarrow 0 \quad (4.50)$$

En efecto, $\operatorname{div} \bar{v}^{n+1}$ positiva (negativa) en una célula (i,k) , induce la existencia de un flujo de masa saliendo (entrando) de la célula, que se puede, para asegurar la conservación, anular disminuyendo (aumentando) artificialmente la presión en la célula considerada. ε es una cantidad pequeña tendiente a cero. La relación de iteración es de la forma:

$$\left[\delta P_{i,k}^{n+1} \right]^{l+1} = -\beta_c \left[\operatorname{div} \bar{v}_{i,k}^{n+1} \right]^l \quad (4.51)$$

en la que l es el índice iterativo de la compresibilidad, δP^{l+1} es la corrección de presión hecha a la $(l+1)$ -ésima iteración y β_c el parámetro de iteración ($\beta_c > 0$).

Este método permite relajar simultáneamente los campos de velocidad y de presión; el algoritmo de relajación simultánea es equivalente al algoritmo implícito clásico que consiste en resolver la ecuación de Poisson para la presión y llevar ésta a la ecuación (4.49), (Sini, 1986).

Después de haber impuesto, en el ciclo temporal $(n+1)$ una corrección de presión δP^{l+1} en la célula (i,k) , la conservación de la cantidad de movimiento debe de asegurarse, y en consecuencia, \bar{v}^{n+1} debe de ser corregida de una cantidad $\operatorname{div} \bar{v}^{n+1}$.

Así, introduciendo la relación de iteración (4.51) en la ecuación (4.49); pueden obtenerse las correcciones de la velocidad:

$$\begin{aligned}\delta U_{i,k}^{n+1} &= [U_{i,k}^{n+1}]^{l+1} - [U_{i,k}^{n+1}]^l = \frac{\Delta t \delta P_{i,k}^{l+1}}{\rho_N \Delta x} \\ \delta U_{i-1,k}^{n+1} &= [U_{i-1,k}^{n+1}]^{l+1} - [U_{i-1,k}^{n+1}]^l = \frac{\Delta t \delta P_{i,k}^{l+1}}{\rho_N \Delta x} \\ \delta U_{i,k}^{n+1} &= [W_{i,k}^{n+1}]^{l+1} - [W_{i,k}^{n+1}]^l = \frac{\Delta t \delta P_{i,k}^{l+1}}{\rho_N \Delta z} \\ \delta U_{i,k-1}^{n+1} &= [W_{i,k-1}^{n+1}]^{l+1} - [W_{i,k-1}^{n+1}]^l = \frac{\Delta t \delta P_{i,k}^{l+1}}{\rho_N \Delta z}\end{aligned}\quad (4.52)$$

El parámetro β_c que aparece en la relación de iteración (4.51) se obtiene después de haber corregido el campo de velocidad a la $(l+1)$ -ésima iteración, con lo cual $\text{div} \vec{V}^{n+1} = 0$; de donde se obtiene que:

$$\delta P^{l+1} = -\frac{\rho_N [\text{div} \vec{V}_{i,k}^{n+1}]^l}{2\Delta t \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)} \quad (4.53)$$

Comparando la ec. (4.53) con (4.51) se deduce que:

$$\beta_c = \frac{\rho_N}{2\Delta t \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)} \quad (4.54)$$

Las correcciones son hechas línea tras línea en la totalidad del dominio. La corrección impuesta en una célula afecta las células vecinas. El proceso debe ser reiterado hasta que a la etapa $(l+1)$, la ecuación de continuidad sea verificada, a un valor $\epsilon \rightarrow 0$, en todas las celdas del dominio.

La convergencia del proceso iterativo puede ser acelerada introduciendo un coeficiente de relajación en la ec. (4.53). Este coeficiente, definido como Ω , debe a fin de conservar la estabilidad del esquema, tomar valores en el intervalo:

$$0.1 \leq \Omega \leq 1 \quad (4.55)$$

Conforme evoluciona el tiempo, se requerirán de menos iteraciones en el algoritmo del método, como se indica en forma esquemática en la fig. 4.3.

4.6. ANALISIS DE ESQUEMAS NUMERICOS

Con el propósito de analizar las propiedades y la validez de un esquema numérico deben de verificarse los conceptos de consistencia, estabilidad y convergencia. En la fig. 4.4 se observa la relación entre estos tres conceptos.

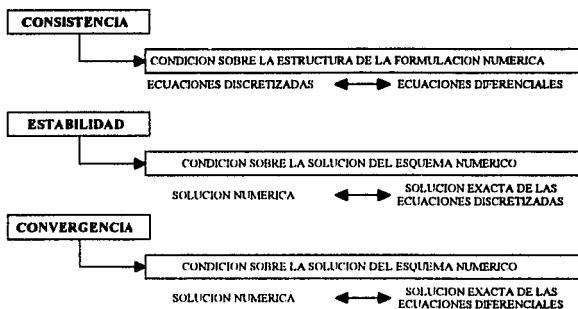


Figura 4.4 Relación entre consistencia, estabilidad y convergencia.

4.6.1. Consistencia

Una representación en diferencias finitas de un sistema de ecuaciones diferenciales se dice consistente si se muestra que la diferencia entre el sistema de ecuaciones diferenciales y su representación en diferencias finitas se desvanece cuando la malla es refinada. Es decir que las ecuaciones discretizadas deberán tender a la ecuación diferencial cuando el incremento de solución en el tiempo y en el espacio tienden a cero. Por lo tanto, un esquema es consistente si el error de truncamiento tiende a cero cuando Δt y ΔM tienden a cero, donde ΔM se define como:

$$\Delta M = \min(\Delta x_j, \Delta z_l) \quad (4.56)$$

El esquema presentado en diferencias finitas tiene un error de truncamiento de primer orden en el tiempo y segundo orden en el espacio, y de acuerdo a los desarrollos en series de Taylor el error truncamiento se tiende a cero cuando Δt y ΔM tienden a cero, por lo que el sistema ecuaciones discretizadas presentado es consistente.

4.6.2. Estabilidad

Un esquema numérico estable es aquel para el cual los errores de redondeo de cualquier fuente (redondeo, truncamiento, ...) no se les permite crecer en la secuencia de procedimientos numéricos como los procedimientos de cálculo de un paso de tiempo al siguiente. Por lo tanto un esquema de diferencias no deberá permitir que los errores crezcan indefinidamente de un paso a otro.

En este trabajo se obtuvo un sistema explícito en el tiempo, con la ventaja de ser un esquema sencillo en el que los valores de las variables de interés se obtienen a partir de los valores en una etapa de tiempo anterior a partir de ecuaciones algebraicas, pero con la desventaja con relación a los esquemas explícitos, que tienen mayores restricciones en cuanto estabilidad, que conduce a una limitación en el paso de tiempo Δt y del paso espacial ΔM es por ello que requieren una malla en el tiempo y en el espacio muy fina.

El requerimiento de estabilidad numérica para la mayoría de los métodos numéricos explícitos que resuelven sistemas de ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicos es la llamada condición de estabilidad de Courant-Friedrichs-Lewy, (Anderson et al, 1984), la cual se puede expresar para un flujo bidimensional como:

$$\text{Max} \left\{ \left| U \frac{\Delta t}{\Delta x} \right|, \left| W \frac{\Delta t}{\Delta z} \right| \right\} < 1 \quad (4.57)$$

Los mejores resultados para sistemas hiperbólicos utilizando los métodos explícitos más comunes son obtenidos con números de Courant ($\nu = U \cdot \Delta t / \Delta x$) cercanos a la unidad, (Anderson et al, 1984).

4.6.3. Convergencia

La convergencia significa que la solución de las ecuaciones en diferencias finitas aproxima la solución verdadera de las ecuaciones diferenciales teniendo las mismas ecuaciones inicial y a la frontera referida en la malla. Así, la solución numérica deberá aproximar la solución exacta de las ecuaciones diferenciales en cualquier punto y en cualquier tiempo cuando Δt y ΔM tienden a cero, esto es, cuando la malla es refinada. Generalmente se encuentra que un esquema consistente y estable es convergente.

4.7. EL PROGRAMA QUETZAL/II

Para la solución del sistema de ecuaciones se procedió a la elaboración de un código de cálculo, este código llamado **QUETZAL/II**, se apoya en la estructura del código **QUETZAL** (Ramírez, 1991), que sirve a su vez, para el estudio de flujos compresibles a altas temperaturas con modelos de turbulencia de segundo orden. A diferencia de este, **QUETZAL/II** trata con las ecuaciones de movimiento para flujos incompresibles con modelos de turbulencia de orden cero y primer orden, y considera además la ecuación de conservación de especies y los modelos de turbulencia generados por esta. Ambos programas están escritos en FORTRAN estándar.

Las ecuaciones y los modelos de turbulencia descritas en las secciones anteriores fueron introducidas en **QUETZAL/II**. La relación de las ecuaciones y la estructura del programa **QUETZAL/II** puede verse en la fig. 4.5, y el algoritmo general del programa se presenta en la fig. 4.6.

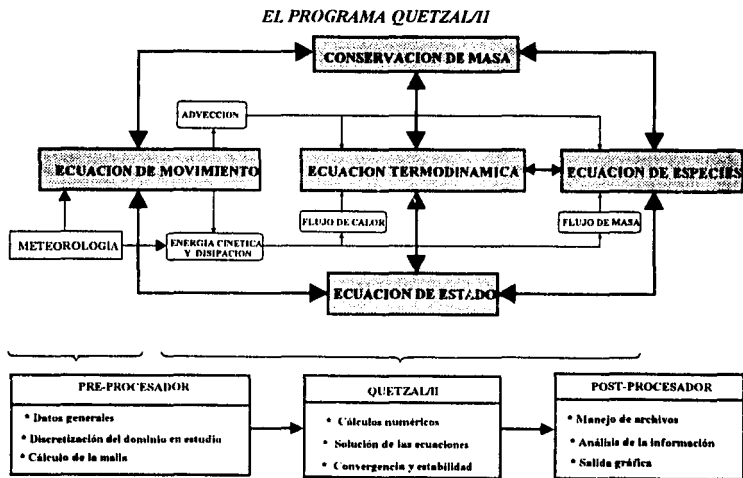


Figura 4.5 Relación entre las ecuaciones y estructura de QUETZAL/II

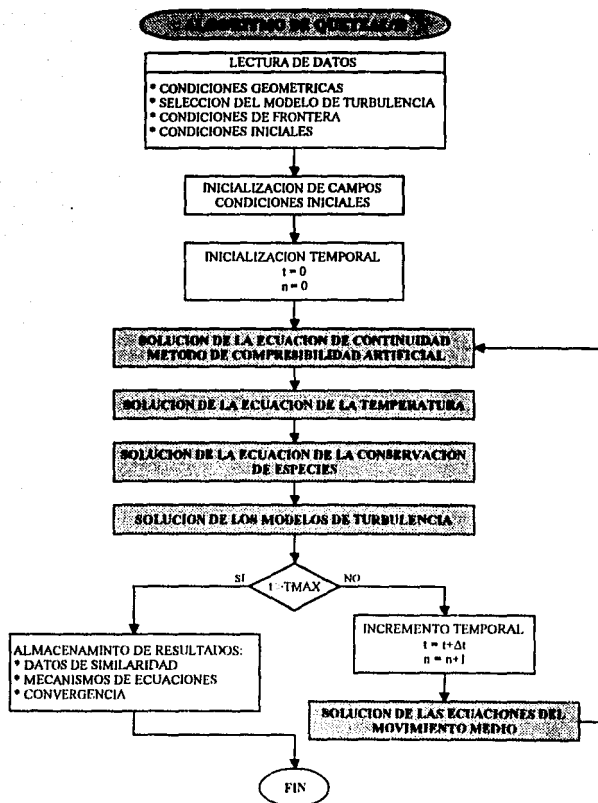


Figura 4.6 Diagrama de flujo general del programa QUETZAL/II

En la fig. 4.7 se indica el algoritmo de compresibilidad artificial para la solución de la ecuación de continuidad, que debe verificarse a cada paso de tiempo.

ALGORITMO DE QUETZALI

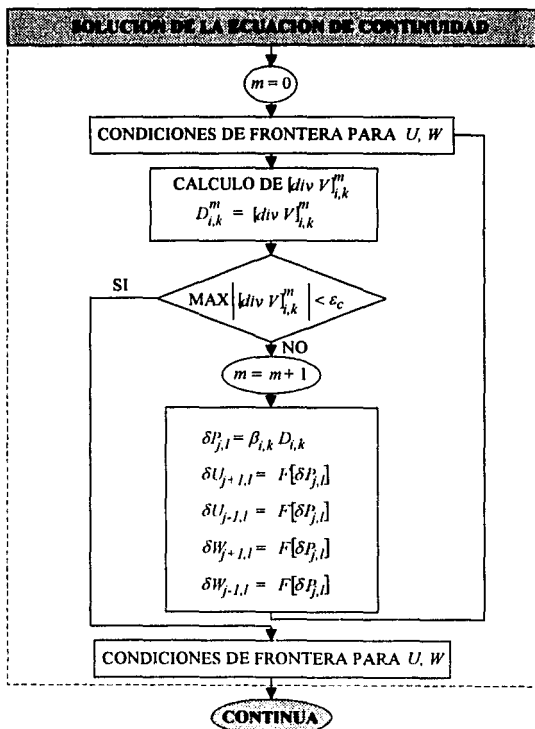


Figura 4.7 Algoritmo del método de compresibilidad artificial

La fig. 4.8 muestra el algoritmo de solución de los modelos de turbulencia, se observa también las posibles combinaciones de estos modelos de acuerdo al valor de los parámetros MDL, MTH y MTC dados en la tabla 4.1, como es de esperarse, entre mayor sea el orden de la

combinación de los modelos de turbulencia, se requerirá de mayor tiempo de cálculo y consecuentemente, un costo mayor.

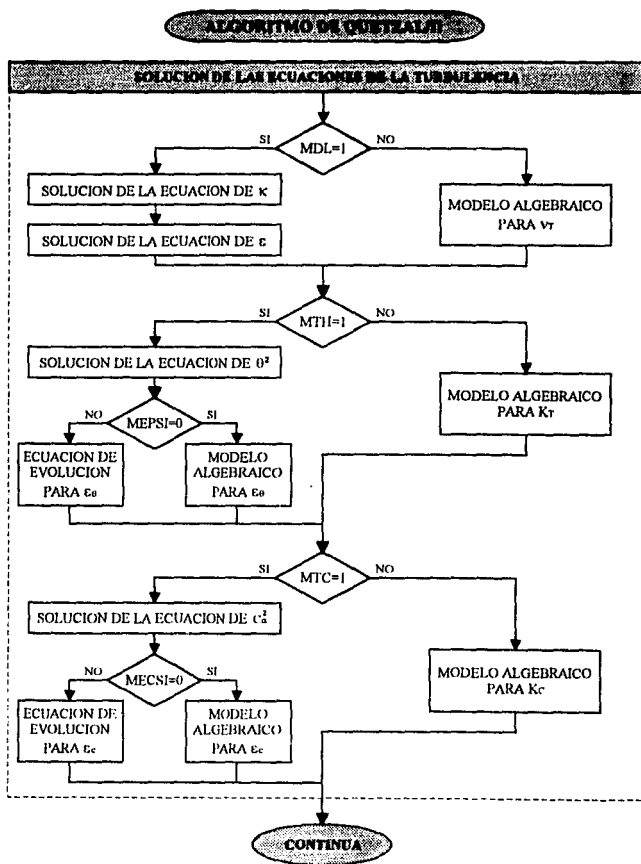


Figura 4.8 Esquema de solución de los modelos de turbulencia.

CAPITULO 5

ESTUDIO PARAMETRICO DE FLUJOS VERTICALES ATMOSFERICOS

5.1. INTRODUCCION

Las descargas de chimeneas industriales hacia la atmósfera generalmente forman jets y plumas turbulentas; donde los flujos tienen un eje alineado con el vector de gravedad (flujos verticales) y su densidad, generalmente, es diferente a la densidad en la atmósfera, así que está sujeto a fuerzas de flotación; este tipo de flujos se encuentran alejados de paredes (excepto en el origen) y son generados por fuentes puntuales de área finita. En este capítulo se describen estos tipos de flujos, a los que se les denomina *jets sumergidos*, descargados en una atmósfera aerostática; enfocándose con mayor amplitud el jet plano turbulento, ya que es el más ampliamente estudiado, y por lo tanto se encuentra en la bibliografía una mayor cantidad de datos experimentales, los que por medio de un análisis de *similitud*, pueden compararse con facilidad con otros resultados experimentales o con simulaciones numéricas; además presenta la ventaja de ser bidimensional y presentar un eje de simetría, lo cual puede ahorrar tiempo de CPU en soluciones numéricas (Cap. 6).

5.2. CLASIFICACION DE LOS JETS Y SUS CARACTERISTICAS

Existen diferentes tipos de flujos los cuales se pueden clasificar de acuerdo a la manera en que actúan las fuerzas de flotación (*buoyancy*).

Se denomina *jet puro*, *non-buoyant jet* o simplemente *jet* al flujo cuya fuente primaria de energía cinética y flujo de momentum es una caída de presión a través de un orificio (chimenea). El *jet puro* tiene la misma densidad que la del medio ambiente así que las fuerzas de *buoyancy* están ausentes.

Un flujo cuya fuente principal de energía cinética y flujo de momentum son las fuerzas de flotación, se le denomina *pluma pura* o simplemente *pluma*. La *pluma pura* no tiene momentum inicial y puede ser generada con una fuente de calor tal como una flama

Los flujos que se encuentran en la transición desde un jet a una pluma son denominados *jet portante*, *pluma forzada* o *buoyant jet*. En estos flujos la fuerza de flotación actúa en la misma dirección de la velocidad del jet en el origen. Estos flujos tienen un momentum inicial y una densidad menor a la del Medio, el cual es el caso más común en una chimenea. En la región cercana a la descarga, las fuerzas de momentum dominan al flujo así que éste se comporta como un *jet*; sigue una región intermedia donde la influencia de las fuerzas de momentum iniciales se hacen cada vez más pequeñas; y se llega a una región final, donde las fuerzas de *buoyancy* dominan completamente al flujo y éste se comporta como una *pluma*. En un medio homogéneo en calma, todo jet portante eventualmente se transforma en plumas al alejarse del origen, aún cuando estos tengan un momentum inicial importante.

Cuando las fuerzas de flotación actúan en la dirección opuesta de la velocidad del jet en el origen, el flujo es llamado *jet portante negativo* o *buoyant jet negativo*. Un *buoyant jet negativo* se crea por la descarga del flujo en la dirección vertical cuya densidad es mayor a la del medio, en este caso el jet pierde continuamente momentum debido a las fuerzas negativa de flotación y eventualmente cae el flujo.

El movimiento de los tipos de flujo descritos anteriormente son, en general, gobernados por fuerzas de inercia, viscosas y de Arquímedes (*buoyancy*). El carácter local del flujo es determinado por la magnitud de estas fuerzas en cada punto, y el carácter global, el cual nos interesa, está determinado por la importancia de las fuerzas en la fuente y por las condiciones ambientales. La influencia respectiva de las contribuciones inerciales, viscosas y de efectos de flotabilidad están caracterizadas por los parámetros descritos a continuación

- El número de Reynolds representa la razón entre fuerzas de inercia y fuerzas viscosas, que para las condiciones a la salida de la chimenea se escribe:

$$\text{Re} = \frac{\text{fuerzas de inercia}}{\text{fuerzas viscosas}} = \frac{W_{\phi} D_{\phi}}{\nu} \quad (5.1)$$

Este número es de suma importancia para determinar si un flujo es laminar o turbulento. El valor crítico en el que un jet es puramente laminar en el aire es de $\text{Re} = 50$ (Sini, 1986).

- El número de Grashof representa la razón entre las fuerzas de flotación y las fuerzas de Arquímedes, y se escribe:

$$\text{Gr} = \frac{\text{fuerzas de flotación}}{\text{fuerzas viscosas}} = \frac{\beta g D_{\phi}^3 (T_{\phi} - T_{N_{\phi}})}{\nu^2} \quad (5.2)$$

En jets, sólo el número de Reynolds es de influencia, y en plumas, sólo el número de Grashof. En jets y plumas turbulentas se tienen números elevados de Reynolds y Grashof respectivamente, así que las fuerzas viscosas son despreciable en estos flujos (Chen y Rodi, 1980). Las mismas consideraciones son ciertas para jets portantes, en donde estos números indican cuando el flujo es laminar o cuando es turbulento, y si es inicialmente laminar, a que distancia de la fuente se espera que ocurra la transición a la turbulencia.

- El número de Froude densimétrico representa la razón entre las fuerzas de inercia y las fuerzas de flotación:

$$\text{Fr} = \frac{\text{fuerzas de inercia}}{\text{fuerzas de flotación}} = \frac{W_{\phi}^2}{\beta g D_{\phi} (T_{\phi} - T_{N_{\phi}})} \quad (5.3)$$

El número de Froude puede escribirse también de la siguiente forma:

$$\text{Fr} = \frac{\text{Re}^2}{\text{Gr}} = \frac{1}{\text{Ri}} \quad (5.4)$$

donde Ri representa el número de Richardson. El número de Froude es el parámetro más importante para jets portantes turbulentos, como puede verse en la tabla (5.1)

<i>Jet puro (non-buoyant jet)</i>	$Fr \rightarrow \infty$
<i>Pluma pura</i>	$Fr \rightarrow 0$
<i>Jet portante (pluma forzada)</i>	$Fr > 0$
<i>Jet portante negativo</i>	$Fr < 0$

Tabla 5.1 Números de Froude para los diferentes tipos de jets.

- Los números de Prandtl y de Schmidt son una característica del fluido y están definidos por las siguientes expresiones:

$$Pr = \frac{\nu}{k} = \frac{Cp\mu}{k} = \frac{\text{difusividad de momentum}}{\text{difusividad térmica}} \quad (5.5)$$

$$Sc = \frac{\nu}{D} = \frac{\mu}{\rho D} = \frac{\text{difusividad de momentum}}{\text{difusividad molecular}} \quad (5.6)$$

5.3. JET PLANO TURBULENTO

Un jet plano es un jet puro que se encuentra en dos dimensiones e incluye un eje de simetría, fig. (5.1). Un jet de este tipo llega a ser completamente turbulento con números de Reynolds relativamente pequeños, el valor crítico en el que un jet plano es puramente laminar es de $Re=50$ (Sini, 1986). Un jet plano turbulento está constituido por tres regiones: una región inicial, una región de transición y una región de flujo completamente desarrollado. La fig. (5.1) muestra las zonas características de un jet plano turbulento simétrico, se pueden observar también los parámetros que caracterizan estos flujos, que son principalmente: D_ϕ que es el diámetro a la salida de la chimenea, z_ϕ que indica el origen ficticio de similitud, z_D que es un parámetro adimensional que sirve para identificar las diferentes zonas del flujo y puede definirse por las siguiente expresión:

$$z_D = \frac{z - z_\phi}{D_\phi} \quad (5.7)$$

y por último la línea L_E llamada línea de expansión, que determina o indica la evolución del flujo.

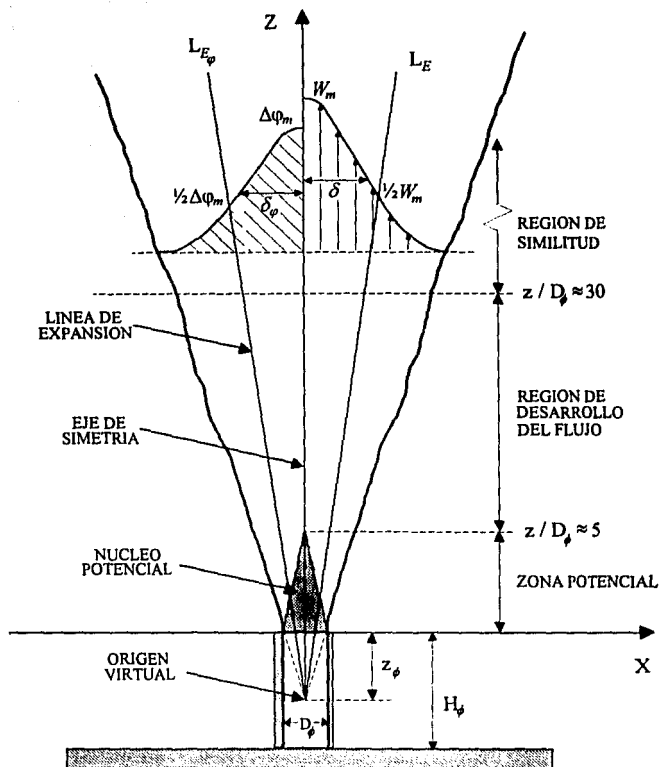


Figura 5.1 Esquema de definición de un jet plano turbulento simétrico.

5.3.1. Identificación de las zonas de un jet plano turbulento

En la región inicial, los bordes de salida de la chimenea generan capas de mezclado turbulento las cuales se extienden hasta alcanzar, sobre su frontera interior, el eje del flujo denominado eje de simetría. A partir de este punto, las capas de mezclado se fusionan para formar

al jet propiamente dicho. La región interna del flujo que separa las dos capas de mezcla en cada lado del punto de fusión es, en general, mas o menos turbulento y se le denomina *núcleo potencial* (fig. 5.1). La velocidad en el núcleo potencial es igual a la velocidad de salida cuando se considera una velocidad de salida uniforme. La longitud del núcleo potencial depende de la intensidad de la turbulencia para la sección de salida, esta será del orden de $6D_\phi$ cuando el nivel de turbulencia es muy débil dentro de la región central de la sección de emisión (Chen y Rodi, 1980), pero puede ser significativamente reducido en caso contrario. La longitud del núcleo potencial depende igualmente de la geometría del dispositivo de emisión.

Se considera que el jet plano turbulento evoluciona linealmente a partir de un origen virtual u origen de similitud, fig. (5.1), cuya posición vertical z_ϕ depende de la longitud del núcleo potencial y, por consecuencia, de la geometría y de la intensidad de la turbulencia para la sección de salida.

En la región intermedia, al final del núcleo potencial, el flujo se ajusta a la presencia de una línea de simetría y se desarrolla hasta que el flujo sea completamente establecido.

El conjunto de resultados experimentales obtenidos para el jet plano turbulento muestran que a partir de una sección situada en $z/D \approx 10 - 15$, el flujo está plenamente desarrollado y evoluciona en similitud; región de similitud en la fig. (5.1). En esta región los perfiles en similitud de la velocidad, temperatura y concentración evolucionan linealmente.

5.3.2. Análisis de similitud

En la región de *similitud*, una velocidad, una temperatura o concentración y una escala de longitud son suficientes para representar funciones adimensionales de las cantidades medias como funciones de una variable geométrica únicamente.

Si se selecciona, en una determinada altura z , la velocidad máxima¹ vertical $W_m(z)$ como la escala de velocidad, la desviación máxima de los escalares $\Delta\phi_m(z)$, (donde $\Delta\phi$ representa indistintamente la temperatura $\Delta T_m(z)$ o la concentración de especies $C_m(z)$ como la escala de temperatura o de concentración, y la distancia entre el eje de simetría donde se encuentra la velocidad máxima y el punto donde la velocidad vale la mitad de la velocidad máxima, denominada *semilongitud* del jet $\delta(z)$, como escala de longitud, fig. (5.1). entonces en la región de similitud puede expresarse:

$$W(x, z) = W_m f(\eta) \quad (5.8)$$

¹Dada una atmósfera en reposo, la simetría vertical del flujo implica que en el eje vertical de simetría (subíndice ϕ) se encuentran las cantidades medias máximas (subíndice m).

en donde:

$$\eta = \frac{x_i - x_\xi}{\delta} \quad (5.9)$$

donde x_ξ representa la posición horizontal en el eje de simetría, y η es llamada *variable de afinidad*, como es de esperarse si δ está definida para cuando $W = \frac{1}{2}W_m(z)$, entonces η deberá tener un valor máximo de 2.

De la misma forma la temperatura o la concentración de especies representada por $\Delta\varphi$, pueden expresarse como:

$$\Delta\varphi = \Delta\varphi_m f(\eta_\varphi) \quad (5.10)$$

donde:

$$\eta_\varphi = \frac{x_i - x_\xi}{\delta_\varphi} \quad (5.11)$$

De igual manera las cantidades turbulentas se pueden expresar en la forma:

$$\overline{u_i u_j} = W_m^2 f(\eta) \quad (5.12)$$

$$\overline{u_i \varphi} = W_m \Delta\varphi f(\eta) \quad (5.13)$$

Introduciendo las relaciones anteriores en las ecuaciones medias de continuidad, momentum, energía y especies, se obtienen las relaciones de similitud (Chen y Rodi, 1980), donde para un jet plano turbulento puede escribirse:

- Para la velocidad:

$$\frac{d\delta}{dz} = cte. \quad (5.14)$$

$$\frac{W_m}{W_\phi} = A_W z_D^{-1/2} \quad (5.15)$$

- Para la temperatura o concentración:

$$\frac{d\delta_\varphi}{dz} = cte. \quad (5.16)$$

$$\frac{\Delta \varphi_m}{\Delta \varphi_\phi} = A_{\varphi D} z^{-1/2} \quad (5.17)$$

Las ecuaciones anteriores muestran que la evolución del flujo en la región de similitud es lineal ($\delta(z) \propto z$), aunque sea diferente la rapidez de evolución para la velocidad o para los escalares. Las ecs. (5.15) y (5.17) representan la evolución vertical sobre la línea de simetría de la velocidad y de la temperatura o concentración; en estas ecuaciones A_W y A_φ son constantes empíricas dadas en la tabla 5.2.

Constante de similitud	Jet Plano Turbulento ($Fr \approx \infty$)
$d\delta/dz$	0.10
A_W	2.4
B_W	62
$d\delta_\varphi/dz$	0.14
A_φ	2.0
B_φ	35

Tabla 5.2 Constantes de similitud de un jet plano turbulento (Chen y Rodi, 1980)².

Los perfiles horizontales de velocidad, temperatura o concentración, dentro de la región de similitud, son aproximados frecuentemente por perfiles gaussianos, de esta manera, las ecuaciones (5.8) y (5.10) se pueden escribir como:

$$\frac{W}{W_m} = \exp(-B_W \eta^2) \quad (5.18)$$

$$\frac{\Delta \varphi}{\Delta \varphi_m} = \exp(-B_\varphi \eta^2) \quad (5.19)$$

donde B_W y B_φ son constantes empíricas, los valores para un jet plano turbulento se encuentran en la tabla 5.2.

²Los valores de las constantes son válidos cuando $\rho_N/\rho_\phi \approx 1$.

5.3.3. Obtención de la línea de expansión y el origen de similitud

La línea de expansión L_E , esquematizada en la fig. 5.1, y que nos indica la evolución del jet, puede obtenerse de la siguiente manera.

Para cada velocidad máxima (W_m) sobre el eje de simetría, dividida por la velocidad máxima de emisión (W_ϕ), se calcula la semilongitud del jet (δ) para la cual la velocidad vale la mitad de su valor sobre el eje. La línea de expansión debe de pasar por cada valor de la semilongitud en la zona del flujo desarrollado, ésta se puede calcular de la siguiente manera:

$$L_E = \frac{1}{l_2 - l_1} \sum_{l=l_1}^{l_2} \left(\frac{\delta_{l+1} - \delta_l}{z_{l+1} - z_l} \right) \quad (5.20)$$

donde l representa un subíndice espacial en la región de similitud.

Por otra parte, el origen ficticio de similitud se puede calcular mediante la expresión:

$$z_\phi = \frac{1}{l_2 - l_1} \sum_{l=l_1}^{l_2} \left(\frac{z_l - \delta_l}{L_E} \right) \quad (5.21)$$

Los valores experimentales del origen de similitud, reportados por varios autores, se encuentran entre -5 y 5 (Sini, 1986).

Considerando todas las características de un jet plano turbulento, descritas anteriormente, se presenta la siguiente tabla que permite una rápida revisión de tales características.

Características de un Jet Plano Turbulento	Similitud para la velocidad	Similitud para la temperatura o concentración
Evolución del flujo	$d\delta/dz = 0.1$	$d\delta_\phi/dz = 0.14$
Perfiles verticales sobre el eje de simetría	$\frac{W_m}{W_\phi} = 2.4 z_D^{-1/2}$	$\frac{\Delta \varphi_m}{\Delta \varphi_\phi} = 2.0 z_D^{-1/2}$
Perfiles horizontales en una determinada altura z_D	$\frac{W}{W_m} = \exp(-62 \eta^2)$	$\frac{\Delta \varphi}{\Delta \varphi_m} = \exp(-35 \eta_\phi^2)$

Tabla 5.3 Características de un jet plano turbulento en la región de similitud

CAPITULO 6

ESTUDIO DE FLUJOS TURBULENTOS EN UNA ATMOSFERA ADIABATICA

6.1. INTRODUCCION

En este capítulo se presenta el estudio de un jet plano turbulento emitido hacia una atmósfera adiabática. Se define el dominio de estudio y su discretización; posteriormente se presentan las condiciones iniciales, de emisión y a la frontera así como los perfiles naturales de presión y temperatura considerados en este estudio. Finalmente, se presentan los resultados obtenidos tanto para los campos dinámicos, térmicos y de la concentración de un contaminante pasivo como para los mecanismos que intervienen en el transporte del flujo en estudio; los resultados son comparados con mediciones experimentales de diferentes autores y con otras simulaciones numéricas encontradas en la literatura. El modelo de turbulencia utilizado en la simulación fue el modelo κ - ϵ .

6.2. CASO DE ESTUDIO

Con el objeto de validar el modelo fisico-matemático desarrollado en capítulos anteriores, se simula con el programa QUETZAL/II un jet plano turbulento emitido verticalmente desde una fuente puntual, en una atmósfera uniforme y en reposo, como el descrito en la sección 5.3.

Se considera la emisión desde una chimenea cuyo diámetro es $D_{\phi}=1$ m. Las condiciones de emisión se encuentran en la tabla 6.1, donde se observa que el número de Reynolds es suficientemente elevado para considerar que el flujo es completamente turbulento. En los cálculos se ha despreciado la influencia de las fuerzas de flotación sobre el campo dinámico, es por ello que, aunque el incremento de temperatura en la salida sea de 20°K , el número de Froude se considere grande en la tabla 6.1, y por lo tanto el flujo se comporta como un jet puro.

W_{ϕ}	ΔT_{ϕ}	$C\alpha_{\phi}$	Re	Fr
5 m/s	20 °K	5 %	408 993	$\sim \infty$

Tabla 6.1 Condiciones de emisión

Los resultados obtenidos de la simulación son comparados con resultados experimentales de diferentes autores, a partir del análisis de similaridad descrito en la sección 5.3.2.

El dominio de estudio, la emisión y los perfiles naturales iniciales son discutidos en las siguientes secciones.

6.2.1. Definición del dominio

La fig. 6.1a muestra un dominio de estudio completo con una fuente de emisión o chimenea; en donde las zonas sombreadas representan las fronteras, tanto físicas (paredes, terreno, ...), como impuestas (fronteras libres). Si se considera el caso de un jet plano turbulento, el cual es simétrico con un eje de simetría axial, entonces, el dominio de estudio se puede simplificar considerando para el cálculo sólo la mitad del dominio, fig. 6.1b, en donde una de las fronteras representa la línea de simetría. En la fig. 6.1b se observa también, que la frontera llamada frontera ficticia no se encuentra al nivel del piso, sino al nivel de la salida de la chimenea; esto permite reducir aun más el dominio, con el consecuente ahorro del tiempo de cómputo.

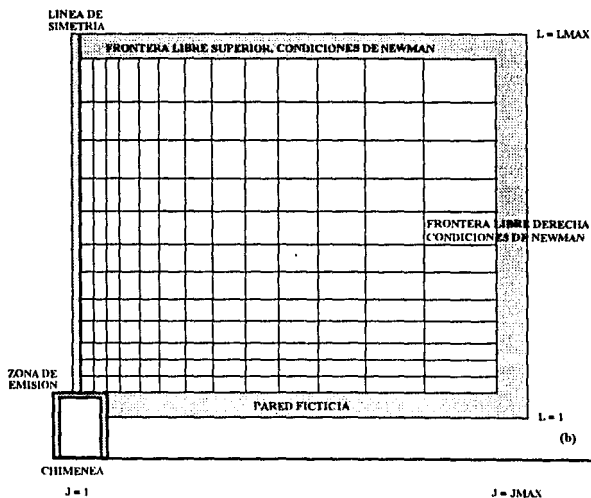
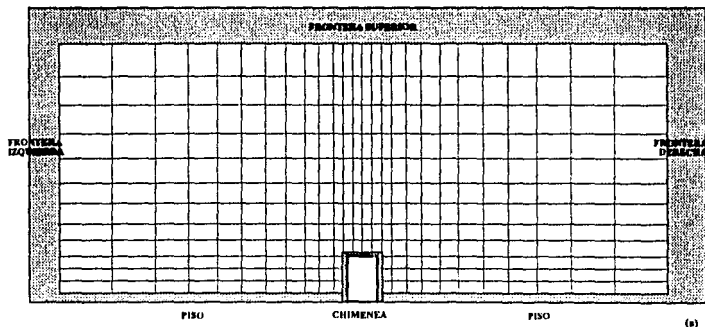


Figura 6.1 Dominio de estudio: (a) vista general, (b) dominio reducido

La discretización del dominio de estudio es por medio de la malla tipo MAC (sección 4.2), en la forma presentada en la fig. 6.2. La malla mostrada en esta figura es la malla de cálculo; por el centro de las celdas de esta malla, pasa una malla fina que representa la malla de interpolación,

introducida para aumentar el orden de exactitud de diferentes esquemas de solución numérica (sección 4.2). En la dirección z , las celdas de la malla, crecen 10% con respecto con la celda inmediata anterior; en la dirección x , se identifican dos secciones: arriba de la chimenea en donde la malla de cálculo es uniforme, y después de la chimenea donde las celdas crecen 10% con respecto con la celda inmediata anterior. La consideración de una malla de este tipo obedece a que los gradientes de evolución de las cantidades medias y turbulentas son más fuertes cerca de la chimenea, y por lo tanto se requiera una malla más fina, mientras que en las zonas alejadas de la fuente los gradientes de las cantidades medias y turbulentas son de menor intensidad y por ello se pueden utilizar celdas de mayor tamaño, con lo que se pueden considerar dominios de mayores dimensiones con tiempos de cómputo menores.

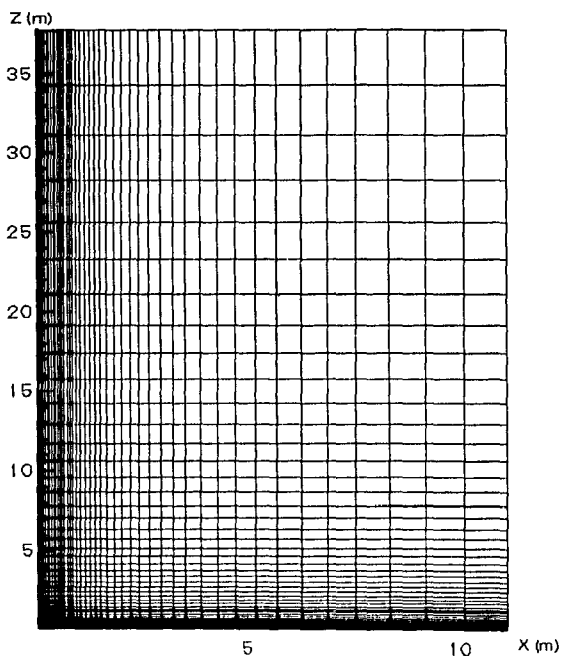
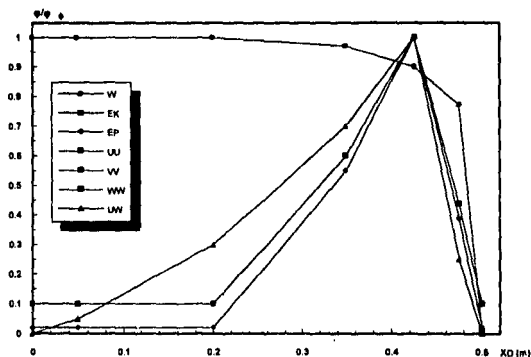


Figura 6.2 Malla de cálculo

6.2.2. Perfiles de emisión

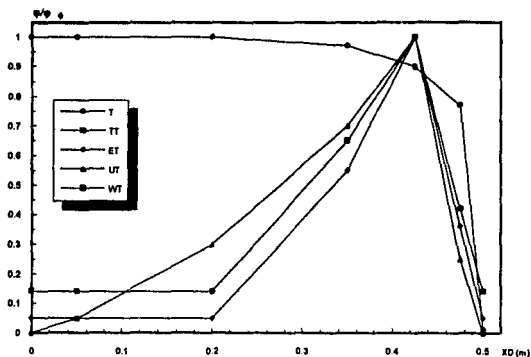
Los perfiles de emisión considerados en este trabajo, para un jet plano turbulento (Ramírez, 1991), para la velocidad y cantidades turbulentas dinámicas se muestran en forma adimensional en la fig. 6.3. Los perfiles de emisión (subíndice E) son adimensionalizados con los valores máximos de emisión (subíndice ϕ). En la fig. 6.3 se muestran también los valores máximos de emisión, considerados para este estudio.



W_{ϕ}	5.0 m/s
EK_{ϕ}	0.575
EP_{ϕ}	0.1325
UU_{ϕ}	0.1
WW_{ϕ}	0.3833
VV_{ϕ}	0.1
UW_{ϕ}	0.2

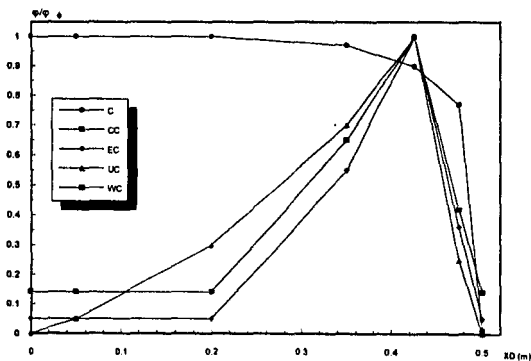
Figura 6.3 Perfiles dinámicos adimensionales de emisión

De la misma forma que para la dinámica, en las figs. 6.4 y 6.5 se presentan los perfiles adimensionales de la térmica y de especies respectivamente. Los perfiles adimensionales de emisión de la temperatura y de la concentración de especies así como de las cantidades turbulentas respectivas, son iguales, dado el comportamiento similar de ambos escalares.



T_{ϕ}	20.0 °K
TT_{ϕ}	0.6
ET_{ϕ}	0.15
UT_{ϕ}	0.32
WT_{ϕ}	0.42

Figura 6.4 Perfiles térmicos adimensionales de emisión



C_{ϕ}	0.05
CC_{ϕ}	0.0015
EC_{ϕ}	0.00038
UC_{ϕ}	0.0008
WC_{ϕ}	0.00105

Figura 6.5 Perfiles adimensionales de emisión del contaminante pasivo

6.3. CONDICIONES INICIALES

Las condiciones iniciales se aplican en el inicio del cálculo cuando $t=0$ en todo el dominio de estudio. Así, dada una atmósfera en reposo se cumple que en todo el dominio la velocidad sea cero:

$$\overline{U}_{j,l} = 0 \quad \overline{W}_{j,l} = 0 \quad (6.1)$$

Para la presión y la temperatura se consideran los perfiles naturales de una atmósfera aerostática adiabática, definida por las ecuaciones (2.63)-(2.65), las cuales se pueden reescribir para la presión en la forma:

$$P_N(z) = P_{SOL} + z \cdot \frac{\partial P_N}{\partial z} \quad (6.2)$$

y de la ley de los gases perfectos:

$$T_N(z) = \frac{P_N(z)}{\rho_N R_N} \quad (6.3)$$

donde:

P_{SOL} = presión en el piso ($z=0$): $P_{SOL}=1$ Pa.

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -11.4 \text{ Pa m}^{-1}$$

$$\rho_N \approx 0.86 \text{ m}^3 \text{ Kg}^{-1}$$

$$R_N = \text{constante del aire} = 273 \text{ J K}^{-1} \text{ Kg}^{-1}$$

La fig. 6.6 muestra los perfiles naturales de presión y temperatura, calculados con las ecuaciones anteriores, para una atmósfera aerostática.

En este estudio se consideró que inicialmente no se encontraba en la atmósfera el contaminante pasivo, por lo que en $t=0$ la concentración en todo el dominio es nula:

$$\overline{C}_{\alpha,j,l} = 0 \quad (6.4)$$

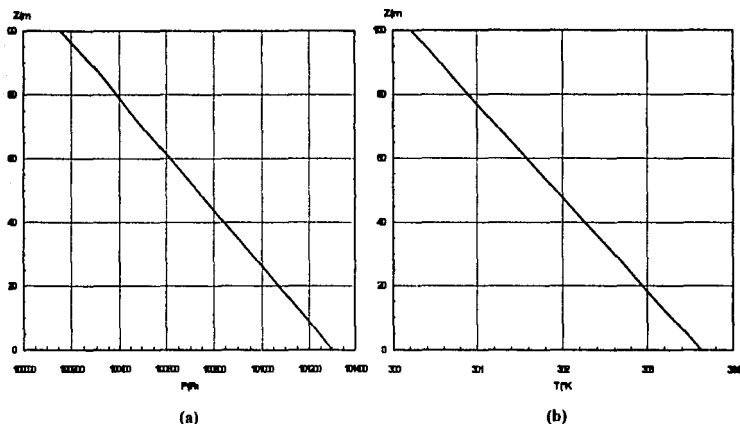


Figura 6.6 Perfiles naturales de presión (a) y temperatura (b) en una atmósfera adiabática

Dada una atmósfera en reposo la turbulencia es prácticamente inexistente, lo cual es inaceptable en la solución numérica. En este trabajo se supone que la atmósfera es homogénea y ligeramente turbulenta, entonces se impone como condición inicial en todo el dominio los valores mínimos de los perfiles de emisión de todas las cantidades turbulentas, (Ramírez, 1991).

6.4. CONDICIONES DE FRONTERA

Las condiciones de frontera se introducen en celdas ficticias que se encuentran en los bordes del dominio de estudio, representadas con zonas sombreadas en la fig. 6.1b. En las siguientes secciones se explicarán las diferentes fronteras que limitan el dominio de cálculo en estudio.

6.4.1. Condiciones de frontera para la línea de emisión

La línea de emisión del flujo está dada como una condición de frontera como se muestra en la Fig. 6.7. En esta frontera se imponen los perfiles de emisión (sección 6.3.2) denotados por el subíndice (L) en cada paso de tiempo.

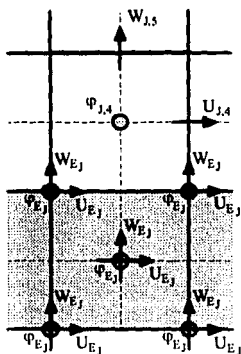


Figura 6.7 Condiciones de frontera para la línea de emisión.

Condiciones de emisión:

- Velocidad horizontal:
 $U(J,KB) = U_E(J) = 0$
- Velocidad vertical:
 $W(J,KB) = W_E(J)$
- Temperatura media:
 $T(J,KB) = T_M(J,KB) + T_E(J)$
- Concentración media:
 $C_\alpha(J,KB) = C_{\alpha E}(J)$
- Cantidades turbulentas:
 $\phi(J,KB) = \phi_E(J)$

donde KB representa el subíndice espacial que define la posición de emisión en la dirección z.

Las diferentes variables en la línea de emisión están definidas en la dirección horizontal por el índice $J = JB1, \dots, JB2$; en la que JB1 se encuentra en el centro de la salida de la chimenea y JB2 es el límite derecho de la chimenea. La extensión de esta frontera es $D_{\phi}/2$.

6.4.2. Condiciones de frontera para la línea de simetría

Sobre el eje del jet, línea de simetría del flujo, se tienen las condiciones de frontera mostradas en la fig. 6.8.

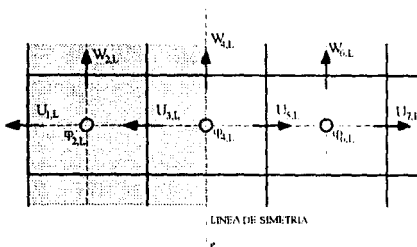


Figura 6.8 Condiciones de frontera para la línea de simetría.

Condiciones en la línea de simetría:

- Velocidad horizontal:
 $U_x = 0$
- Velocidad vertical, y escalares:
 $\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_x = 0$

donde la línea de simetría (subíndice ϕ) está definida en (4,L), en los límites: $L = 2$, hasta $L_{MAX}-2$

Dada la simetría del flujo, se consideran además de las condiciones en la línea de simetría (ϕ), las siguientes condiciones en la frontera de la línea de simetría, definida en la zona oscura de la fig. 6.8:

- Velocidad horizontal:

$$U(1,L) = -U(7,L)$$

$$U(2,L) = -U(6,L)$$

$$U(3,L) = -U(5,L)$$
- Escalares:

$$\phi(2,L) = \phi(6,L)$$

$$\phi(3,L) = \phi(5,L)$$
- Velocidad vertical:

$$W(2,L) = W(6,L)$$

$$W(3,L) = W(5,L)$$
- Cantidades turbulentas del tipo $\overline{u\phi}$:

$$\overline{u\phi}(2,L) = -\overline{u\phi}(6,L)$$

$$\overline{u\phi}(3,L) = -\overline{u\phi}(5,L)$$

6.4.3. Condiciones límites para la frontera libre superior

Las condiciones para esta frontera son de tipo Newman, como se muestra en la fig. 6.9.

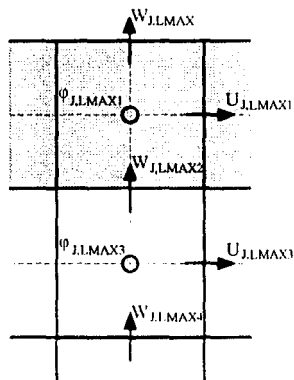


Figura 6.9 Frontera libre superior.

Condiciones de Newman:

- Velocidad:

$$\frac{\partial \overline{U}}{\partial z} = 0 \quad \frac{\partial \overline{W}}{\partial z} = 0$$
- Temperatura y concentración media:

$$\frac{\partial \overline{T}}{\partial z} = 0 \quad \frac{\partial \overline{C}_a}{\partial z} = 0$$
- Cantidades turbulentas:

$$\frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x} = 0$$

Estas condiciones están definidas en los límites $J=2, \dots, JMAX1$ en la dirección horizontal y en $L=L,MAX2, \dots, LMAX$ en la dirección vertical (fig. 6.9)

En la fig. 6.9 todos los escalares (incluyendo la temperatura y la concentración) son representados con ϕ . Dadas las condiciones de Newman, para este caso las condiciones de frontera son

- Velocidad horizontal:

$$U(J, LMAX1) = U(J, LMAX3)$$

$$U(J, LMAX2) = U(J, LMAX3)$$
- Temperatura o concentración media:

$$\varphi(J, LMAX1) = \varphi(J, LMAX3)$$

$$\varphi(J, LMAX1) = \varphi(J, LMAX3)$$
- Velocidad vertical:

$$W(J, LMAX) = W(J, LMAX2)$$

$$W(J, LMAX1) = W(J, LMAX2)$$
- Cantidades turbulentas:

$$\varphi(J, LMAX1) = \varphi(J, LMAX3)$$

$$\varphi(J, LMAX1) = \varphi(J, LMAX3)$$

6.4.4. Condiciones limites para la frontera libre derecha.

Las condiciones para esta frontera son de tipo Newman, como se muestra en la Fig. 6.10.

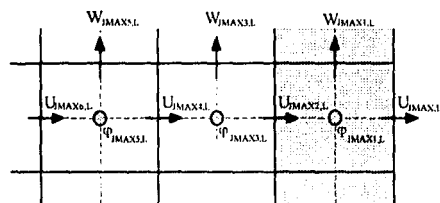


Figura 6.10 Frontera libre derecha

Condiciones de Newman

- Velocidades:

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial x} = 0 \quad \frac{\partial \bar{W}}{\partial x} = 0$$
- Escalares:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0$$

Los límites de la frontera libre derecha son, en la dirección horizontal: $J = JMAX2, \dots, JMAX$, y en la dirección vertical: $L = 2, \dots, LMAX1$ (fig. 6.10). Considerando las condiciones de Newman, se tienen las siguientes condiciones de la frontera libre derecha:

- Velocidad horizontal:

$$U(JMAX, L) = U(JMAX2, L)$$

$$U(JMAX1, L) = U(JMAX2, L)$$
- Temperatura o concentración media:

$$\varphi(JMAX1, L) = \varphi(JMAX3, L)$$

$$\varphi(JMAX2, L) = \varphi(JMAX3, L)$$
- Velocidad vertical:

$$W(JMAX1, L) = W(JMAX3, L)$$

$$W(JMAX2, L) = W(JMAX3, L)$$
- Cantidades turbulentas:

$$\varphi(JMAX1, L) = \varphi(JMAX3, L)$$

$$\varphi(JMAX2, L) = \varphi(JMAX3, L)$$

6.4.5. Condiciones de frontera para la pared ficticia

Las condiciones para esta frontera son de deslizamiento. Estas condiciones varían de las condiciones de Dirichlet para paredes físicas (Sini, 1986), en que en este caso la velocidad

horizontal no es cero en la frontera, lo cual simula una pared en la cual el flujo se desliza (pared completamente lisa). En la Fig. 6.11 se muestra esquemáticamente esta frontera.

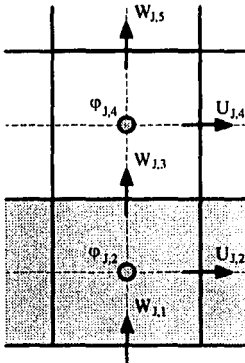


Figura 6.11 Condiciones de frontera para la pared ficticia.

Los límites de esta frontera son, en la dirección horizontal: $J=JB2+1, \dots, JMAX1$, y en la dirección vertical: $L=1, \dots, 3$. Dadas las condiciones de la pared con deslizamiento, se consideran las siguientes condiciones de frontera:

- Velocidad horizontal:

$$U(J,3) = U(J,4)$$

$$U(J,2) = U(J,4)$$

- Temperatura o concentración media:

$$\varphi(J,3) = \varphi(J,4)$$

$$\varphi(J,2) = \varphi(J,4)$$

Condiciones de pared con deslizamiento:

- Velocidad horizontal:

$$\frac{\partial U}{\partial z} = 0$$

- Velocidad vertical:

$$W=0$$

- Temperatura y concentración media:

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad \frac{\partial C_a}{\partial z} = 0$$

- Cantidades turbulentas:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0$$

- Velocidad vertical:

$$W(J,3) = 0$$

$$W(J,1) = 0$$

- Cantidades turbulentas:

$$\varphi(J,3) = \varphi(J,4)$$

$$\varphi(J,2) = \varphi(J,4)$$

6.5. PRUEBA DE ESTACIONARIDAD

La validación del modelo se efectúa por medio de la comparación con datos experimentales cuando el flujo se encuentra en estado estacionario. La fig. 6.12 muestra la convergencia de las cantidades medias en el cálculo del cual se obtuvieron los mejores resultados. El tiempo simulado fue de 60s, con un paso de tiempo de 1×10^{-4} ; además la corrida se realizó en doble precisión. En esta figura se observa que la convergencia es buena. En esta misma figura se presenta una ampliación de la convergencia de la concentración la cual presenta oscilaciones de menor intensidad que la temperatura y que la velocidad, sin embargo la convergencia de las cantidades medias es similar.

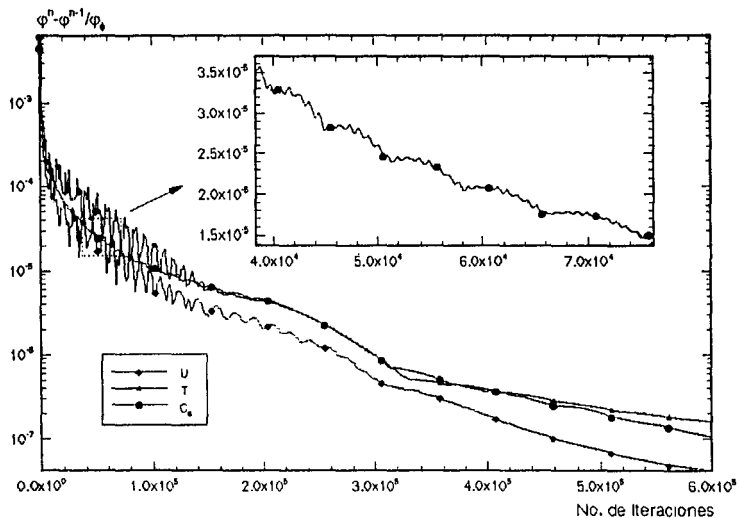


Figura 6.12 Curva de convergencia de las cantidades medias

Se practicaron diversas corridas del programa de cómputo con diferentes intervalos de tiempo y se analizaron los resultados en varios tiempos. Se encontró que era necesario un paso de tiempo

de 1×10^{-4} para obtener resultados confiables; se percibió además que a 60s de tiempo simulado el flujo estaba completamente establecido en régimen permanente. Una corrida de estas características ocupa un tiempo de cómputo de aproximadamente 48 hrs. en una computadora Workstation, como la que se utilizó en este trabajo.

Por otra parte, en la fig. 6.13 se presenta la convergencia del método de compresibilidad artificial en donde se muestran mil iteraciones del método en la primera y en la última iteración. Esta gráfica demuestra como al final del cálculo la ecuación se cumple satisfactoriamente y no se requieren más que de algunas iteraciones del método ya que se utiliza un parámetro que permite detener este método, el criterio utilizado fue de 10^{-5} .

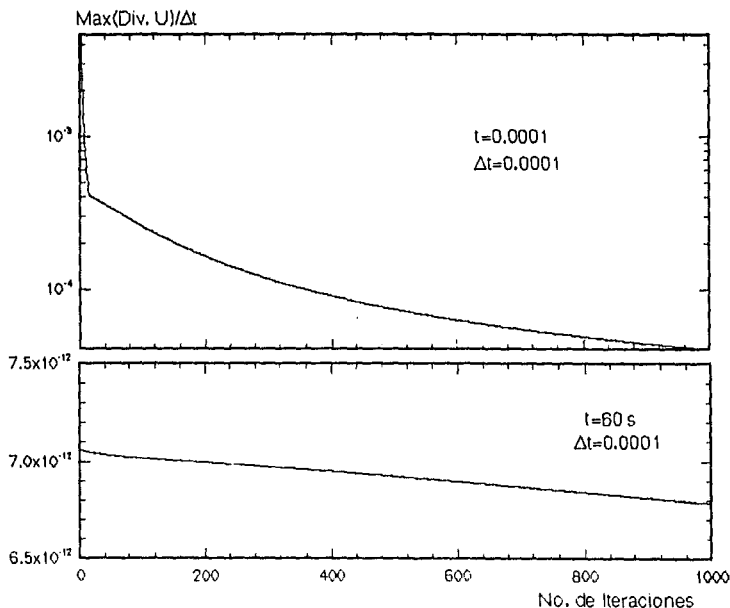


Figura 6.13 Convergencia del método de compresibilidad artificial

De lo anterior, se considera que se obtuvieron resultados adecuados en régimen permanente.

6.6. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Los resultados obtenidos son comparados con diversos datos experimentales encontrados en la literatura, a partir de las variables de similitud. En este trabajo se utilizó el modelo de turbulencia de primer orden (sección 3.3).

Dada la simulación de un jet plano turbulento, el flujo evoluciona en similitud obteniéndose las líneas de expansión mostradas en la fig. 6.14. Se observa que el comportamiento de las líneas de expansión obtenidas es correcto, de acuerdo con la bibliografía. La pendiente dinámica experimental es aproximadamente del 10% (Chen y Rodi, 1980) mientras que la obtenida por la simulación es de 9%. Chen y Rodi (1980) reportan que para un escalar inerte la pendiente de la línea de expansión es aproximadamente de 14% y en este caso se obtuvo una pendiente del 13% para la térmica y del 11.5% para las especies; en la literatura suelen encontrarse valores que oscilan entre el 12% y el 14% para estas pendientes.

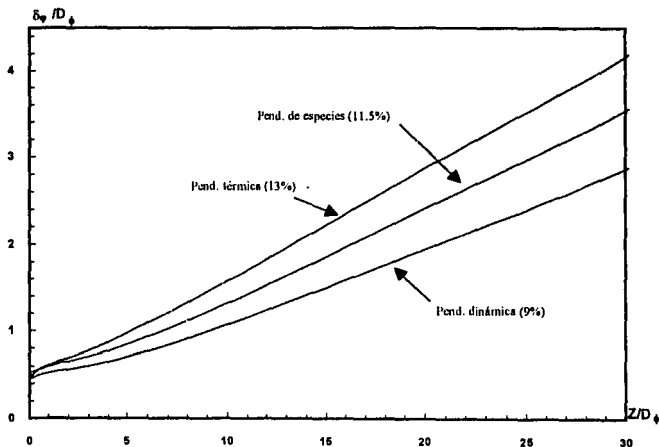


Figura 6.14 Evolución de las líneas de expansión para los campos de velocidad, temperatura y especies.

6.6.1. Resultados para el campo dinámico

Los resultados del campo dinámico fueron obtenidos con el modelo de turbulencia de tipo κ - ϵ y utilizando las constantes empíricas del modelo estándar (tabla 3.1).

a) *Velocidad media*

La fig. 6.15 muestra el campo de la velocidad media vertical en forma de líneas de contorno o de isovalores, donde cada línea representa un isovalor de la velocidad vertical¹. En la fig. 6.15 se muestra como evoluciona espacialmente la velocidad vertical en el dominio de estudio; la forma que presenta el jet, observándose los límites del jet en donde la velocidad vertical se anula.

En la figura 6.16 se muestra el comportamiento de la velocidad horizontal en el dominio de estudio, y como cambia la dirección de esta velocidad de cada lado de la línea de simetría.

En la figura 6.17 se observa el valor del coeficiente de viscosidad turbulenta (ec. 3.14) en todo el dominio de estudio, el cual es calculado a partir de la ecuación de la energía cinética de la turbulencia y de su disipación. Esta gráfica demuestra que el considerar el coeficiente de viscosidad turbulenta como una constante (modelo algebraico) no es del todo correcto, y es por esto que el modelo empleado en este trabajo es el modelo κ - ϵ .

La gráfica de vectores en la fig. 6.18 representa los vectores de velocidad, y permite observar el comportamiento dinámico del flujo. La fig. 6.18(b) es un acercamiento a la sección de emisión, donde se observa de manera esquemática que en la salida de la chimenea el perfil de velocidades es completamente turbulento, y evoluciona este perfil hasta llegar a un perfil de similitud.

Las líneas de corriente mostradas en la fig. 6.19 muestran la trayectoria que sigue el flujo. En la fig. 6.19b se presentan las líneas de corriente superpuestas a los isovalores de la velocidad vertical; en esta gráfica se puede distinguir cuales son los límites del jet.

¹En esta figura, al igual que en figuras posteriores del mismo tipo, se muestra el dominio de estudio completo, donde la mitad izquierda fue obtenida de acuerdo a la simetría del flujo. Además se presenta de manera esquemática la ubicación de la chimenea.

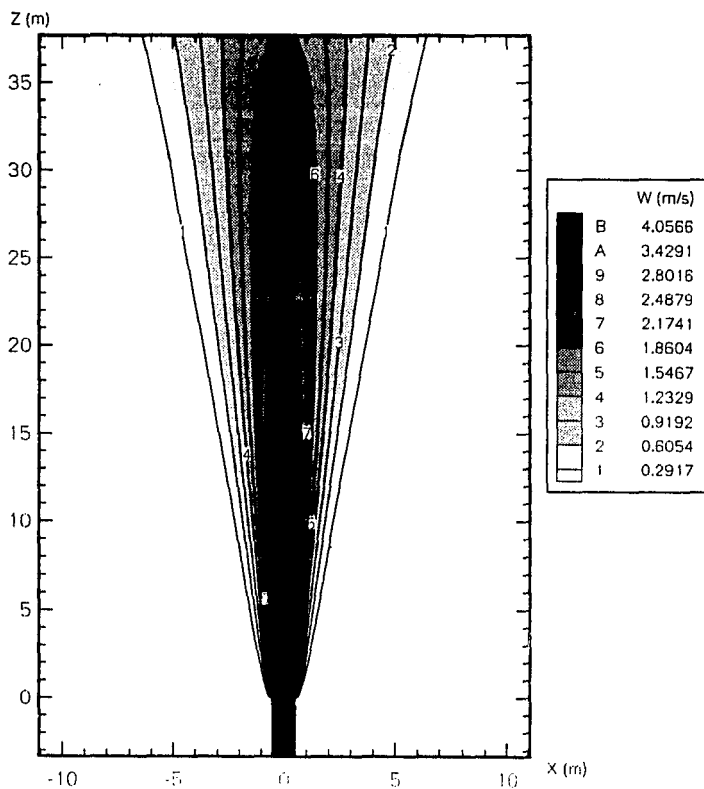


Figura 6.15 Evolución de la velocidad vertical

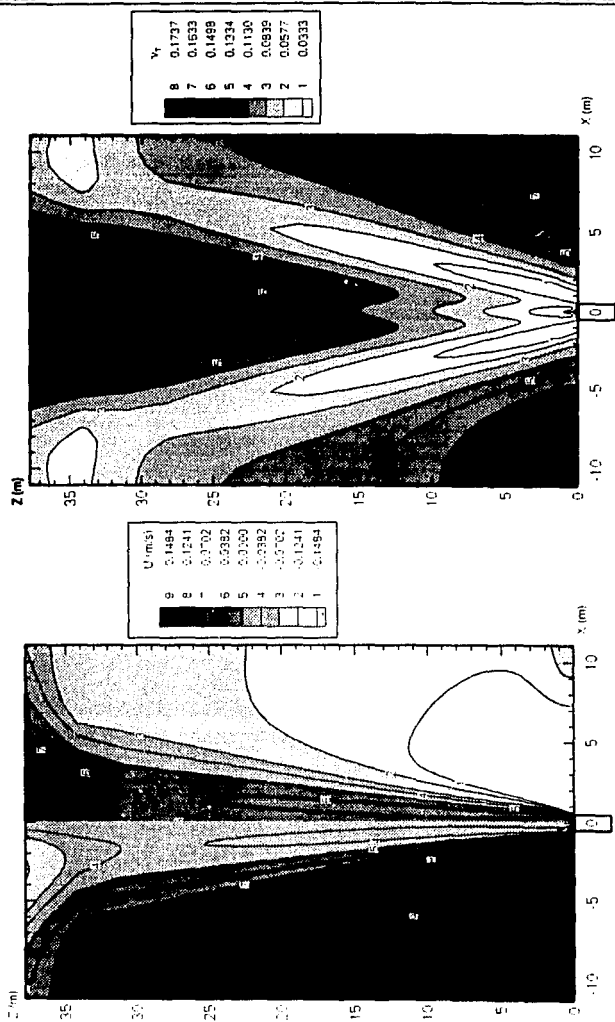


Figura 6.17 Líneas de contorno del coeficiente de viscosidad turbulenta

Figura 6.16 Curvas de isovalores de la velocidad horizontal

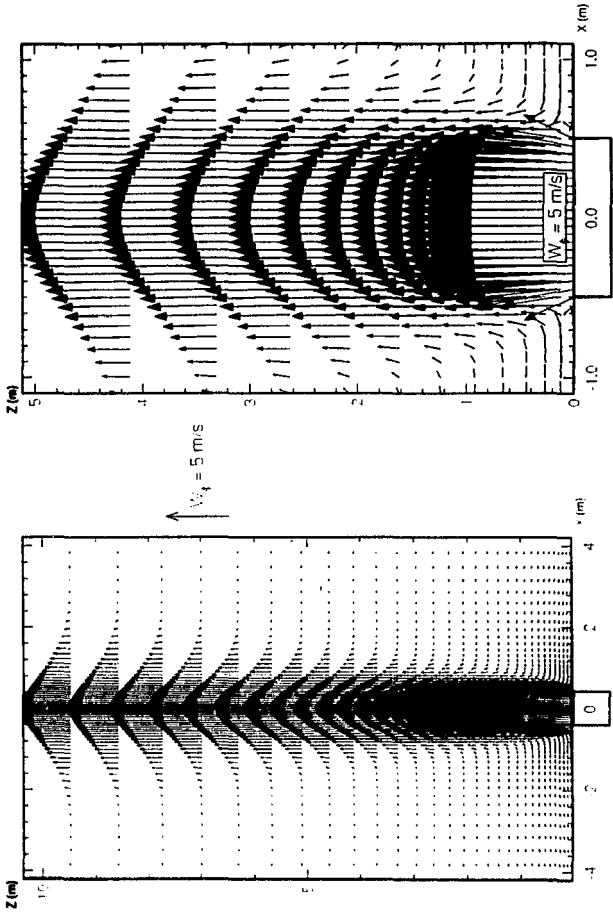


Figura 6.18 Vectores de velocidad en la zona cercana a la salida de la chimenea (a), y en la salida de la chimenea (b)

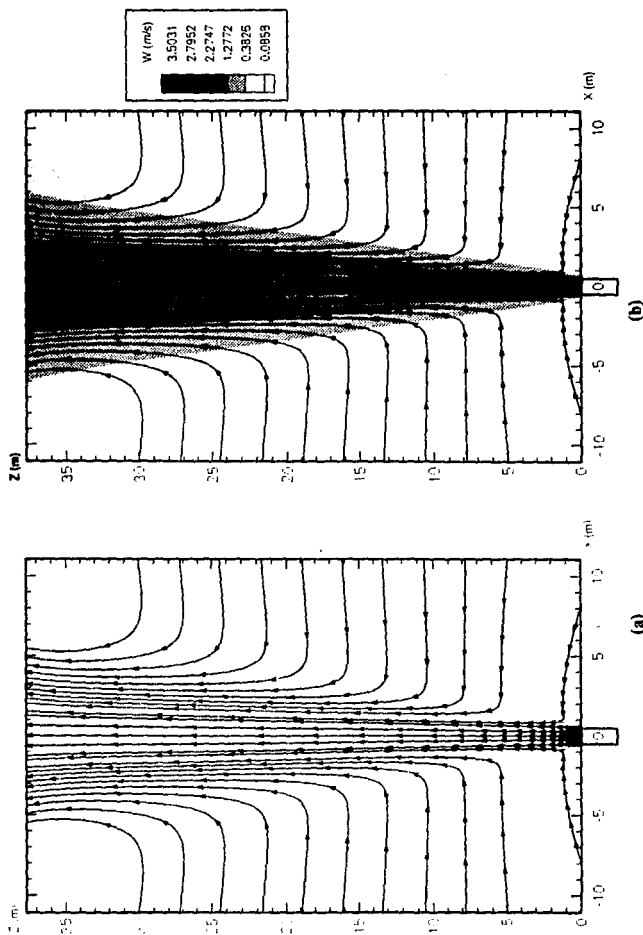
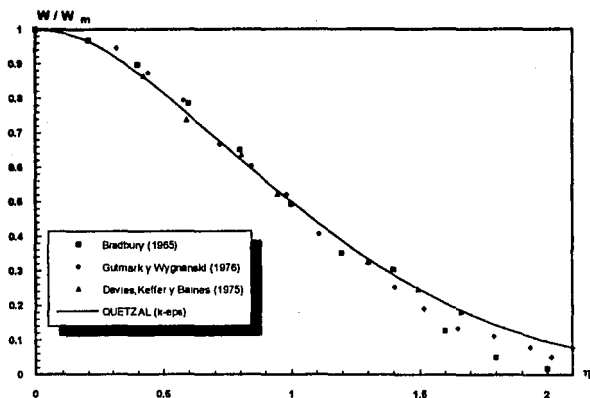
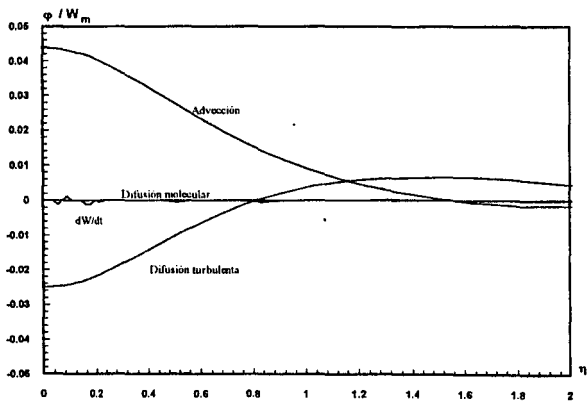


Figura 6.19 Líneas de corriente de la velocidad en el dominio de estudio (a), y sobrepuestas sobre la gráfica de contorno de la velocidad vertical (b)



(a)



(b)

Figura 6.20 Perfil transversal de la velocidad media vertical en la sección $z/D_p=30$, balance de los mecanismos (b).

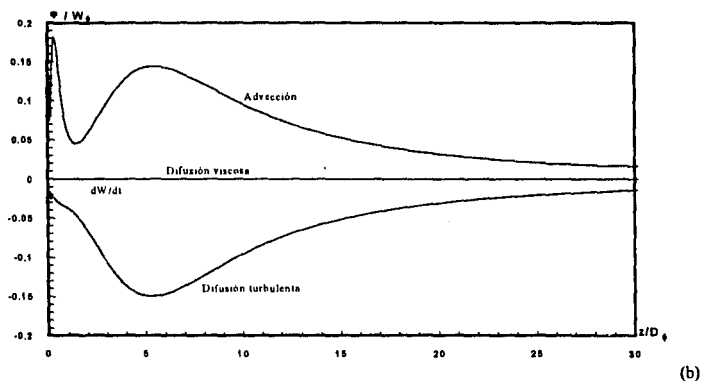
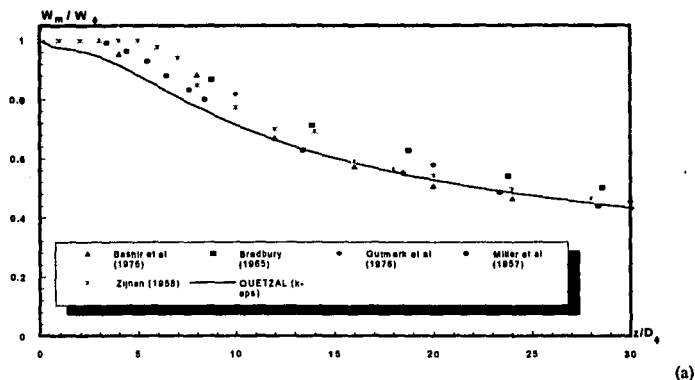


Figura 6.2) Perfil axial de la velocidad media en el eje de simetría (a), balance de los mecanismos (b)

En la fig. 6.20(a) se presenta el perfil transversal de la velocidad vertical media en la región de similitud; este perfil es comparado con datos experimentales obtenidos en la bibliografía, utilizando las variables del análisis de similitud (Cap. 5). Se observa que el comportamiento es adecuado y se ajusta bien con los datos experimentales (12% de error relativo medio). En la fig.

6.20(b) se presentan los mecanismos de la ecuación media de la velocidad vertical en la misma sección de similaridad. De esta gráfica se observa que la difusión molecular es pequeña en comparación con los demás mecanismos y que el término de advección y de difusión turbulenta se equilibran; en esta gráfica no se presentan los términos de gravedad y de gradiente de presión, ya que estos son de magnitud mayor y salen de la escala de la gráfica, además que sus perfiles son planos. En la gráfica de los mecanismos se incluye la diferencial de la velocidad con respecto del tiempo, la cual es, como se observa, prácticamente cero, lo que concuerda con la prueba de estacionaridad.

La fig. 6.21(a) muestra el perfil de velocidad vertical sobre el eje de simetría y es comparado con datos experimentales; los resultados de la simulación presentan una buena aproximación (6.5% de error relativo medio), especialmente en la zona de similaridad (a partir de $z/D \approx 10$). Los mecanismos de la ecuación de velocidad media sobre el eje de simetría se muestran en la fig. 6.21(b).

b) *Energía cinética de la turbulencia y su disipación*

La evolución espacial de la energía cinética de la turbulencia y de su disipación en todo el dominio de estudio son mostradas en la fig. 6.22, en forma de líneas de contorno o isovalores. La evolución obtenida por la simulación es correcta.

La fig. 6.23 presenta la energía cinética de la turbulencia en la región de similitud, la cual muestra un nivel aparentemente bajo con respecto de los datos experimentales; esto se debe a que en las fuentes experimentales el número Froude isotérmico tiende a la unidad y los efectos de buoyancy están relacionados directamente con el campo dinámico produciéndoles una reducción en los niveles. La fig. 6.23(b) presenta los mecanismos de la ecuación de la energía cinética de la turbulencia en la misma región, donde se ve un buen comportamiento de los mecanismos; y que son los mecanismos de producción y de disipación los que más difieren de los puntos experimentales.

El comportamiento de la energía cinética de la turbulencia sobre la línea de simetría es mostrado en la fig. 6.24(a), aunque la tendencia es buena se presenta un nivel bajo con respecto a los puntos experimentales; esta diferencia se debe a la misma razón explicada anteriormente. La fig. 6.24(b) muestra los mecanismos correspondientes los cuales tienen una buena forma.

La disipación de la energía cinética de la turbulencia en la región de similitud comparada con algunos puntos experimentales se muestra en la fig. 6.25, donde también se encuentran los mecanismos de la ecuación correspondiente. Este nivel por debajo de los puntos experimentales compensa el bajo nivel de la energía cinética de la turbulencia.

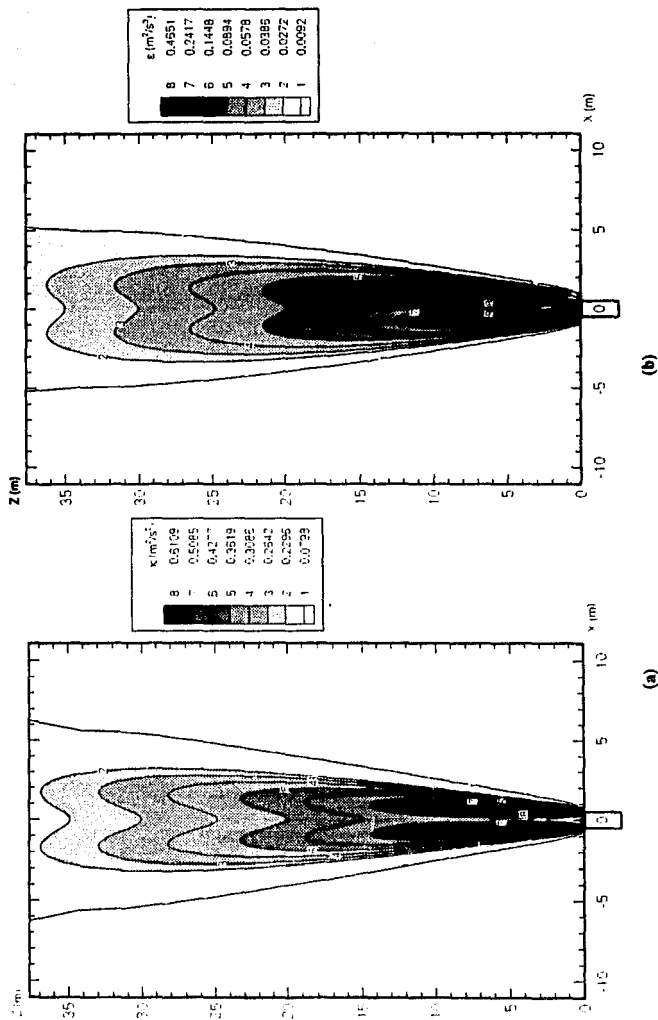
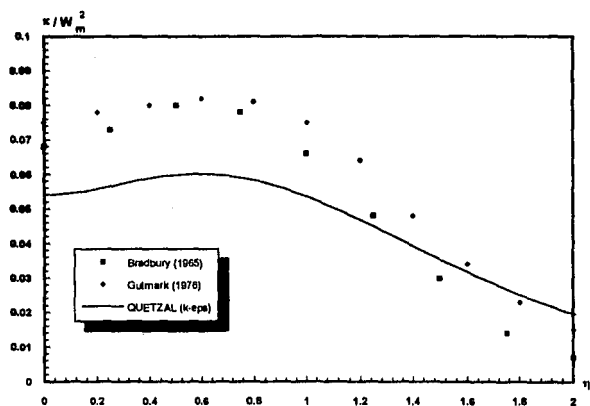
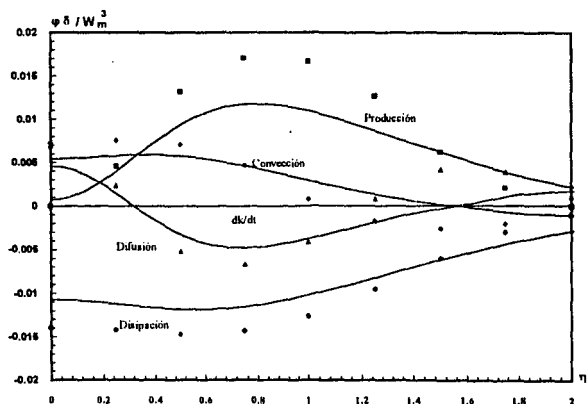


Figura 6.22 Evolución espacial de la energía cinética de la turbulencia (a), y de su disipación (b)

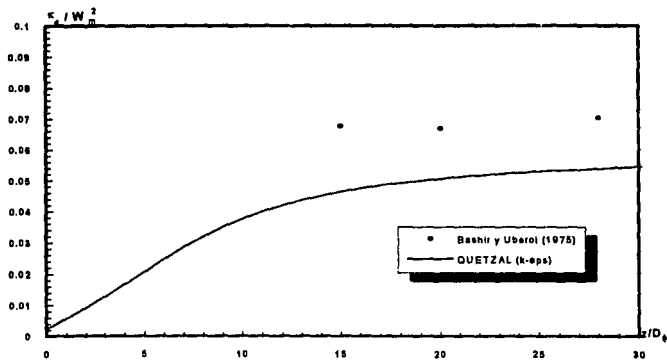


(a)

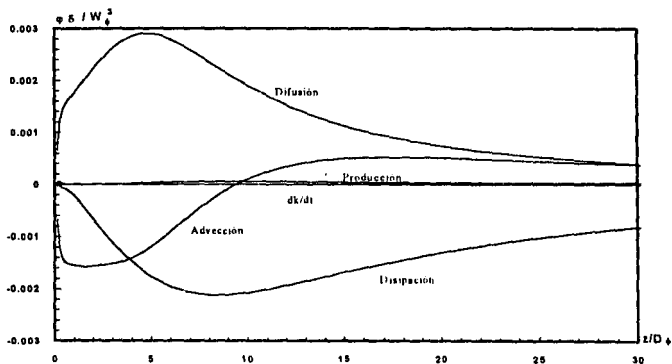


(b)

Figura 6.23 Perfil transversal de la energía cinética de la turbulencia en la sección $z/D = 30$ (a), balance de los mecanismos (b).

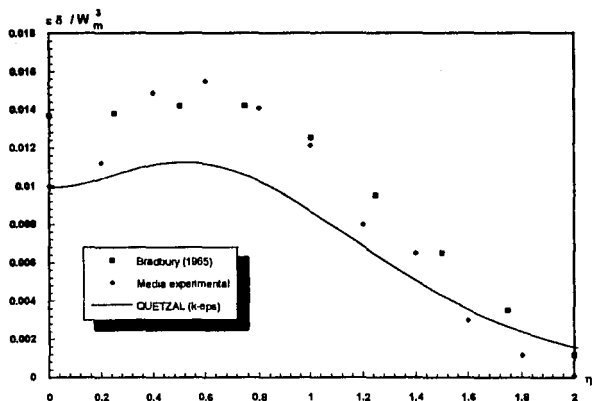


(a)

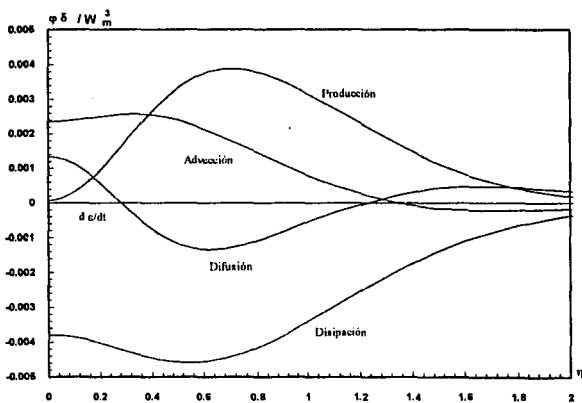


(b)

Figura 6.24 Perfil axial de la energía cinética de la turbulencia en el eje de simetría (a), balance de los mecanismos (b).

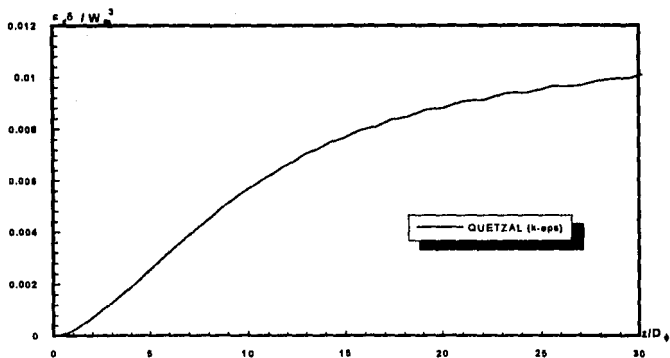


(a)

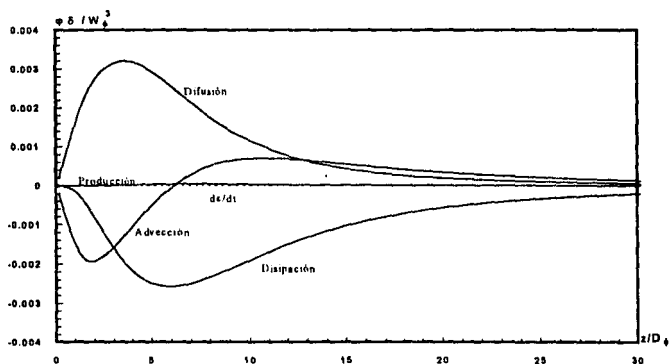


(b)

Figura 6.25 Perfil transversal de la disipación de la energía cinética de la turbulencia en la sección $z/D_\phi=30$ (a), balance de los mecanismos (b).



(a)



(b)

Figura 6.26 Perfil axial de la disipación la energía cinética de la turbulencia en el eje de simetría (a), balance de los mecanismos (b).

La evolución sobre la línea de simetría de la disipación de la energía cinética tiene la forma mostrada en la fig. 6.26, donde también se muestran sus mecanismos. No se encontraron puntos experimentales para un jet plano turbulento, sin embargo esta gráfica muestra un buen comportamiento de la disipación de la energía cinética de la turbulencia y de sus mecanismos.

De las gráficas de la energía cinética de la turbulencia y de su disipación se encuentra que su comportamiento es parecido; tanto de las cantidades en sí, como de los mecanismos de las respectivas ecuaciones.

c) Tensiones de Reynolds

Las tensiones de Reynolds o correlaciones turbulentas de la dinámica están representadas por las figs. 6.27(a-d), en forma de líneas de contorno, donde se observa que para los esfuerzos normales \overline{uu} , \overline{vv} y \overline{ww} se obtuvieron comportamientos adecuados conforme a lo esperado; el comportamiento del esfuerzo cortante \overline{uv} se cumple satisfactoriamente, observándose que en la línea de simetría su valor es cero.

En la fig. 6.28 se muestran los perfiles horizontales de las tensiones de Reynolds en la región de similitud; el comportamiento de las correlaciones \overline{uu} y \overline{vv} es similar al de los datos experimentales; mientras que las correlaciones \overline{ww} y \overline{uv} presentan niveles bajos con respecto de los valores experimentales.

Por su parte, la fig. 6.30 muestra los perfiles verticales de las tensiones de Reynolds sobre la línea de simetría. Aquí una vez más se observa que las correlaciones \overline{uu} y \overline{vv} presentan un comportamiento igual al de los datos experimentales, mientras que la correlación \overline{ww} se encuentra ligeramente abajo de los datos experimentales. La correlación \overline{uv} no se muestra porque su valor sobre el eje de simetría es siempre cero.

d) Discusión general de resultados

Los resultados obtenidos de las simulaciones, para el campo dinámico, presentan un buen comportamiento cuando estas se comparan con diferentes resultados encontrados en la literatura; las diferencias que se obtienen son debidas a las diferentes características con que fueron realizadas las mediciones experimentales, principalmente el número de Froude isotérmico.

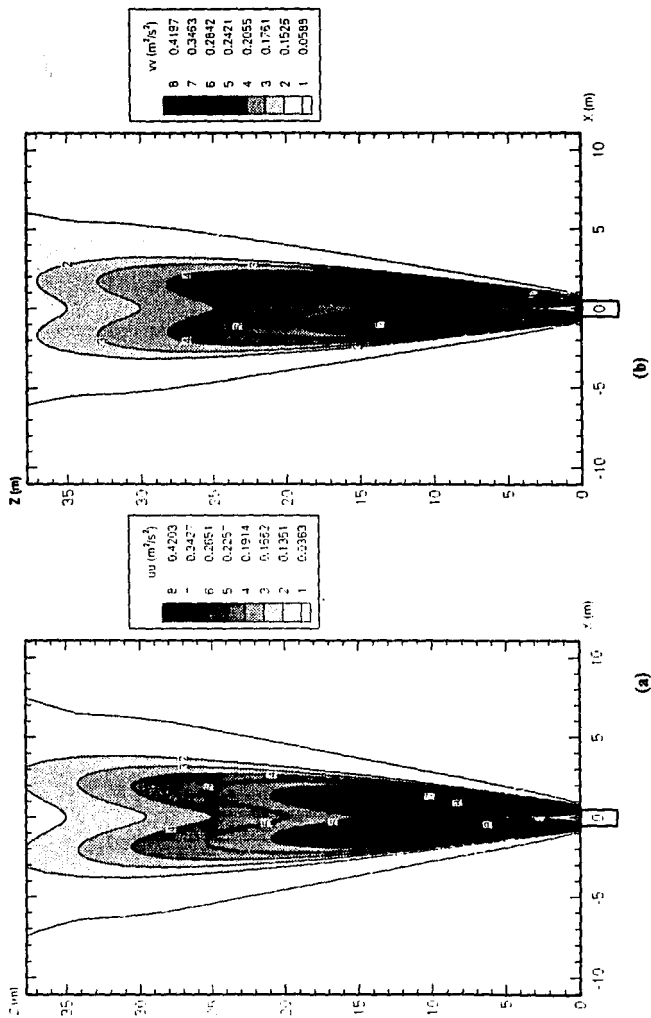
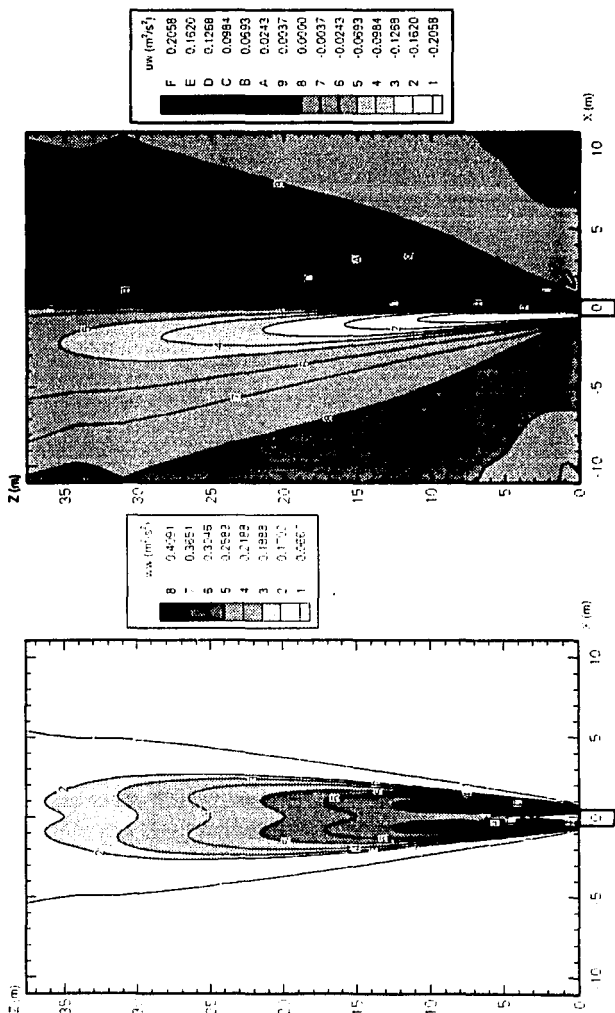


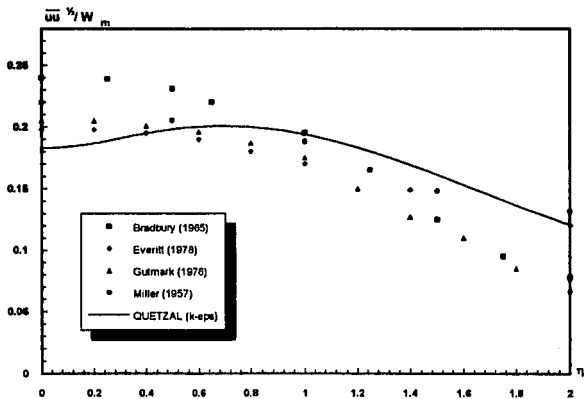
Figura 6.27 Tensiones de Reynolds normales (a, b y c), y cortante (d)



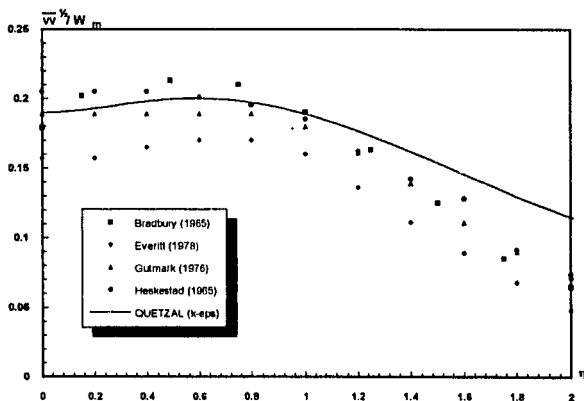
(c)

(d)

Figura 6.27 Tensiones de Reynolds normales (a, b y c), y cortante (d) -continuación-

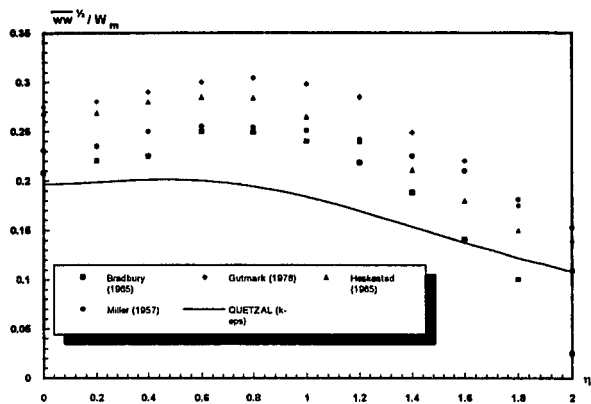


(a)

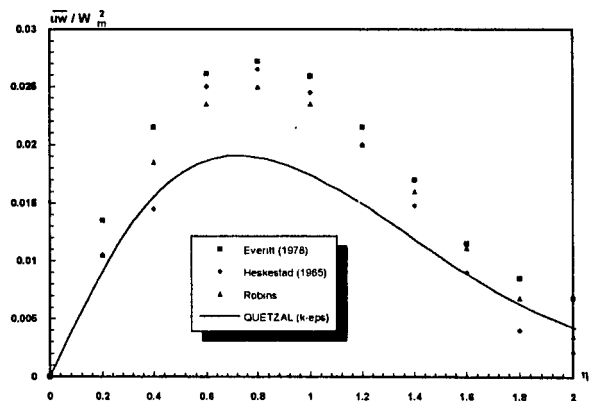


(b)

Figura 6.28 Perfiles transversales de las tensiones de Reynolds



(c)



(d)

Figura 6.29 Perfiles transversales de las tensiones de Reynolds - continuación

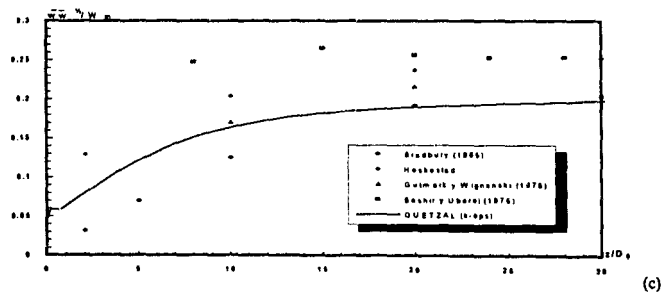
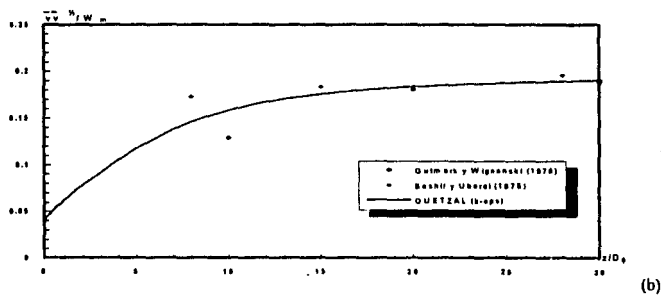
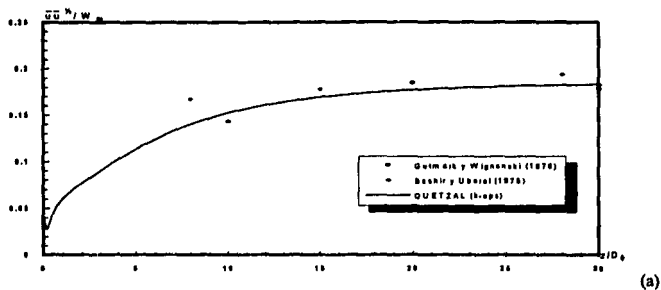


Figura 6.30 Perfiles axiales de las tensiones de Reynolds en el eje de simetría

6.6.2. Resultados para el campo térmico

El campo térmico fue simulado a partir del modelo de turbulencia de tipo $\overline{\theta^2} - \varepsilon_\theta$, en donde el número de Prandtl turbulento fue optimizado numéricamente a un valor de 0.5 y las constantes utilizadas fueron las de la tabla 3.2. El flujo de calor turbulento fue calculado a partir de la ec. (3.23); la varianza de la temperatura se calculó con la ecuación de evolución (3.24); y la disipación de la varianza de temperatura fue calculada a partir de escalas de tiempo, ec. (3.30).

En este caso, la temperatura fue transportada como un escalar inerte, y no tuvo influencia sobre el campo dinámico.

En la fig. 6.31 se compara la evolución de la línea de expansión térmica con datos experimentales, obteniéndose una buena aproximación.

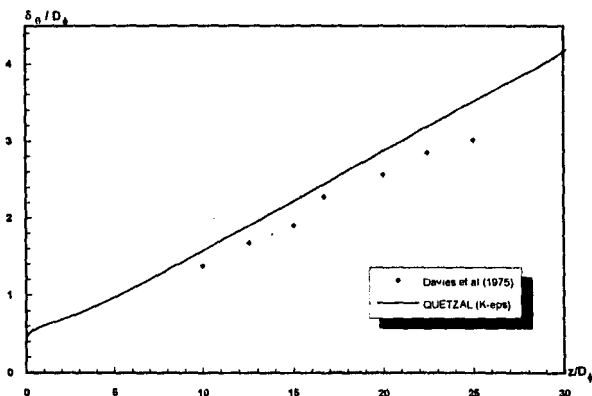


Figura 6.31 Línea de evolución de la temperatura

a) Temperatura media

La evolución espacial de la temperatura en todo el dominio de estudio es mostrada en la fig. 6.32, en una gráfica de contornos, en la cual se presenta una desviación en el comportamiento general de las líneas de contorno cerca de la frontera superior, sin embargo esto no impidió la convergencia del método.

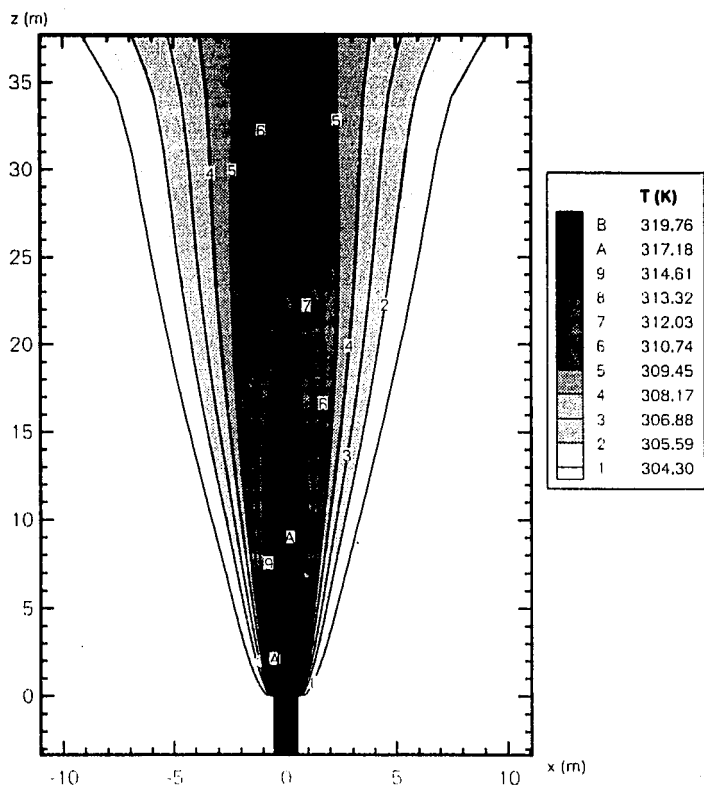


Figura 6.32 Evolución de la temperatura media en el dominio de estudio

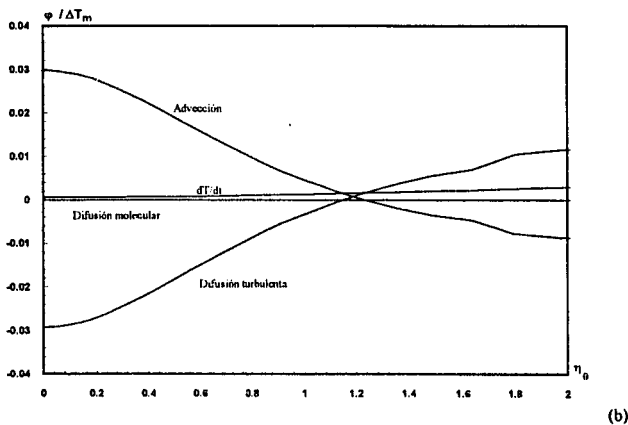
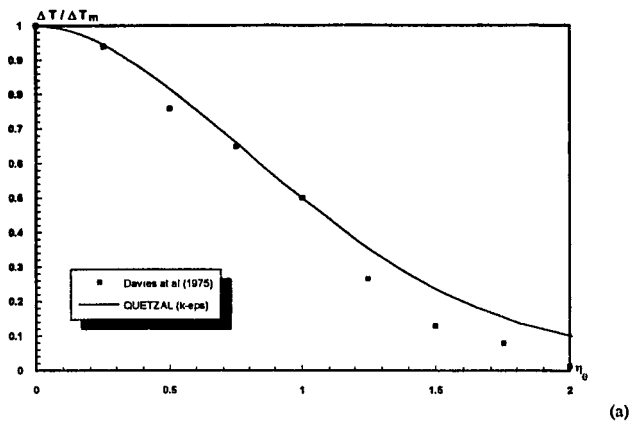


Figura 6.33 Perfil transversal de la temperatura media en la sección $z/D_\phi=30$ (a), balance de los mecanismos (b)

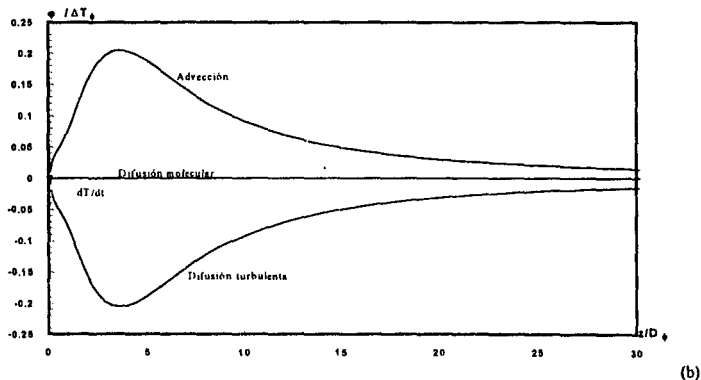
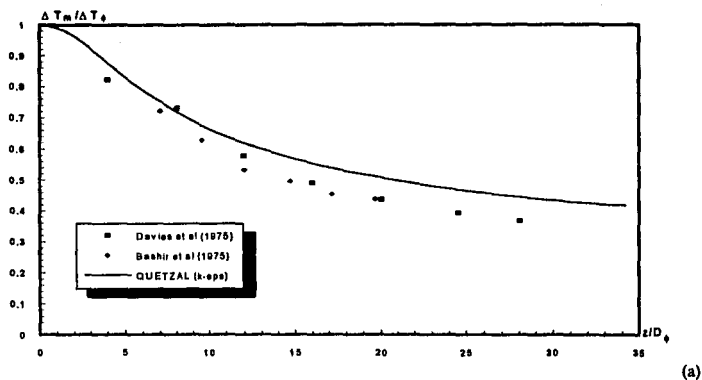


Figura 6.34 Perfil axial de la temperatura media en el eje de simetría (a), balance de los mecanismos (b).

El perfil horizontal de la temperatura en la región de similitud es comparado con datos experimentales (16% de error relativo medio) en la fig. 6.33(a), y se presentan los mecanismos de la ecuación de la temperatura media en la misma región en la fig. 6.33(b). Los resultados de la simulación en este caso se comportan adecuadamente.

La fig. 6.34 muestra el perfil de la temperatura sobre el eje de simetría (a), así como los mecanismos de la ecuación correspondiente (b). En cuanto a la evolución axial de la temperatura se observa que esta se mantiene ligeramente por encima de los datos experimentales (11% de error relativo), y sus mecanismos se comportan de manera análoga a los mecanismos de la velocidad vertical media.

b) Varianza de la temperatura y su disipación

La fig. 6.35 muestra la evolución espacial de la varianza de temperatura (a), y de su disipación (b). Como puede verse, estas dos cantidades tienen un buen comportamiento.

En la fig. 6.36 se presenta el perfil horizontal de la varianza de temperatura en la región de similitud (a), así como los mecanismos de la ecuación correspondiente en la misma región. Se observa que el perfil es comparado con datos experimentales, y que su comportamiento difiere a cierta distancia del eje de simetría.

El perfil vertical de la varianza de temperatura sobre el eje de simetría es mostrado en la fig. 6.37, en donde es comparado con datos experimentales. En la misma figura se presentan los mecanismos correspondientes.

La disipación de la varianza de temperatura en la región de similaridad es mostrada en la fig. 6.38, y sobre el eje de simetría en la fig. 6.39. No se cuenta con datos experimentales de comparación, sin embargo se observa que los perfiles son adecuados.

c) Flujo de calor turbulento

La evolución espacial del flujo de calor turbulento, tanto horizontal como vertical, se muestra en la fig. 6.40. Se puede observar que el comportamiento de ambas correlaciones es diferente. El comportamiento de $\overline{u\theta}$ es adecuado, y el comportamiento de $\overline{w\theta}$ es un tanto inadecuado, ya que, aparentemente, no se deberían presentar valores negativos dentro del jet.

La fig. 6.41 muestra los perfiles horizontales de $\overline{u\theta}$ (a), y $\overline{w\theta}$ (b), en la región de similitud. Se observa que el comportamiento de $\overline{u\theta}$ se ajusta a los datos experimentales, y que existe una desviación importante de $\overline{w\theta}$ con respecto a los datos experimentales, como se había mencionado anteriormente.

El perfil vertical de $\overline{w\theta}$ sobre el eje de simetría es presentado en la fig. 6.42, el cual se comporta adecuadamente.

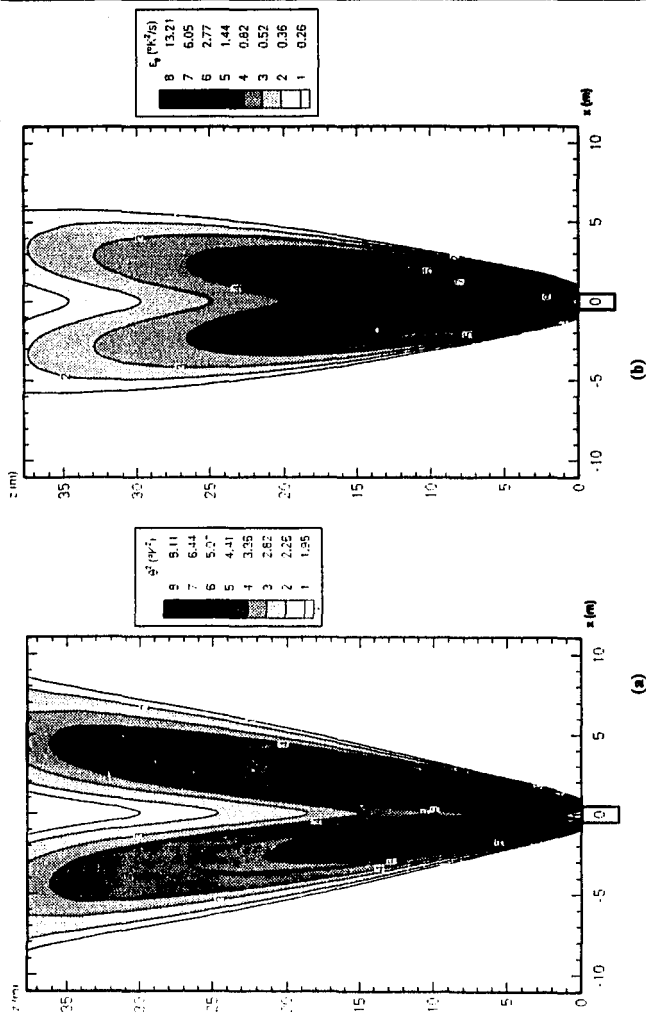


Figura 6.35 Evolución espacial de la varianza de la temperatura (a), y de su disipación (b)

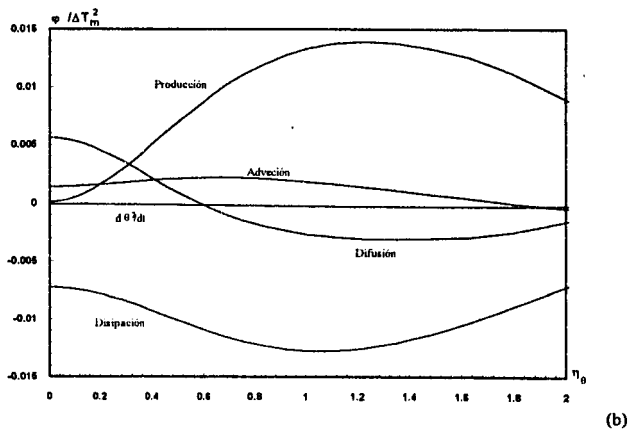
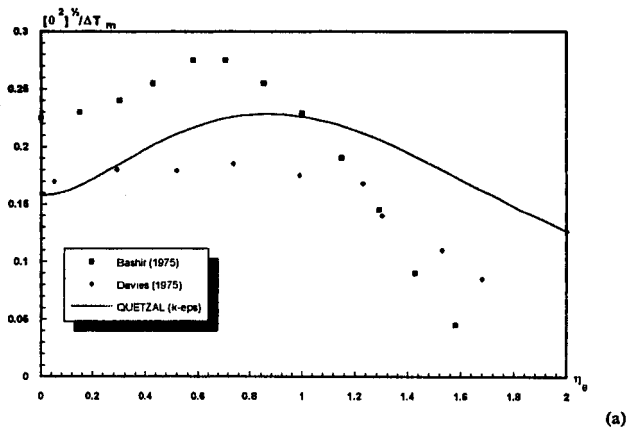
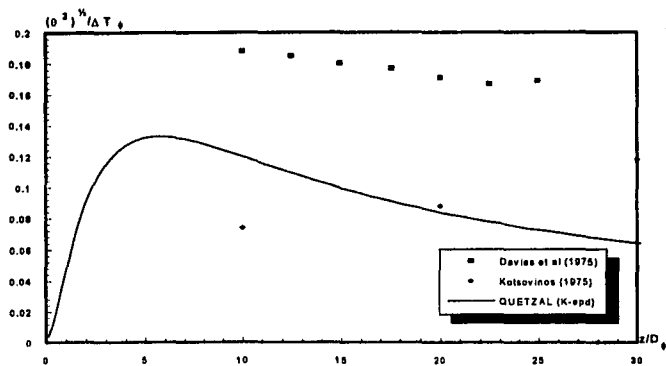
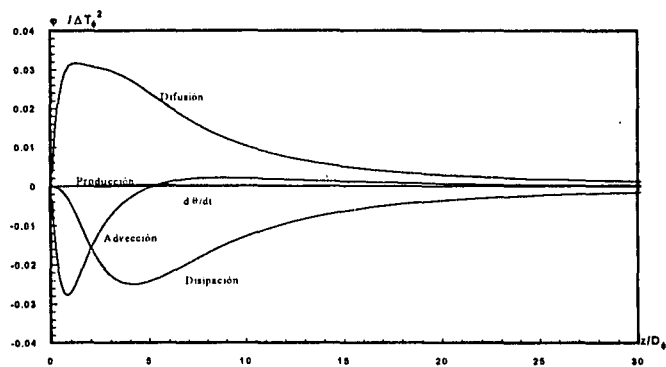


Figura 6.36 Perfil transversal de la varianza de temperatura en la sección $z/D_p=30$ (a), balance de los mecanismos (b).



(a)



(b)

Figura 6.37 Perfil axial de la varianza de temperatura en el eje de simetría (a), balance de los mecanismos (b).

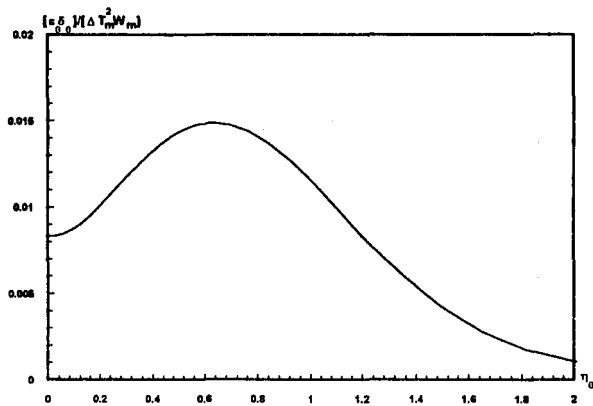


Figura 6.38 Perfil transversal de la disipación de la varianza de temperatura en la sección $z/D_\phi=30$

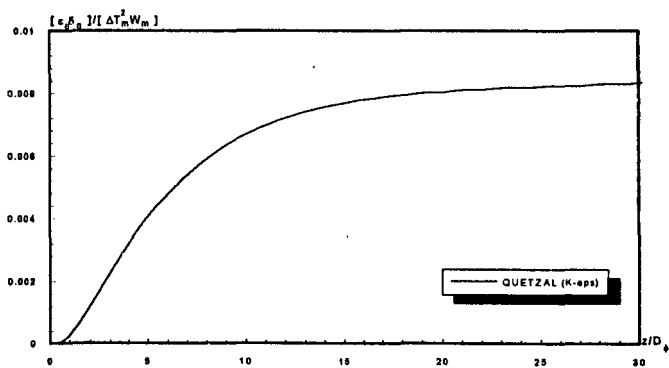


Figura 6.39 Perfil axial de la disipación de la varianza de temperatura en el eje de simetría

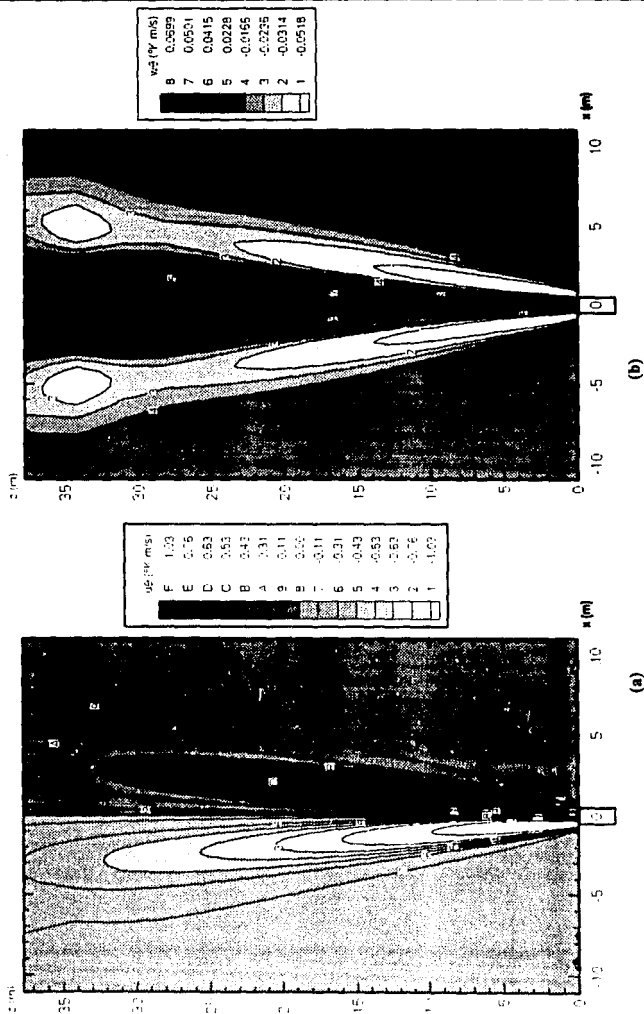


Figura 6.40 Curvas de isovalores del flujo de calor turbulento horizontal (a), y vertical (b)

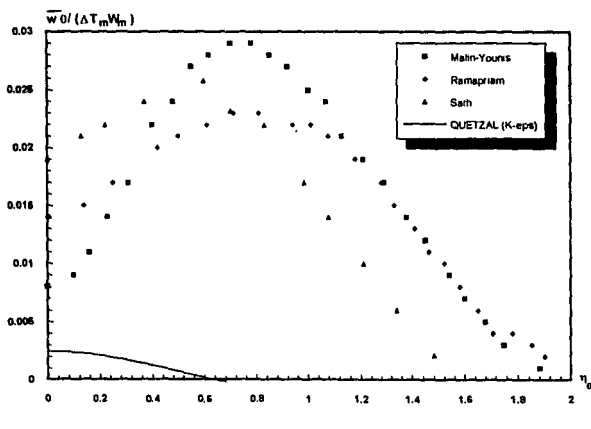
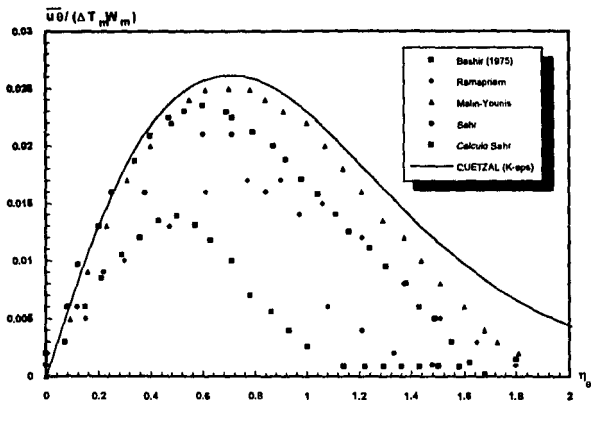


Figura 6.41 Perfil transversal del flujo de calor turbulento en la sección $z/D_p=30$

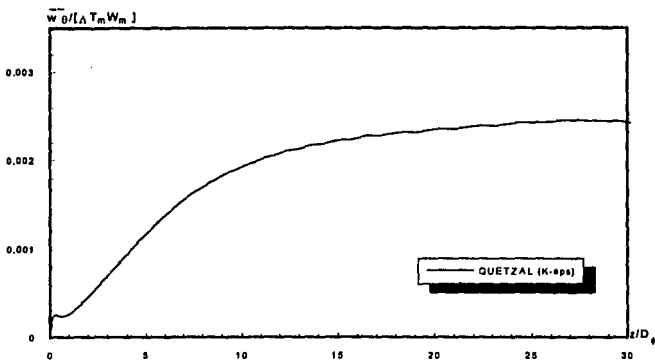


Figura 6.42 Perfil axial del flujo de calor turbulento en el eje de simetría

d) Discusión general de resultados

En general el comportamiento del campo térmico es adecuado, excepción hecha para $\overline{w\theta}$; sin embargo es interesante porque sólo se tiene incongruencia en esta cantidad y no se afecta la estructura global del campo térmico. Al igual que con la velocidad, en este caso la temperatura media fue la que tuvo el comportamiento más adecuado, en función de la comparación con los datos experimentales.

Los resultados que más se ajustan con los datos experimentales son los de aquellas cantidades que se calculan con una ecuación de evolución.

Cabe mencionar que aunque se presentan resultados de la varianza de temperatura y de su disipación, estas cantidades no intervienen en el modelo de turbulencia, ya que el coeficiente de difusión turbulento se calcula a partir del número de Prandtl turbulento, y cuyo valor fue optimizado a 0.5.

6.6.3. Resultados de la concentración de especies

La simulación de la dispersión de un contaminante pasivo en la atmósfera se realizó con el modelo de turbulencia $\overline{c_\alpha^2} - \epsilon_c$, en donde el número de Schmidt turbulento fue de 0.7 y cuyo valor fue optimizado numéricamente; las constantes del modelo fueron las consideradas en la tabla 3.3. La disipación de la varianza de las especies fue calculada a partir de escalas de tiempo, al igual que con la temperatura.

a) *Concentración media del contaminante*

La fig. 6.43 muestra el campo de concentración media de la especie α en todo el dominio de estudio. Se observa que al igual que en la temperatura, existe una desviación en la tendencia de las líneas de contorno cerca de la frontera superior, aunque el comportamiento en general es el esperado.

El perfil horizontal de la concentración en la región de similaridad es presentado en la fig. 6.44, este perfil es comparado con un perfil de similaridad (Cap. 5), ya que no se cuenta con datos experimentales; el comportamiento es adecuado (4% de error relativo medio). Además se presentan los mecanismos de la ecuación, los cuales tienen la forma esperada.

En la fig. 6.45 se presenta el perfil de concentración en el eje de simetría, el cual es comparado con el perfil de similitud, desde una región donde $Z_D=10$. El nivel de este perfil es ligeramente elevado con respecto del perfil de similitud, sin embargo la forma de los perfiles es la misma (11% de error relativo medio). Se presenta también los mecanismos correspondientes, los cuales tienen la misma forma que aquellos de la temperatura.

b) *Varianza de la concentración del contaminante y su disipación*

La evolución espacial de la varianza de concentración y de su disipación se esquematizan en la fig. 6.46, donde se observa un comportamiento adecuado de ambas cantidades.

En la fig. 6.47 se muestra el perfil horizontal de la varianza de concentraciones (a), en la región de flujo completamente desarrollado, junto con los mecanismos correspondientes (b). El perfil es comparado con datos experimentales de temperatura, que para el tipo de flujo estudiado pueden compararse gracias al análisis de similitud.

El perfil vertical de la varianza de concentración es mostrado en la fig. 6.48(a) y los mecanismos en la fig. 6.48(b). Para este perfil también se utilizan datos experimentales de temperatura como comparación.

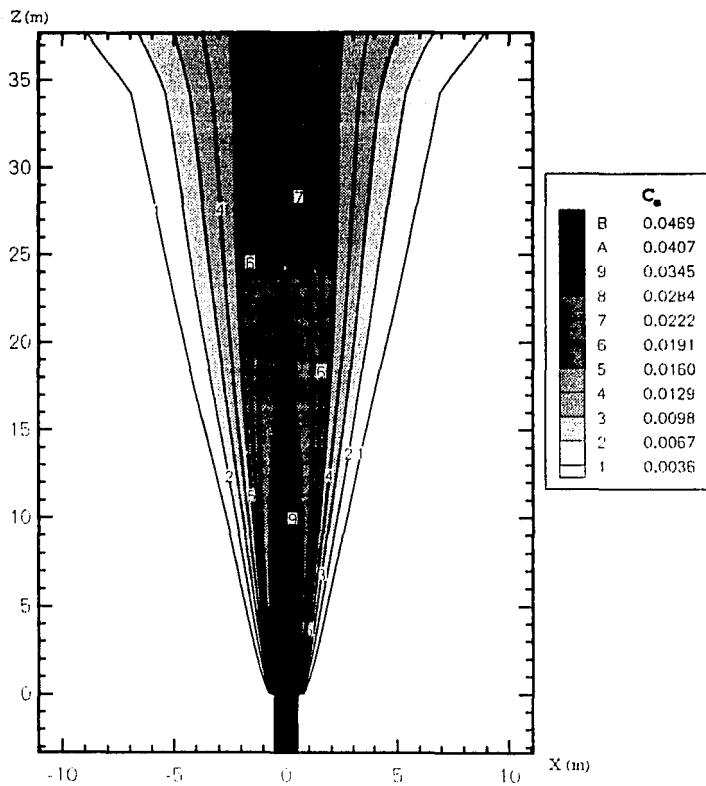
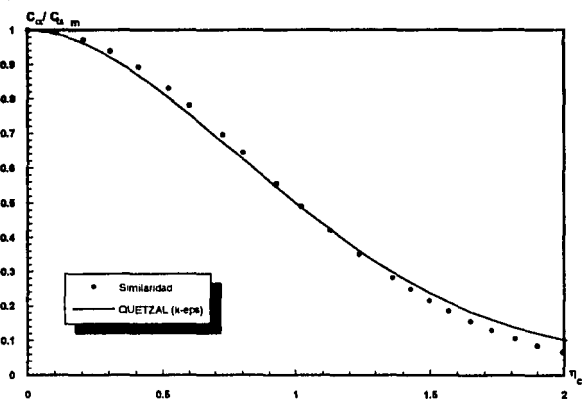
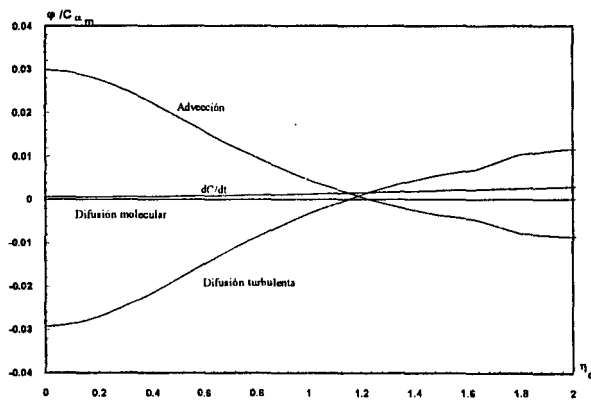


Figura 6.43 Evolución de la concentración media en el dominio de estudio

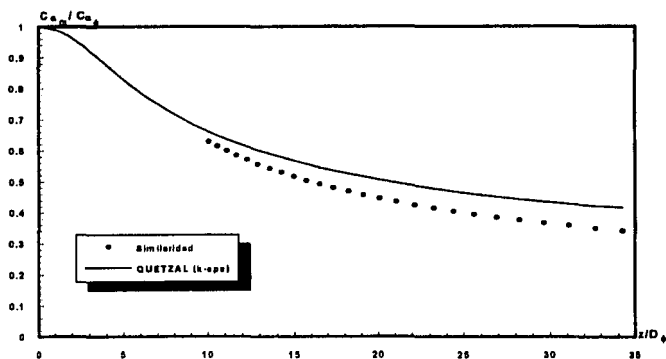


(a)

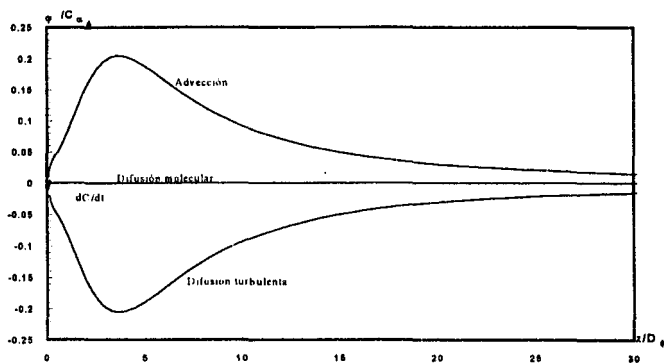


(b)

Figura 6.44 Perfil transversal de la concentración media en la sección $z/l = 30$ (a), balance de los mecanismos (b).



(a)



(b)

Figura 6.45 Perfil axial de la concentración media en el eje de simetría (a), balance de los mecanismos (b)

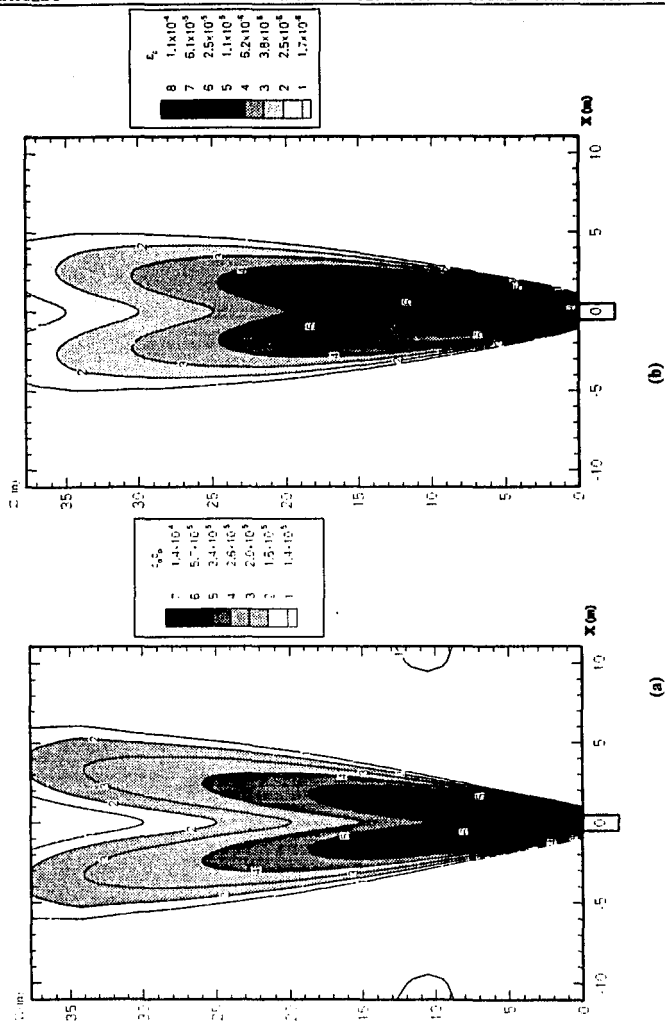
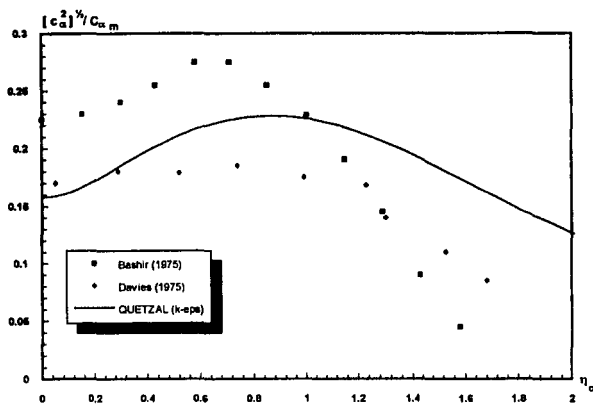
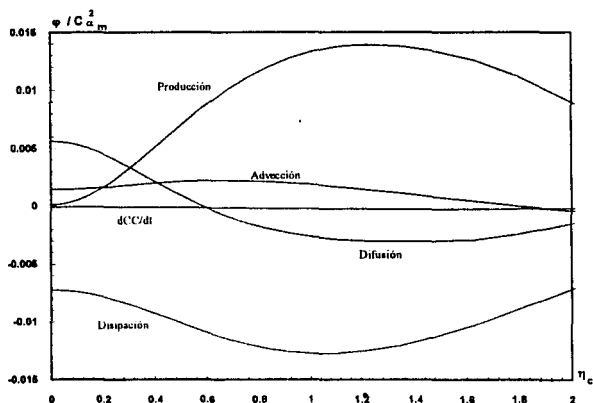


Figura 6.46 Evolución espacial de la varianza de la concentración (a), y de su disipación (b)



(a)



(b)

Figura 6.47 Perfil transversal de la varianza de las especies en la sección $z/D_\phi=30$ (a), balance de los mecanismos (b).

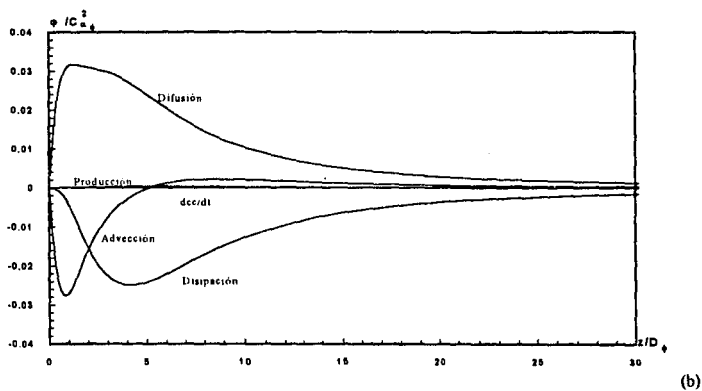
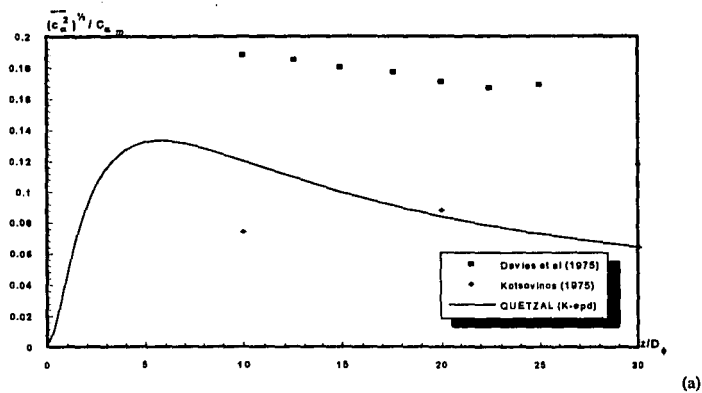


Figura 6.48 Perfil axial de la varianza de concentraciones en el eje de simetría (a), balance de los mecanismos (b).

La disipación de la varianza de la temperatura es mostrada en la fig. 6.49 en la región de similitud y en la fig. 6.50 en el eje de simetría.

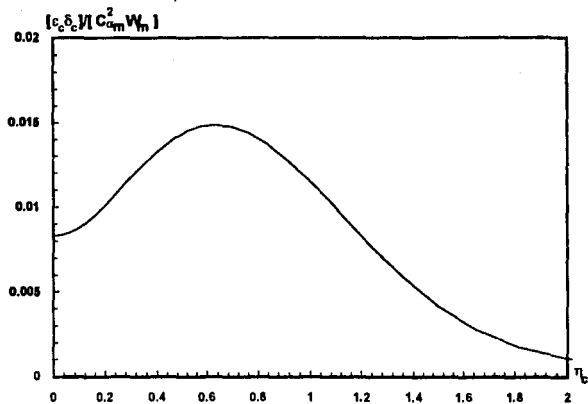


Figura 6.49 Perfil transversal de la disipación de la varianza de las especies en la sección $z/D_0 = 30$

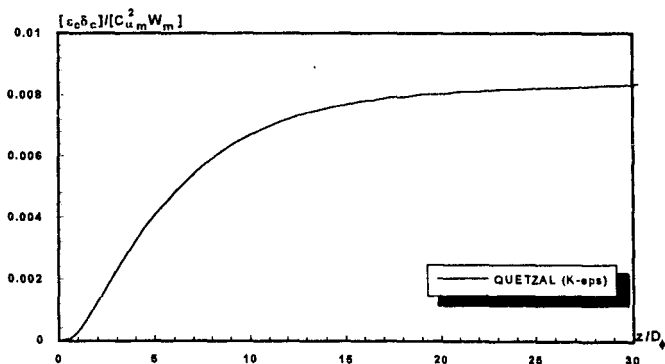


Figura 6.50 Perfil axial de la disipación de la varianza de las especies en el eje de simetría

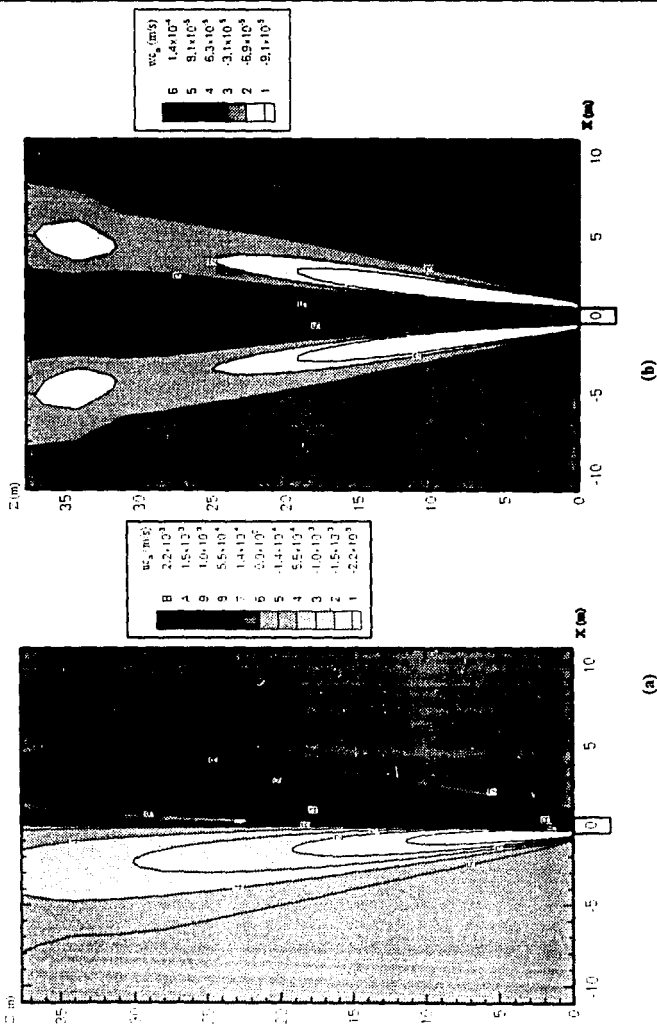


Figura 6.51 Líneas de contorno del flujo turbulento de especies horizontal (a), y vertical (b)

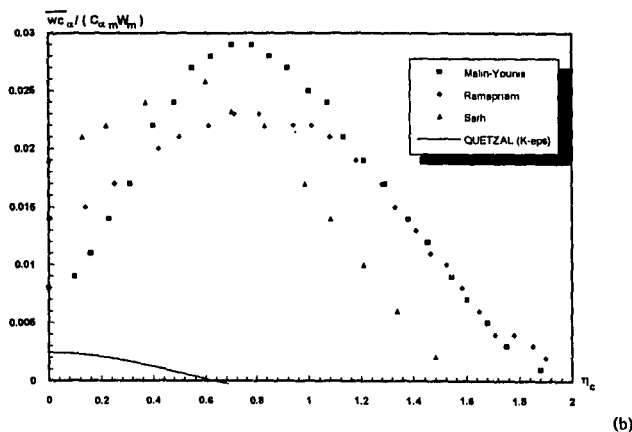
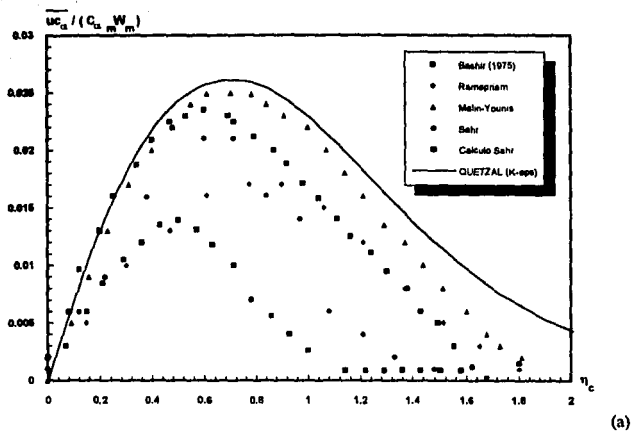


Figura 6.52 Perfiles transversales del flujo de especies turbulento en la sección $z/D = 30$
(a), balance de los mecanismos (b)

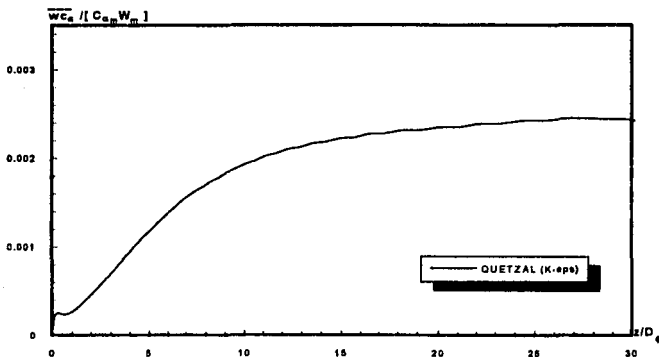


Figura 6.53 Perfil axial del flujo de especies turbulento en el eje de simetría

c) Flujo de masa turbulento

La evolución espacial en el dominio de estudio del flujo de masa turbulento es mostrado en la fig. 6.51. Se observa un comportamiento similar al flujo de calor turbulento.

La fig. 6.52 muestra los perfiles del flujo de masa turbulento en la región de similitud. Al igual que para la temperatura, se observa que en esta región el flujo másico turbulento en la dirección vertical tiene un nivel muy bajo con respecto a los datos experimentales.

En la fig. 6.53 se muestra el perfil de $\overline{w c_\alpha}$ en el eje de simetría, el cual presenta un buen comportamiento.

d) Discusión de resultados

En general podemos ver que el campo térmico y el de concentración de especies se comporta de la misma forma, lo cual es correcto, ya que al considerar un jet plano turbulento conduce a tratar la temperatura como a un escalar (especie) inerte.

II. PERSPECTIVAS

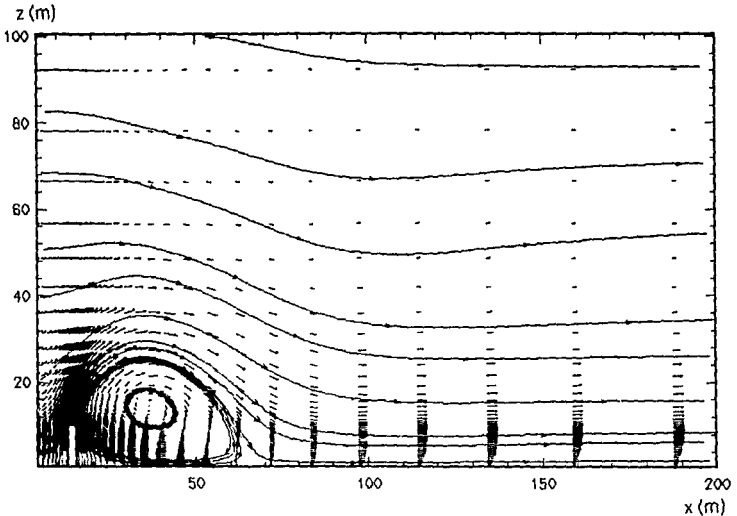
Este estudio fue una etapa esencial dentro de un programa de trabajo elaborado en el Departamento de Sistemas de Combustión del Instituto de Investigaciones Eléctricas para el estudio de la dispersión de contaminantes en la atmósfera. En este programa no sólo se desarrollarán los modelos de dispersión de contaminantes sino que también se evaluará su impacto al medio, para lo cual se han ligado las tres partes esenciales: las redes de monitoreo, los modelos de dispersión y el impacto al medio ambiente según la legislación establecida al respecto.

El objetivo de este programa de trabajo es el de poder predecir de forma realista la dispersión de los contaminantes en diversas centrales termoeléctricas del país en donde las emisiones producen un impacto considerable en las zonas aledañas, como es el caso de la Central Termoeléctrica ubicada en Manzanillo.

		CONTAMINACIÓN			
RECALIBRACION DE ESTANDARES	DATOS METEOROLOGICOS OPTIMIZACION DE LA METEOROLOGIA	DATOS TOPOGRAFICOS OPTIMIZACION DE LA METEOROLOGIA	ANALISIS DE LA QUIMICA DE UNA PLUMA	1	PRIMER AÑO
	METEOLOGIA SELECCION DE LOS MODELOS GAUSSIANOS DE DISPERSION	MODELOS MATEMATICOS (EULERIANOS) DE TRAYECTORIAS DE DISPERSION		2	
			MECANISMO DE REACCION DE UNA PLUMA	3	
				4	
				5	
				6	
OPTIMIZACION DE REDES	APLICACION MODELOS GAUSSIANOS DE DISPERSION	VALIDACION DE LOS MODELOS MATEMATICOS CONTAMINANTES PASIVOS	MODELOS PARA LA QUIMICA DE UNA PLUMA	7	
				8	
				9	
		MODELACION MATEMATICA DE LA DISPERSION DE CONTAMINANTES APLICACION DE LOS MODELOS MATEMATICOS A CT ³		10	
				11	
				12	
METEOLOGIA PARA LA VALIDACION DE MODELOS DE DISPERSION	MODELOS GAUSSIANOS PARA TERRENOS COMPLEJOS	DETAJADO DE MODELOS MATEMATICOS (EULERIANOS) PARA TERRENOS COMPLEJOS	MODELOS PARA LA QUIMICA DE UNA PLUMA	1	SEGUNDO AÑO
			ESTUDIO DE LOS EFECTOS CONTAMINANTES EN EL MEDIO AMBIENTE	2	
				3	
				4	
				5	
				6	
		INCORPORACION DE LOS PROCESOS QUIMICOS A LOS MODELOS DE DISPERSION MATEMATICOS Y GAUSSIANOS		7	
			ESTRATEGIAS Y CRITERIOS PARA EL CONTROL DE LA CONTAMINACION	8	
				9	
		MODELACION MATEMATICA DE LA DISPERSION DE CONTAMINANTES APLICACION A LAS CENTRALES TERMOCENTRICAS DE LERMA Y MANZANILLO		10	
				11	
				12	

Programa de trabajo para el estudio de dispersión de contaminantes (IIE), para los próximos dos años

La etapa siguiente a la de este trabajo es la optimización del programa de cómputo **QUETZAL/II** y su aplicación y validación en dominios reales. En este sentido se empiezan a obtener resultados en una atmósfera donde se considera un perfil vertical de viento; la siguiente figura muestra el campo dinámico de una simulación de este tipo. Puede verse que el modelo es capaz de reproducir las corrientes de recirculación que se producen como consecuencia de la acción del viento sobre la chimenea de descarga.



Simulación de una fuente puntual considerando un perfil de viento

Los resultados mostrados en la figura anterior se obtuvieron con el mismo modelo de este trabajo y solo se modificó el dominio de estudio y la frontera izquierda donde se impuso un perfil de viento.

Posteriormente se prevé la tridimensionalización del programa de cómputo, la inclusión de los términos de reacción química, radiación, evaporación y otros en las ecuaciones correspondientes y la opción de simular geometrías complejas.

Un modelo como el desarrollado en este trabajo al cual se le incluyen las características mencionadas anteriormente puede constituir una herramienta poderosa en el estudio de la dispersión de contaminantes. El inconveniente de un modelo de estas características es que requiere de equipos de cómputo de gran velocidad (Workstation o CRAY). Sin embargo, la rápida evolución de los equipos de cómputo permite el desarrollo de modelos cada vez más complejos, y es por ello que un modelo como el de este trabajo puede convertirse en una herramienta práctica en la simulación de dispersión de contaminantes, que a fin de cuentas es el objetivo final de este estudio.

III. CONCLUSIONES

El objetivo de este trabajo fue el de contribuir al estudio de dispersión de contaminantes bajo un doble aspecto; a saber teórico y numérico.

En la parte teórica se colaboró con el desarrollo de un modelo físico matemático que representará de forma objetiva la dinámica de la atmósfera y, en particular, aquellos mecanismos que influyen directamente en la dispersión de los contaminantes. El modelo desarrollado permite representar los tres campos esenciales: el campo dinámico, el campo térmico y la concentración de especies.

En lo que respecta a la parte numérica, se colaboró al desarrollo y a la estructuración de un programa de computadora que se desarrolla actualmente en el Instituto de Investigaciones Eléctricas. Si bien que algunas hipótesis fueron tomadas sobre las ecuaciones que describen este fenómeno los resultados encontrados fueron completamente satisfactorios.

La contribución de este trabajo es de suma importancia ya que permite analizar la evolución en el espacio y en el tiempo de los contaminantes en la atmósfera; la mayoría de los modelos existentes en la literatura o en paquetes comerciales, de tipo gaussiano principalmente, carecen de esta posibilidad.

De acuerdo con los resultados obtenidos, el modelo κ - ϵ utilizado en este trabajo simula adecuadamente las cantidades medias, y aunque existen niveles ligeramente bajos en algunas cantidades turbulentas, en general se observa un buen comportamiento, principalmente de aquellas cantidades que son calculadas con una ecuación de evolución.

La variación en el espacio y en el tiempo del coeficiente de viscosidad turbulenta equivalente conduce a la utilización de modelos de turbulencia que tomen en cuenta estas variaciones, lo cual contradice un poco a la utilización de la teoría K (modelos algebraicos) en donde este coeficiente es supuesto constante en el espacio y en el tiempo. Así, los modelos de primer orden, como el utilizado en este trabajo, se ajusta mejor a los datos experimentales que lo modelos algebraicos.

Los modelos de primer orden permiten además el estudio de flujos con recirculación, problema que es de sumo interés ya que puede suceder que debido a este fenómeno los contaminantes emitidos de una fuente puedan depositarse instantáneamente y de forma violenta (efecto downwash).

Finalmente, se espera que este trabajo sea de importancia en la elaboración de modelos futuros, en donde se puedan incluir aspectos como la química atmosférica; y que la continuación de este trabajo conduzca al desarrollo de un modelo confiable y práctico para la simulación de dispersión de contaminantes.

IV. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Anderson, D. A., Tannehill, J. C. y Pletcher, R. H. (1980) "*Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*". W.J Minkowycs y E.M. Sparrow, Editors. Hemisphere publishing corporation, USA.
- Bashir J. y Uberoi M. S. (1975) "*Experiments on turbulent structure and heat transfer in a two-dimensional jet*" Phys. of Fluids, vol. 18, no. 4, pp. 405-410.
- Benqué, Cuadron, Viollet (1976) "*Modèle tridimensionnel de calcul de panaches émis dans l'atmosphère*" 14ème Journée de la S.H.F.
- Bird, R. B., Stewart, W. E. y Lightfoot, E. N. (1987) "*Fenómenos de transporte*" Ed. Repla, México.
- Borghì, R. (1984) "*Assessment of a theoretical model of turbulent combustion by comparison with a single experiment*". Combustion and Flame, vol. 56, pp. 149-164.
- Boussinesq J. (1897) "*Théorie de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes à grande section*" Tomo I-II, Gautier-Villars, Paris.
- Bradbury L. J. S. (1965) "The structure of a self-preservating turbulent plane jet" J. Fluid Mech., vol. 23, pp. 31-61.
- Bradshaw, P., D.H. Ferriss and N. P. Atwell, (1967) "*Calculations of boundary layer development using the turbulent energy equation*" J. Fluid Mech., vol. 28, pp. 593-616.
- Briggs G.A. (1970) "*Some recent analyses of plume rise observation*" Segundo congreso internacional Clean air congress of the International Union of air pollution association.

- Chassaing, P. (1985) "*An alternative approach to the formulation of the equations of turbulent variable density fluid motion*" Journal de Mécanique Théorique et Appliquée, vol. 4, no. 3, pp 375-389.
- Chen, C. J. y Rodi, W. (1980) "*Vertical turbulent buoyant jets*" Heat and Mass transfer, Pergamon Press, Inglaterra.
- Ching-Cheng Shih (1970) "*A pilot study in numerical techniques for predicting an pollutant distribution downwind from a line stack*" Atmospheric environment, 1970, vol. 4, pp. 387-407.
- Chorin A. J. (1967) "*A numerical method for solving incompressible viscous flow problems*" Journal Comput. Physics, 2, pp. 12-26.
- Chou, P.Y. (1949) "*Pressure flow of a turbulent fluid between two infinite parallel planes*" Quart. Appl. Math., 3, pp. 198-209.
- Chung, M.K. y Sung, H.J. (1984) "*Four-equation turbulence model for prediction of the turbulent boundary layer affected by buoyancy force over a flat plate*" Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 27, pp. 2387-2395.
- Daly, B.J. y Harlow J.F. (1970) "*Transport equation in turbulence*" Phys. Fluids, vol. 13, pp. 26-34.
- Davies A. E., Keffer J. F. y Baines W. D. (1975) "*Spread of a heated plane turbulent jet*" Phys. of Fluids, vol. 18, no. 7, pp. 770-775.
- Deissler, R. G. (1986) "*Is Navier-Stokes turbulence chaotic?*" Physic of Fluids, vol 29, No. 5 (mayo).
- Dekeyser, I. y Sini, J. F. (1987) "*Numerical prediction of turbulent plane jets and forced plumes by use of κ - ϵ model of turbulence*". Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 30, no. 9, pag. 1787-1801, Gran Bretaña.
- De Moor, G. (1983) "*Les theories de la turbulence dans la couche limite atmosphérique*", Cours et manuels No. 3, Ecole Nationale de la Météorologie Toulouse-Mirail, Francia.

- Donaldson, C. duP. (1973) "*Construction of a dynamic model of the production of atmospheric turbulence and the dispersal of atmospheric pollutants*" En Workshop on Micrometeorology editado por Duane A. Haugen. American Meteorological Society, Science Press, USA.
- Everitt K. W y Robins A. G. (1978) "*The development and structure of turbulent plane jets*" Journal Fluid Mech., vol.88, pp. 563-583
- Favre, A. J. (1971) "*Equations statistiques aux fluctuations turbulentes dans les écoulements compressibles*" C. R. Académie de Sciences. Serie A.
- Fletcher, C. A. J. (1988) "*Computational Techniques for Fluid Dynamics*" Volumen 1 y 2. Ed. Springer-Verlag, USA.
- Gaillard, P. (1978) "*Modélisation numérique des panaches d'aéroréfrigérant*". Tesis de doctorado del Laboratorio de Mécanique de Fluides de la Ecole Centrale de Lyon, Francia.
- Gawain T.H. et Pritchett. J.W. (1970) "*A unified heuristic model of fluid turbulence*" Journal of computational physics, vol. 5.
- Gutmark E. and Wagnanski I. (1976) "*The planar turbulent jet*" J. Fluid Mech., 73, pp. 465-495.
- Ha Minh (1976) "*Découlement provoqué d'un écoulement turbulent incompressible*" Tesis de doctor en ciencias. INPT Toulouse, Francia.
- Heskestad G. (1965) "*Hot wire measurement in a plane turbulent jet*" Journal Appl. Mech., vol. 32, pp. 721-734.
- Hirsch, C. (1988) "*Numerical computation of internal and external flows*" Vol. 1. Fundamentals of numerical discretization, Ed. Jhon Wiley & sons, USA.
- Kolmogorov, A.N., (1942) "*Equations of turbulent motion of an incompressible fluid*" Izv. Akad. Nauk, SSSR, ser. Fiz. VI, Nos. 1-2, 56-58.
- Kotsovinos N. E. (1975) "*A study of the entrainment and turbulence in a plane bubbly jet*" Ph. D. Thesis, California Institute of Technology, USA.
- Launder, B. E. (1975) "*Progress in the modelling of turbulent transport*" Von Kármán Institute for Fluids Dynamics, Lecture series No. 76, Rhode St. Genèse, Bélgica.

- Launder, B. E. (1988) "*Turbulence modelling of three-dimensional shear flows*" 2nd European turbulent conference, Berlin, Alemania.
- Launder, B. E. (1991) "*Review of second-moment closure: present and future ?*" Von Kármán Institute for Fluids Dynamics, Lecture series N 1991-02, Rhode St. Genèse, Bélgica.
- Launder, B. E. y Spalding, D. B. (1972) "*Lectures in mathematical models of turbulence*". Academic Press Inc., Gran Bretaña.
- Launder, B. E. y Spalding, D. B. (1974) "*The numerical computation of turbulent flow*", Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng., vol. 3, pp. 269.
- Leschziner, M. A. (1991) "*Two equation models for high Reynolds-Number flow*" Von Kármán Institute for Fluids Dynamics, Lecture series N 1991-02, Rhode St. Genèse, Bélgica.
- Libby P. A. (1974) "*Studies related to turbulent flows involving fast chemical reactions*" Ed. Murthy.
- Lumley, J. L. y Panofsky, H. A. (1964) "*The Structure Atmospheric Turbulence*" Interscience Publisher, John Wiley & Sons, USA.
- Miller D. R. y Comings E. W. (1957) "*Static pressure distribution in the free turbulent jet*" Journal Fluid Mech., vol. 3, pp. 1-16.
- Mompean, G. (1989) "*Modélisation des écoulements turbulents avec transferts thermiques en convection mixte*". Tesis de doctorado de la Ecole Centrale de Lyon, Francia.
- Nee, V.W. y L.S.G. Kovaszny (1969) "*Simple phenomenological theory of turbulent shear flows*" Phys. Fluids, vol. 12, pp. 473-484.
- Newman, R.G., Launder, B.E. and Lumely, J.L. (1981) "*Modelling the behaviour of homogeneous scalar turbulence*" J. Fluid Mech., Vol. 111, pp. 217-232.
- Nogotov, E. F. (1978) "*Applications of numerical heat transfer*" Ed. UNESCO, Series in thermal and fluids engineering, USA.
- Peyret, R. y Taylor, T. D. (1983) "*Computational methods for fluid flow*" Ed. Springer-Verlag, USA.

- Prandtl, L., y Wieghardt (1945) "*Über ein neues Formelsystem für die ausgebildete Turbulenz*" Nach. Akad. Wiss. Goettingen, vol. 19, no. 6.
- Ramírez L., Martínez R. y Sánchez R. (1994) "*El programa Quetzal/II para el estudio de la dispersión de contaminantes atmosféricos*" VII Seminario IIE-IMP-ININ, México.
- Ramírez L., Martínez R. y Sánchez R. (1994) "*Modelos de turbulencia de primer orden para el estudio de la dispersión de contaminantes en la atmósfera*" XVI Congreso Latinoamericano de Hidráulica, vol. 6, pp. 157-168, Chile.
- Ramírez León H. (1991) "*Modélisation au second ordre d'écoulements turbulents fortement chauffés*" Tesis de doctorado del Laboratoire de Mécanique de Fluides de la école Centrale de Nantes, Francia.
- Rey, C. (1985) "*Mise en évidence des effets de variation de la masse volumique dans les équations aux corrélations des champs turbulents de vitesse et de température*", Jornadas de estudio sobre "*Les écoulements à masse volumique variables*". Marsella, Francia. pp. 29.
- Reynolds, O. (1894) "*On the dynamicla theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion*" Phil. Trans. Roy. Soc., London, vol. 186, pp. 123-164.
- Reynolds, W. C. (1976) "*Computation of Turbulent Flows*", Department of Mechanical Engineering, Stanford University, California, USA.
- Rodi, W. (1978) "*Turbulence models and their application in hydraulics*" Int. Association for Hyd. Res., Delft, Netherlands.
- Rodi, W. (1980) "*Turbulence models and their application in hydraulics: a state of the art review*" Book Publication of international association for hydraulic research, Delft, Netherlands.
- Rodi, W. (1982) "*Turbulent buoyant jets and plumes*" Ed. W. Rodi, H.M.T. Pergamon Press, Inglaterra.
- Rodi, W. (1991) "*Introduction to the modeling of turbulence*" Univerität Karlsruhe, Karlsruhe, Germany Pergamon Press.

- Roger, P. y Thomas D. T. (1983) "*Computational methods for fluid flow*". Springer series in computational physics; Springer-Verlag New York, USA.
- Rotta, J., (1951) "*Statistische theorie nichthomogener turbulenz*" Z. Phys., 129, p. 547.
- Sarh, B. (1990) "*Contribution à l'étude des jets turbulents à masse volumique variable et des flammes turbulentes de diffusion*" Tesis de doctorado de la Université Pierre et Marie Curie, Paris VI. Francia.
- Schiestel R. (1982) "*Modelisation des écoulements turbulents*", Curso I.M.S.T. Université d'Aix-Marseille II.
- Sini, J. F. (1986) "*Modélisation d'écoulements turbulents libres bidimensionnels avec effets de flottabilité. Cas du panache en milieu stratifié*". Tesis de doctorado del Institut de Mécanique Statistique de la Turbulence de L'Université d'Aix-Marseille II, Francia.
- Spalding, D. B. (1979) "*Combustion and mass transfer*" H. M. T. Pergamon press, England.
- Spalding, D. B. (1979) "*Combustion and mass transfer*" H. M. T. Pergamon press, Gran Bretaña.
- Spalding, D.B., (1971) "*Concentration fluctuation in a round turbulent free jet*" Chem. Eng. Science, Vol. 26, pp. 95-107.
- Stull, R. B. (1988) "*An introduction to boundary layer meteorology*" Kluwer Academic Publishers, Netherlands.
- Taft J. (1974) "*A numerical model for including arbitrary external boundaries in the M.A.C. incompressible fluid computing technique*" Journal of Computational Physics, vol. 4, pp. 543-551.
- Welty, J. R., Wicks, C. E. y Wilson, R. E. (1982) "*Fundamentos de transferencia de momento, calor y masa*" Ed. Limusa, México.
- Zannetti, P. (1990) "*Air pollution modeling: theories, computational methods and available software*" Computational Mechanics Publications, New York, USA.
- Zijnen, Van der Hegge B. G. (1958) "*Measurement of the velocity distribution in a plane turbulent jet of air*", Appl. Sci. Res. A7, pp. 256-276.