

01190
2
Ti.



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

**DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO
FACULTAD DE INGENIERÍA U.N.A.M.**

**SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA DISPERSIÓN
DE UNA NUBE DE PARTÍCULAS SÓLIDAS
LIBERADA A LA ATMÓSFERA**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA
P R E S E N T A E L
MAESTRO EN INGENIERÍA
RUBÉN ÁVILA RODRÍGUEZ

Ciudad Universitaria, Noviembre de 1997

**TESIS CON
FALIA 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 esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

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

**Simulación Numérica de la Dispersión de una Nube
de Partículas Sólidas Liberada a la Atmósfera**

Rubén Ávila Rodríguez

**División de Estudios de Posgrado
Facultad de Ingeniería
U.N.A.M.**

Noviembre de 1997

A Dios creador de todo lo que existe en el universo, y a Jesucristo, por sus enseñanzas.

Dedicado a la memoria de mi madre: Sara Rodríguez Frago y de mi hijo José Guadalupe, por sus 19 años.

Simulación numérica de la dispersión de una nube de partículas sólidas liberada a la atmósfera

Tesis de Doctorado en Ingeniería

Rubén Ávila Rodríguez

División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería UNAM

Resumen

Se presentan las bases teóricas y computacionales para simular numéricamente la dispersión de partículas sólidas en flujos atmosféricos. Los campos de velocidad, temperatura y energía cinética turbulenta del aire atmosférico, se determinan mediante la solución de las ecuaciones Eulerianas de conservación y de transporte del aire. La simulación de la dispersión de partículas sólidas en la atmósfera, se lleva a cabo a partir de un modelo Lagrangiano-Estocástico-Determinístico. Se presentan cinco casos de análisis en donde se demuestra la capacidad del modelo Euleriano-Lagrangiano que se propone en esta tesis, para simular distintos tipos de flujos.

En el primer caso, se presenta la solución numérica del flujo laminar de agua en el interior de un canal rectangular. Los resultados de la simulación tridimensional, se comparan de manera satisfactoria con la solución analítica.

En el segundo caso, se presenta la simulación del flujo de aire sobre una placa plana con transferencia de calor. El propósito de presentar este caso, es mostrar la capacidad del modelo para predecir flujos turbulentos sobre superficies lisas. Las varianzas de las fluctuaciones de velocidad y el esfuerzo cortante $\overline{u'v'}$, que se obtienen con el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds, se comparan satisfactoriamente con datos experimentales.

En el tercer caso, se presenta la simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras y estables. En el análisis de este caso, se utiliza tanto el modelo de turbulencia de dos ecuaciones κ - ϵ estándar como el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds. Los resultados del modelo se comparan con datos experimentales y con soluciones numéricas previamente publicadas.

En el cuarto caso, se presenta el transporte y la dispersión turbulenta de partículas que se liberan en el interior de un flujo que tiene turbulencia homogénea, isotrópica y estacionaria. En este caso, se analizan dos condiciones diferentes de liberación de partículas. En la primera condición, las partículas se liberan de manera continua, mientras que en la segunda, las partículas se liberan de manera instantánea. Ambas soluciones se comparan con las soluciones: analítica y numérica (previamente publicadas), de la ecuación de difusión-advención de concentración de especies.

En el quinto y último caso, se simula la dispersión de partículas sólidas en una región montañosa. El dominio en estudio corresponde a la región de los Geysers localizada aproximadamente a 120 km al norte de San Francisco en el estado de California en los Estados Unidos de Norteamérica. Además de simular el flujo de aire, se determina la trayectoria de una nube de partículas que se libera de manera continua durante una hora. Los resultados numéricos se comparan con resultados experimentales tomados durante la noche del 19 de septiembre de 1980, por el grupo de laboratorios nacionales norteamericanos que participaron en el programa ASCOT (Atmospheric Studies in Complex Terrain).

Numerical simulation of the dispersion of a solid particles cloud released to the atmosphere

Tesis de Doctorado en Ingeniería

Rubén Ávila Rodríguez

División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería UNAM

Abstract

The theoretical and computational fundamentals to simulate numerically the dispersion of solid particles in atmospheric flows, are presented.

The velocity, temperature and kinetic energy air flow fields, are predicted by solving the Eulerian conservation and transport equations of the atmospheric air. The dispersion of solid particles is predicted by using a Lagrangian-Stochastic-Deterministic model. In order to show the Eulerian-Lagrangian model capability to simulate different kinds of flows, five test cases are presented.

In the first case, the numerical solution of the laminar water flow in a rectangular channel is presented. The three dimensional numerical solution is compared against the analytical solution.

In the second case, the numerical simulation of the air flow over a flat plate is discussed. The air and the plate have different temperature. This case shows the capability of the model to predict turbulent flow over smooth flat surfaces. The variances of the velocity fluctuations and the shear stress $\overline{u'v'}$, obtained by using an algebraic Reynolds stress turbulence model, are compared against experimental data.

In the third case, the numerical simulation of the atmospheric boundary layer under neutral and stable conditions is presented. In this case, the standard two equations turbulence model κ - ϵ and an algebraic Reynolds stress turbulence model, are used to close the boundary layer equations. The model results are compared against both; experimental data and numerical solutions previously published in the literature.

The fourth test case, shows the transport and turbulent dispersion of particles that are released into a turbulent flow. The turbulence field of the flow is homogeneous, isotropic and steady. In this case, two different conditions are considered. In the first condition the particles are released by a continuous source, whereas in the second condition, the particles come from an instantaneous source. The results of the two conditions are compared against both; an analytical solution and a numerical solution of the Eulerian diffusion-advection equation of species conservation.

In the fifth case, the dispersion of solid particles in atmospheric flows with complex topography, is presented. The study domain, correspond to the Geysers region located approximately 120 km north of San Francisco, California in the U.S.A. In this case, the air flow field and the trajectory of particles released during a time period of one hour, are predicted. The numerical results are compared against the experimental data taken the night 19-20 september 1980, by the group of north american national laboratories that were involved in the ASCOT (Atmospheric Studies in Complex Terrain) program.

Contenido

Prólogo	x
Nomenclatura	xiv
1 Introducción	1
1.1 Motivación	1
1.2 Antecedentes	2
1.3 Modelos de diagnóstico	3
1.4 Modelos de pronóstico	19
1.5 Objetivos	23
2 Modelos matemáticos de la fase continua - aire atmosférico	24
2.1 Ecuación de continuidad	25
2.2 Ecuación de cantidad de movimiento en x	25
2.3 Ecuación de cantidad de movimiento en y	25
2.4 Ecuación de cantidad de movimiento en z	26
2.5 Ecuación de la energía térmica	28
2.6 Ecuación de la energía cinética turbulenta	33
2.7 Ecuación para la disipación de la energía cinética turbulenta	35
3 Modelo algebraico de los esfuerzos de Reynolds	36
4 Modelo de dispersión de partículas, Lagrangiano Estocástico Determinístico	51
4.1 Características generales del modelo de dispersión de partículas	55
4.2 Ecuación de cantidad de movimiento de una partícula sólida	57
4.3 Escala de tiempo y escala de longitud de los remolinos turbulentos	62
4.4 Fracción volumétrica promedio y velocidades medias de la fase dispersa	63
4.4.1 Número de partículas en el interior de un volumen de control	64
4.5 Energía cinética turbulenta de la fase dispersa	66
4.6 Términos fuente de interacción entre la fase continua y la fase dispersa	67
4.6.1 Términos fuente de cantidad de movimiento	67
4.6.2 Término fuente de intensidad de turbulencia	68
4.6.3 Término fuente de disipación de energía turbulenta	69

5	Método de solución de las ecuaciones de la fase continua	72
5.1	Forma general de las ecuaciones	72
5.2	Integración de las ecuaciones en los volúmenes de control	72
5.3	Función de variación de la variable general ϕ	73
5.4	Método implícito para integrar el término temporal y método híbrido para integrar el término advectivo	73
5.5	Método iterativo para coeficientes y términos fuente no lineales	74
5.6	Mallas numéricas escalonadas (staggered grids)	74
5.7	Algoritmo SIMPLE	75
5.8	Solución de las ecuaciones algebraicas lineales	76
6	Presentación de resultados obtenidos con el modelo ATFLOW-LSD	78
6.1	Flujo de Poiseuille en un ducto con sección transversal cuadrada	80
6.2	Flujo turbulento sobre una placa plana con superficie lisa	84
6.3	Simulación de la capa límite atmosférica, utilizando un modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds	93
6.3.1	Modelo matemático	94
	Ecuación de cantidad de movimiento en x	95
	Ecuación de cantidad de movimiento en z	95
	Ecuación de la energía térmica	95
	Ecuación de la energía cinética turbulenta	96
	Ecuación de la disipación de energía turbulenta	96
	Constantes del modelo de turbulencia y condiciones de frontera	96
6.3.2	Simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras, utilizando el modelo κ - ϵ estándar	98
6.3.3	Simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras, utilizando el modelo κ - ϵ con constantes modificadas	103
6.3.4	Simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras, utilizando el modelo κ - ϵ modificado	107
6.3.5	Simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras y estables, utilizando el modelo κ - ϵ modificado	112
6.4	Simulación numérica de la dispersión de partículas en un flujo turbulento	125
6.4.1	Dispersión de partículas que se liberan de manera continua, en un flujo turbulento uniforme	127
6.4.2	Dispersión de partículas que se liberan de manera instantánea, en un flujo turbulento con cortante	136
6.5	Simulación numérica de la dispersión de partículas sólidas en zona de montaña	142
6.5.1	Descripción general del experimento en la región de los Geysers, en septiembre de 1980	142
6.5.2	Discretización de la región de estudio y condiciones de frontera	145
6.5.3	Condiciones generales de la liberación de partículas sólidas, en la simulación numérica	148
6.5.4	Presentación de resultados	150

7	Conclusiones	159
7.1	Trabajo de investigación a futuro	161
A		163
A.1	Elementos de la matriz $A(i, j)$ para el cálculo de los esfuerzos de Reynolds $\overline{u'_i u'_j}$ y flujos de calor $\overline{u'_i \theta'}$	163
B		168
B.1	Desarrollo de los términos que constituyen la ecuación algebraica de los esfuerzos de Reynolds, $\frac{\overline{u'_i u'_j}}{\kappa}$ y la ecuación algebraica de los flujos de calor, $-\overline{u'_i \theta'}$	168
C		170
C.1	Parametrización de las funciones ϕ_m , ϕ_h , Ψ_m y Ψ_h	170
D		172
D.1	Muestra de los datos experimentales tomados la noche del 19-20 de septiembre, en el valle Anderson Springs	172
	Bibliografía	181

Lista de figuras

6.1	Velocidad longitudinal en el plano $y-z$, obtenida a partir de la solución analítica. Flujo de Poiseuille $Re_{D_h}=12.5$	82
6.2	Velocidad longitudinal en el plano $y-z$, obtenida a partir de la solución numérica. Flujo de Poiseuille $Re_{D_h}=12.5$	82
6.3	Distribución de velocidades analítica y numérica, y distribución de errores, a lo largo del eje z ($y=0$). Flujo de Poiseuille $Re_{D_h}=12.5$	83
6.4	Distribución de velocidades analítica y numérica, y distribución de errores, a lo largo de ejes paralelos al eje z , $y=\pm 0.00079$ m	83
6.5	Distribución de velocidades analítica y numérica, y distribución de errores a lo largo de ejes paralelos al eje z , $y=\pm 0.00237$ m	84
6.6	Distribución de errores en la sección transversal. Flujo de Poiseuille $Re_{D_h}=12.5$	84
6.7	Perfiles de velocidad media, energía cinética turbulenta, y esfuerzo cortante. Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_\delta=7.5 \times 10^4$	86
6.8	Relación entre el esfuerzo cortante turbulento y la energía cinética turbulenta. Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_\delta=7.5 \times 10^4$	87
6.9	Distribución de la velocidad media en la capa límite, utilizando las coordenadas y^+ y u^+ . Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_\delta=7.5 \times 10^4$	88
6.10	Distribución de la temperatura media en la capa límite, utilizando las coordenadas y^+ y T^+ . Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_\delta=7.5 \times 10^4$	89
6.11	Variación del coeficiente de fricción local C_f con respecto al número de Reynolds Re_x . Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_\delta=7.5 \times 10^4$	90
6.12	Intensidad relativa de los tres esfuerzos normales, u_{rms}/U_e , v_{rms}/U_e , w_{rms}/U_e , y esfuerzo cortante $\overline{u'v'}$. Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_\delta=7.5 \times 10^4$	91
6.13	Variación de las velocidades medias \bar{u} y \bar{w} con respecto a la altura, y su comparación con mediciones y resultados numéricos. Modelo $\kappa-\epsilon$ standard	99
6.14	Variación del ángulo θ formado por las velocidades horizontales \bar{u} y \bar{w} . Modelo $\kappa-\epsilon$ standard	100
6.15	Variación de la energía cinética turbulenta κ y de la viscosidad turbulenta ν_t con respecto a la altura. Modelo $\kappa-\epsilon$ standard	101

6.16	Variación de las velocidades medias \bar{u} y \bar{w} con respecto a la altura, y su comparación con mediciones y resultados numéricos. Modelo κ - ϵ standard con la constante $C_{1\epsilon}=1.83$	104
6.17	Variación del ángulo θ formado por las velocidades horizontales \bar{u} y \bar{w} . Modelo κ - ϵ standard con la constante $C_{1\epsilon}=1.83$	105
6.18	Variación de la energía cinética turbulenta κ y de la viscosidad turbulenta ν_t con respecto a la altura. Modelo κ - ϵ standard con la constante $C_{1\epsilon}=1.83$	106
6.19	Variación de la disipación de energía turbulenta ϵ . Modelo κ - ϵ standard con la constante $C_{1\epsilon}=1.83$	107
6.20	Variación de las velocidades medias \bar{u} y \bar{w} con respecto a la altura, y su comparación con mediciones y resultados numéricos. Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación	108
6.21	Variación del ángulo θ formado por las velocidades horizontales \bar{u} y \bar{w} . Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación	109
6.22	Variación de la energía cinética turbulenta κ y de la viscosidad turbulenta ν_t con respecto a la altura. Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación	110
6.23	Variación de la escala de longitud de la turbulencia $l_m(y)=0.064 \kappa^{3/2}/\epsilon$. Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación	111
6.24	Variación de las velocidades longitudinales \bar{u} con respecto a la altura, para una atmósfera neutra y para una atmósfera estable ($q_s=-23.6 \text{ W/m}^2$)	114
6.25	Variación de las velocidades transversales \bar{w} con respecto a la altura, para una atmósfera neutra y para una atmósfera estable ($q_s=-23.6 \text{ W/m}^2$)	115
6.26	Variación del ángulo θ formado por las velocidades horizontales, \bar{u} y \bar{w} . Atmósfera neutra y atmósfera estable ($q_s=-23.6 \text{ W/m}^2$)	116
6.27	Variación de la energía cinética turbulenta κ con respecto a la altura, para una atmósfera neutra y para una atmósfera estable ($q_s=-23.6 \text{ W/m}^2$)	117
6.28	Variación de la viscosidad turbulenta ν_t con respecto a la altura, para una atmósfera neutra y para una atmósfera estable ($q_s=-23.6 \text{ W/m}^2$) .	118
6.29	Variación de la temperatura potencial $\bar{\theta}$ con respecto a la altura. Atmósfera estable ($q_s=-23.6 \text{ W/m}^2$)	120
6.30	Variación en el interior de la capa límite de los esfuerzos normales $\overline{u'u'}$, $\overline{v'v'}$ y $\overline{w'w'}$, normalizados con respecto a la resultante de la velocidad de fricción u_τ . Atmósfera neutra	122
6.31	Variación en el interior de la capa límite de los esfuerzos normales $\overline{u'u'}$ y $\overline{v'v'}$, normalizados con respecto a la resultante de la velocidad de fricción u_τ . Atmósfera estable ($q_s=-23.6 \text{ W/m}^2$)	123
6.32	Variación en el interior de la capa límite de las correlaciones $\overline{v'\theta'}$ y $\overline{u'\theta'}$, normalizadas con respecto al flujo de calor cinemático ($q_o=q_s/\rho c_p$). Atmósfera estable ($q_s=-23.6 \text{ W/m}^2$)	124
6.33	Variación de las características turbulentas con respecto al tiempo . .	130
6.34	Distribución de partículas en el plano x - z . Liberación continua en un flujo turbulento uniforme	133

6.35	Número de partículas en las celdas que se ubican a lo largo de la línea paralela al eje x ($y=1,037$ m, $z=1,037$ m). Liberación continua en un flujo turbulento uniforme	135
6.36	Número de partículas en las celdas que se ubican a lo largo de la línea paralela al eje z ($x=11,407$ m, $y=1,037$ m). Liberación continua en un flujo turbulento uniforme	136
6.37	Distribución de partículas en el plano $x-z$. Liberación instantánea en un flujo turbulento con cortante, 5,000 partículas	137
6.38	Número de partículas en las celdas que se ubican a lo largo del eje x ($y=0$ m, $z=0$ m). Liberación instantánea en un flujo turbulento con cortante, 5,000 partículas	139
6.39	Número de partículas en las celdas que se ubican a lo largo del eje z ($x=0$ m, $y=0$ m). Liberación instantánea en un flujo turbulento con cortante, 5,000 partículas	140
6.40	Concentración relativa $\chi(0,0,0,t)/\chi_0$, como función del tiempo. Liberación instantánea en un flujo turbulento con cortante, 5,000 partículas	141
6.41	Valle Anderson Springs, con los arroyos Anderson, Gunning y Putah .	143
6.42	Perspectiva del valle Anderson Springs, en la región de los Geysers . .	146
6.43	Perfil de velocidades en el plano $x-z$ localizado a 1,110 m sobre el nivel del mar. Experimento en el valle Anderson Springs	149
6.44	Perfiles de velocidad en diferentes planos $x-y$. Experimento en el valle Anderson Springs	150
6.45	Perfil de velocidades en el plano $x-y$ donde se ubica la sonda Ridge y la sonda Thorne 7	151
6.46	Perfil de velocidades en el plano $x-y$ donde se ubica la sonda Unit 19 .	152
6.47	Perfil de velocidades en el plano $x-y$ donde se ubica la sonda Rancho T y la sonda Oakmont	152
6.48	Perfil de velocidades en el plano $x-y$ donde se ubica la sonda D. East .	153
6.49	Vista superior de la distribución total de partículas una hora después de haberse iniciado la liberación	154
6.50	Vista superior de la distribución total de partículas dos horas después de haberse iniciado la liberación	155
6.51	Vista superior de la distribución total de partículas tres horas después de haberse iniciado la liberación	156
6.52	Vista superior de la distribución total de partículas que se han depositado sobre la superficie, una hora después de haberse iniciado la liberación	157
6.53	Vista superior de la distribución total de partículas que se han depositado sobre la superficie, dos horas después de haberse iniciado la liberación	158
6.54	Vista superior de la distribución total de partículas que se han depositado sobre la superficie, tres horas después de haberse iniciado la liberación	158
D.1	Datos meteorológicos en la sonda Ridge	173
D.2	Datos meteorológicos en la sonda Unit 19	174
D.3	Datos meteorológicos en la sonda Thorne 7	175

D.4	Datos meteorológicos en la sonda Rancho T	176
D.5	Datos meteorológicos en la sonda Larrys Q	177
D.6	Datos meteorológicos en la sonda Oakmont	178
D.7	Datos meteorológicos en la sonda D. East	179
D.8	Concentración en la superficie del gas trazador PMCH	180

Prólogo

La idea de desarrollar un modelo computacional para simular el comportamiento de la atmósfera, y que además estuviera en posibilidad de calcular la trayectoria de partículas sólidas, me surgió en el momento que se dió la noticia de que había sucedido el más grave accidente que le pueda ocurrir a un reactor nuclear. En ese año (1986), yo me encontraba en el Instituto de Mecánica de Fluidos de la Universidad de Erlangen-Nürnberg en Alemania, realizando trabajo de investigación, en el área de flujos en dos fases con partículas sólidas en suspensión. Recuerdo que la situación; en relación con el material que había sido lanzado hacia la atmósfera en forma de partículas, fue de total incertidumbre, ya que nadie sabía hacia donde se dirigía la nube de partículas radioactivas.

La idea que tuve después del accidente del reactor nuclear de Chernobyl, empezó a consolidarse años más tarde, en el momento que un grupo de investigadores de la UNAM, me invitó a una serie de reuniones en las que se comentó sobre la posibilidad de desarrollar, un modelo computacional que estuviera en condiciones de simular el comportamiento del aire de la atmósfera. Entre estos investigadores se encontraba el Dr. Eduardo Ramos y la Dra. Rina Aguirre. En aquel entonces (1990); no se tenía una idea muy precisa del método numérico y del algoritmo de solución que se incorporaría en el programa de cómputo. Durante las reuniones, se platicó que el esquema numérico debería ser al menos tridimensional y en estado transitorio.

Algunos años después (1993), se iniciaron las actividades para desarrollar el modelo computacional que se presenta en este trabajo. A partir de entonces, el Dr. Jaime Cervantes (director de esta tesis) y el Dr. Eduardo Ramos, han seguido muy de cerca los avances logrados.

En este trabajo, se presentan las bases teóricas y computacionales para simular la dispersión de partículas sólidas en la atmósfera.

El estudio de la dispersión de partículas sólidas y líquidas en el interior de un flujo turbulento, ha sido abordado desde tiempo atrás por investigadores en el campo de la ingeniería mecánica, particularmente en el diseño de quemadores que utilizan, ya sea carbón o hidrocarburos líquidos. En estos dispositivos, es de mucha importancia determinar la trayectoria de las partículas de combustible, para optimizar la eficiencia de la combustión.

A lo largo de esta tesis, se mencionan los aspectos relevantes y las aportaciones del presente trabajo de investigación doctoral. A manera de síntesis, las aportaciones más significativas son las siguientes: (a) desarrollo de un modelo computacional (tridimensional y en estado transitorio), que determina el campo de velocidades y temperaturas del aire de la atmósfera, en condiciones neutras y estables, (b) desarrollo de un mo-

delo algebraico de esfuerzos de Reynolds, el cual es utilizado tanto para determinar el campo de velocidades del aire atmosférico, como para determinar la trayectoria de partículas y (c) desarrollo del modelo Lagrangiano Estocástico Determinístico (LSD), que permite predecir la dispersión de partículas sólidas en la atmósfera.

El autor desea comentar, que la gran mayoría de los estudios en meteorología consideran a las partículas como elementos de fluido, otros cuantos, incluyen la velocidad terminal de una partícula esférica, en su ecuación de cantidad de movimiento. Pero hasta donde el autor tiene conocimiento, no se ha incorporado de manera conjunta, la influencia que el fluido en su movimiento turbulento tiene sobre las partículas y la influencia que tienen las partículas sobre el fluido. El acoplamiento en dos sentidos, es de mucha importancia, sobre todo si se toman en cuenta situaciones en donde la concentración de partículas, es tan grande que el campo de velocidades del fluido se modifica. El autor desea reconocer que su campo de investigación no es la meteorología, sin embargo, la experiencia de varios años de investigación en el área de flujos en dos fases con partículas en suspensión, le han permitido formular un modelo Euleriano-Lagrangiano para el cálculo de la dispersión de partículas sólidas en la atmósfera. Además, es el deseo del autor que las contribuciones de este trabajo, se consideren como una aportación de la ingeniería mecánica, a la meteorología.

En el primer capítulo, se presentan algunos de los antecedentes del estudio de flujos atmosféricos con partículas (consideradas como elementos de fluido). Con el propósito de describir las características de los modelos de diagnóstico, se presenta el modelo Euleriano-Lagrangiano MATHEW-ADPIC. Este modelo es uno de los modelos que más se ha utilizado para realizar la simulación de eventos en donde se libera de manera accidental, una nube de partículas tóxicas. Durante la presentación del modelo MATHEW-ADPIC, se comentan los diferentes enfoques que existen en la actualidad, para cerrar las ecuaciones del flujo turbulento. En el primer capítulo, se presenta también el modelo de diagnóstico Euleriano-Lagrangiano ERAD. Para comprender el modelo de dispersión de partículas que se incluye en ERAD y en el modelo que se presenta en este trabajo, fue necesario incluir la teoría sobre la cual se basan los métodos de Monte Carlo y los métodos de cadenas de Markov. Estos métodos han sido utilizados ampliamente por los meteorólogos para simular la dispersión de partículas, que se comportan como elementos de fluido. Al final del capítulo de introducción, se presentan brevemente las características generales de los modelos meteorológicos de pronóstico. Se citan algunos de los modelos que existen en la actualidad.

En el segundo capítulo, se presentan las ecuaciones que rigen el comportamiento del aire de la atmósfera. Se presentan las dos formas posibles de incluir el campo de presiones en las ecuaciones de cantidad de movimiento. La primer forma, considera que la presión en las ecuaciones, es únicamente función de las características térmicas y dinámicas del flujo. La segunda forma, toma en cuenta que la presión en las ecuaciones diferenciales; está constituida por la presión hidrostática más la presión correspondiente a las características térmicas y dinámicas del flujo. Utilizando un enfoque similar al que se consideró para definir la forma de tratar el campo de presiones, se introduce la definición de la temperatura potencial. En el segundo capítulo, se presenta la definición de las condiciones: neutras, estables e inestables, que se presentan en la atmósfera.

En el tercer capítulo, se presentan los detalles del modelo de turbulencia conocido

en la literatura como: modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds. Se presentan las expresiones algebraicas que permiten cuantificar la influencia de la superficie terrestre, sobre las fluctuaciones de presión-deformación, que aparecen en las ecuaciones de los esfuerzos de Reynolds y sobre las fluctuaciones de presión-gradiente de temperatura, que aparecen en las ecuaciones de los flujos turbulentos de calor. Se aprovecha esta parte de la discusión, para presentar en detalle las condiciones de frontera de las ecuaciones que rigen el movimiento turbulento del aire de la atmósfera.

En el cuarto capítulo, se presenta el modelo de dispersión de partículas sólidas LSD. Se describen las características del movimiento de una partícula sólida en el interior de un flujo turbulento. Se describe el algoritmo que utiliza el modelo para generar la nube inicial de partículas sólidas. La nube inicial puede tener geometría esférica o tener forma de "hongo". Esta última se genera debido a una carga explosiva. Se presenta el algoritmo utilizado en el modelo, para definir la condición de frontera de las partículas. El algoritmo utiliza las reglas de probabilidad condicional para determinar si la partícula en su trayectoria: abandona el dominio de estudio (se deposita sobre la superficie terrestre) o permanece en el aire.

En el quinto capítulo, se presentan las características generales del método numérico de los volúmenes finitos de control. Este método es el que se utiliza para resolver las ecuaciones diferenciales que se presentaron en el capítulo 2. Se menciona brevemente el algoritmo SIMPLE, el cual permite determinar el campo de presiones a partir de que el campo de velocidades, satisface el principio de conservación de masa.

Al inicio del sexto y último capítulo, se mencionan los trabajos de investigación que se han realizado, durante las diferentes etapas del desarrollo del modelo que se presenta en este trabajo. Se presentan cinco casos de análisis, en los cuales se muestra la capacidad que tiene el modelo de simular apropiadamente diferentes tipos de flujo; desde el flujo laminar en el interior de un ducto con sección transversal cuadrada (primer caso), hasta la dispersión de partículas sólidas, en un flujo atmosférico con topografía compleja (quinto caso). Con los resultados obtenidos en los cinco casos que se analizan (y con los trabajos de investigación que se han llevado a cabo hasta la fecha), es posible concluir que se cuenta; no solamente con un modelo computacional que permite resolver las ecuaciones diferenciales que se presentan en este trabajo, sino que es un modelo, que puede ser la base para el desarrollo de temas futuros de investigación, tanto básica como aplicada.

Muchas personas han contribuido a que el autor haya llegado a obtener el grado de doctor, en esta apasionante disciplina que es la mecánica de los fluidos. No quisiera dejar de mencionar al maestro Dagoberto de la Serna, quien influyó sustancialmente en mi decisión por estudiar esta disciplina. El maestro de la Serna, al dar su clase de la materia: Mecánica del Medio Continuo en la Facultad de Ingeniería de la UNAM, se refería con mucho entusiasmo a la utilidad que tienen las ecuaciones diferenciales en la solución de problemas que se presentan en la industria aeroespacial. El Ing. Augusto Sánchez C., profesor de la Facultad de Ingeniería e investigador durante varios años del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ), me dió la oportunidad de iniciarme (en el ININ) en el estudio e investigación de la mecánica de los fluidos. El Dr. Jaime Cervantes, director y asesor de esta tesis, y además muy buen amigo mío, me confió la tarea de desarrollar los modelos numéricos necesarios, durante el proyecto

de investigación conjunta entre México y Alemania, denominado: "Transferencia de Calor y Masa en Flujos en Dos Fases con Partículas en Suspensión". En el marco de este proyecto conjunto, tuve la oportunidad de trabajar durante casi dos años con el Profesor, Dr. Franz Durst, del Instituto de Dinámica de Fluidos de la Universidad de Erlangen-Nürnberg, quien junto con los Drs. George Scheuerer, Dragoslav Milojevic y Thomas Börner, me iniciaron en la simulación numérica, de los flujos en dos fases con partículas sólidas en suspensión. El Dr. Eduardo Ramos, quien con su paciencia y asesoría siempre me influyó ánimo para llegar a la conclusión de este trabajo.

Deseo agradecer a las autoridades del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, lugar en donde he desarrollado mi actividad como investigador, el gran apoyo que recibí para la realización de este trabajo. El apoyo recibido por las autoridades de la Facultad de Ingeniería de la UNAM, especialmente por el Dr. Francisco Solorio, se agradece grandemente. También deseo agradecer, el apoyo recibido por la Dirección General de Servicios de Cómputo Académico (DGSCA), ya que sin tener acceso a la supercomputadora Cray YMP, no hubiese sido posible realizar gran parte de los cálculos que se presentan en este trabajo. Deseo agradecer el apoyo brindado por todas las personas que laboran en el Laboratorio de Visualización de la DGSCA, especialmente al Fis. Joaquín Hernández y al Mat. Juan López. Quisiera mencionar que este laboratorio es único en México y sin el cual, no hubiese sido posible generar las animaciones en video que acompañan este trabajo escrito. Agradezco el apoyo moral de varios de los miembros de la División de Dinámica de Fluidos de la Sociedad Mexicana de Física, quienes estuvieron al tanto del desarrollo de este trabajo.

Agradezco mucho la paciencia, el cariño y el apoyo decidido de mi esposa María Esther y de mis traviosos pero inteligentes y responsables hijos: María Esther y Rubén.

Agradezco también el apoyo recibido por mi Padre, el Dr. Alfonso Ávila, quien me enseñó desde muy pequeño el hábito del estudio. Agradezco el gran apoyo recibido por mis hermanos: Alfonso, Jorge, Luis y Leticia.

Rubén Ávila Rodríguez

Nomenclatura

a	coeficiente del modelo de cadenas de Markov [], ec. (1.47); velocidad del sonido [m/s] (cap. 2); radio de la nube de partículas [m](cap. 4)
b	coeficiente del modelo de cadenas de Markov [], ec. (1.48)
B	constante de la ley logarítmica de pared [], ec. (6.8)
c_p	calor específico del fluido a presión constante [J/kg·K]
c_o	constante del modelo de turbulencia [], ec. (6.40)
c_μ	constante del modelo de turbulencia [], ec. (3.69)
C_f	coeficiente de fricción local [], ec. (6.15)
C_o	constante universal [], ec. (1.31)
C_s	constante del modelo de turbulencia [], ec. (2.49)
C_T	constante del modelo de dispersión [], ec. (4.34)
C_1	constante del modelo de turbulencia [], ec. (3.10)
C'_1	constante del modelo de turbulencia [], ec. (3.23)
C_2	constante del modelo de turbulencia [], ec. (3.11)
C''_2	constante del modelo de turbulencia [], ec. (3.24)
$C \cdot$	constante del modelo de turbulencia [], ec. (3.12)
C_ϵ	constante del modelo de turbulencia [], ec. (2.52)
$C_{1\epsilon}$	constante del modelo de turbulencia [], ec. (2.50)
$C_{2\epsilon}$	constante del modelo de turbulencia [], ec. (2.50)
$C_{3\epsilon}$	constante del modelo de turbulencia [], ec. (6.43)
$C_{4\epsilon}$	constante del modelo de turbulencia [], ec. (6.44)
$C'_{1\epsilon}$	función del modelo de turbulencia modificado [], ec. (6.42)
C'_θ	constante del modelo de turbulencia [], ec. (3.46)
$C_{1\theta}$	constante del modelo de turbulencia [], ec. (3.16)

$C'_{1\theta}$	constante del modelo de turbulencia [], ec. (3.26)
$C_{2\theta}$	constante del modelo de turbulencia [], ec. (3.17)
$C_{3\theta}$	constante del modelo de turbulencia [], ec. (3.18)
d_p	diámetro de la partícula [m]
dW_i	número aleatorio independiente [$s^{1/2}$], ec. (1.31)
D'	difusión adimensional [], ec. (6.71)
D	tensor de difusividad del fluido [m^2/s], ec. (1.7)
D_h	diámetro hidráulico, 4 Área/Perímetro [m]
D_{ii}^f	coeficiente de dispersión del fluido [m^2/s], ec. (4.6)
D_{ii}^p	coeficiente de dispersión de las partículas [m^2/s], ec. (4.5)
f	función de corrección de pared de las fluctuaciones de presión [], (cap. 3); coeficiente de arrastre no lineal [], ec. (4.11)
f_c	parámetro de Coriolis [1/s]
g	aceleración de la gravedad [m/s^2]
G	producción de energía cinética turbulenta por flotación [$kg/m \cdot s^3$], ec. (3.14)
G_{ij}	producción de esfuerzos de Reynolds por flotación [$kg/m \cdot s^3$], ec. (3.4)
$G_{i\theta}$	producción de flujos turbulentos de calor por flotación [$kg K/m^2 \cdot s^2$], ec. (3.6)
H_t	altura de la nube de partículas [m], (cap. 4)
l	escala de longitud de la turbulencia [m], (cap. 3)
l_m	escala de longitud de la turbulencia [m], (cap. 3)
L	escala de longitud de Monin-Obukhov [m], ec. (3.49); longitud total de la placa [m], (cap. 6)
L_e	longitud de entrada [m]
L_f	escala integral de longitud (Euleriana) [m], (cap. 4)
M_{TNT}	masa equivalente de TNT [kg], (cap. 4)
m_p	masa de la partícula [kg]
N_p	número de partículas []
p	presión [N/m^2]
p_e	presión estándar [N/m^2], (cap. 2)

p_o	presión hidrostática [N/m ²], ec. (2.11)
p_1	desviación de la presión con respecto a la presión hidrostática [N/m ²]
P	producción de energía cinética turbulenta por el cortante medio [kg/m·s ³], ec. (3.13)
$PBLD$	altura de la capa límite planetaria [m], (cap. 6)
P_{ij}	producción de esfuerzos de Reynolds por el cortante medio [kg/m·s ³], ec. (3.3)
P_θ	producción de la varianza $\overline{\theta'^2}$ [kg K ² /m ³ ·s], ec. (3.38)
$P_{i\theta}$	producción de flujos turbulentos de calor por cortante medio [kg K/m ² ·s ²], ec. (3.5)
Pr	número de Prandtl []
Pr_t	número de Prandtl turbulento []
q	flujo de calor por unidad de área [W/m ²]
q_o	flujo de calor cinemático [m K/s], figura 6.32
q_s	flujo de calor por unidad de área en la superficie [W/m ²]
Q	flujo volumétrico [m ³ /s], ec. (6.2)
\bar{r}	coordenadas de las partículas [m], ec. (1.11)
R	relación entre escalas de tiempo [], ec. (3.45)
Re_{D_h}	número de Reynolds basado en el diámetro hidráulico [], ec. (6.3)
Re_x	número de Reynolds basado en la distancia x [], ec. (6.13)
Re_δ	número de Reynolds basado en el espesor de capa límite [], (cap. 6)
Re_p	número de Reynolds de la partícula [], ec. (4.12)
R_f	número de Richardson [], ec. (3.89)
R_{ij}^f	correlación de velocidad del fluido en contacto con las partículas [], ec. (4.1)
R_{ij}^p	correlación de velocidad de las partículas [], ec. (4.2)
R_{L_i}	coeficiente de correlación Lagrangiana [], ec. (1.40)
s	entropía [m ² /s ² ·K], (cap. 2)
Sc_t	número de Schmidt turbulento []
S_{ij}	influencia de la superficie sobre las fluctuaciones de presión-velocidad [kg/m·s ³], ec. (3.9)

$S_{i\theta}$	influencia de la superficie sobre las fluctuaciones de presión-temperatura [kg K/m ² ·s ²], ec. (3.15)
t	tiempo [s]
T	temperatura del fluido [K]; tiempo total transcurrido [s], ec. (6.73)
T'	tiempo adimensional [], (cap. 6)
$\overline{T^+}$	temperatura adimensional []
T_L	escala integral de tiempo Lagrangiana [s]
T_{mE}	escala integral de tiempo Euleriana [s], cap. (4)
T_{ii}^f	escala integral de tiempo del fluido en contacto con las partículas [s], ec. (4.4)
T_{ii}^p	escala integral de tiempo de las partículas [s], ec. (4.3)
T_1	desviación de la temperatura con respecto a la temperatura adiabática [K]
T_o	temperatura media adiabática del fluido [K]
T_s	temperatura de la superficie [K]
$\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$	velocidades medias del fluido [m/s]
$\bar{u}_o, \bar{v}_o, \bar{w}_o$	velocidades del fluido interpoladas [m/s], ec. (1.1)
u_{anal}, u_{num}	velocidad a partir de la solución analítica y solución numérica respectivamente [m/s]
u^+	velocidad adimensional []
u, v, w	velocidades instantáneas del fluido [m/s]
u', v', w'	fluctuaciones de velocidad del fluido [m/s]
u'_p, v'_p, w'_p	velocidades de las partículas [m/s]
u_g, w_g	velocidades geostróficas [m/s]
u_{rms}	desviación estándar de las fluctuaciones de velocidad en turbulencia isotrópica [m/s], ec. (6.51)
$\overline{u_i^2}$	varianza de las fluctuaciones de velocidad [m ² /s ²]
$\overline{u_i u_j}$	esfuerzos de Reynolds [m ² /s ²]
$\overline{u_i \theta'}$	flujos turbulentos de calor [m K/s]
$\overline{u' u'}$	varianza de las fluctuaciones de velocidad en la dirección x [m ² /s ²], figuras 6.30 y 6.31
\bar{u}_d	velocidad de difusión de partículas [m/s], ec. (1.9)

\bar{u}_p	velocidad de transporte de partículas [m/s], ec. (1.9)
u_j^p	fluctuaciones de velocidad del fluido en contacto con las partículas [m/s], (cap. 4)
u_τ	velocidad de fricción [m/s]
u_{τ_x}	componente x de la velocidad de fricción [m/s], ec. (3.53)
u_{τ_z}	componente z de la velocidad de fricción [m/s], ec. (3.54)
\mathbf{U}	vector de velocidad de las partículas [m/s], (cap. 1)
U_c	velocidad del fluido fuera de la capa límite [m/s], (cap. 6)
U_{rel}	velocidad relativa partículas-fluido [m/s], ec. (4.13)
v	volumen específico del fluido [m ³ /kg], (cap. 2)
v_d	velocidad terminal de las partículas [m/s], (cap. 4)
v_i	fluctuaciones de velocidad de las partículas [m/s], (cap. 4)
$\overline{v'v'}$	varianza de las fluctuaciones de velocidad en la dirección y [m ² /s ²], figuras 6.30 y 6.31
$\overline{w'w'}$	varianza de las fluctuaciones de velocidad en la dirección z [m ² /s ²], figuras 6.30 y 6.31
w^+	velocidad adimensional []
\mathbf{x}	vector de la posición inicial de las partículas [m], (cap. 1)
x, y, z	coordenadas cartesianas [m]
x_p, y_p, z_p	posición de las partículas [m], (cap. 6)
\mathbf{X}	vector de posición de las partículas [m], (cap. 1)
\mathbf{X}_γ	fuerza de cuerpo en la dirección vertical [N/m ³], ec. (2.1)
y_i	altura de la capa de inversión térmica [m]
y_o	parámetro de rugosidad [m]
y_p	punto localizado en la vecindad de la superficie [m]
y^+	distancia adimensional []
$\overline{Y^2}$	varianza del desplazamiento de las partículas en la dirección y [m ²]
$\overline{Z^2}$	varianza del desplazamiento de las partículas en la dirección z [m ²]

Símbolos griegos

α	difusividad molecular [m ² /s], ec. (3.39)
α_o	ángulo formado por las velocidades del viento [rad], (cap. 3)
α_t	difusividad turbulenta de energía térmica [m ² /s]
β	coeficiente de expansión térmica [1/K]

β_1	constante para atmósfera estable en la definición de ϕ_m [], ec. (3.95)
β_2	constante para atmósfera inestable en la definición de ϕ_m [], ec. (3.99)
γ	relación de calores específicos []
Γ	gradiente adiabático de la temperatura [K/m]
δ	espesor de la capa límite [m], (cap. 6)
δt	incremento de tiempo Lagrangiano [s]
Δt	incremento de tiempo Euleriano [s]
ΔV	volumen de la celda numérica [m ³]
ϵ	disipación de energía cinética turbulenta [m ² /s ³]
ϵ_θ	disipación de la varianza $\overline{\theta'^2}$ [K ² /s], ec. (3.39)
θ	temperatura potencial [K], (cap. 2); ángulo de giro de la espiral de Ekman [grados], (cap. 6)
θ'	fluctuación de temperatura [K]
$\overline{\theta'^2}$	varianza de las fluctuaciones de temperatura [K ²]
$\bar{\theta}$	valor medio de la temperatura potencial del fluido [K]
θ_τ	temperatura de conducción [K], ec. (3.55)
κ	energía cinética turbulenta [m ² /s ²]
κ_o	constante de von Kármán []
κ_T	conductividad térmica [W/m·K]
λ	escala de longitud de la turbulencia [m], (cap. 6)
λ_L	escala de longitud los remolinos turbulentos [m], ec. (4.36)
μ	viscosidad dinámica molecular [kg/m·s]
μ_t	viscosidad dinámica turbulenta [kg/m·s]
ν_t	viscosidad cinemática turbulenta [m ² /s]
ν_{tx}	componente x de la viscosidad turbulenta [m ² /s], ec. (3.60)
ν_{tz}	componente z de la viscosidad turbulenta [m ² /s], ec. (3.61)
ξ	variable adimensional [], ec. (3.48)
Π_{ij}	correlaciones de presión-deformación [kg/m·s ³], ec. (3.7)
$\Pi_{ij,1}$	correlaciones de presión-deformación debido a las fluctuaciones de velocidad [kg/m·s ³], ec. (3.10)
$\Pi_{ij,2}$	correlaciones de presión-deformación debido al gradiente de la velocidad media y a las fluctuaciones de velocidad [kg/m·s ³], ec. (3.11)

$\Pi_{ij,3}$	correlaciones de presión-deformación debido a flotación [$\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}^3$], ec. (3.12)
$\Pi'_{ij,1}$	influencia de la superficie sobre las correlaciones de presión-deformación $\Pi_{ij,1}$ [$\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}^3$], ec. (3.23)
$\Pi'_{ij,2}$	influencia de la superficie sobre las correlaciones de presión-deformación $\Pi_{ij,2}$ [$\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}^3$], ec. (3.24)
$\Pi'_{ij,3}$	influencia de la superficie sobre las correlaciones de presión-deformación $\Pi_{ij,3}$ [$\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}^3$]
$\Pi_{i\theta}$	correlaciones de presión-gradiente de temperatura [$\text{kg K}/\text{m}^2\cdot\text{s}^2$], ec. (3.7)
$\Pi_{i\theta,1}$	correlaciones de presión-gradiente de temperatura debido a las fluctuaciones de velocidad y temperatura [$\text{kg K}/\text{m}^2\cdot\text{s}^2$], ec. (3.16)
$\Pi_{i\theta,2}$	correlaciones de presión-gradiente de temperatura debido al gradiente de la velocidad media y a las fluctuaciones de temperatura [$\text{kg K}/\text{m}^2\cdot\text{s}^2$], ec. (3.17)
$\Pi_{i\theta,3}$	correlaciones de presión-gradiente de temperatura debido a flotación [$\text{kg K}/\text{m}^2\cdot\text{s}^2$], ec. (3.18)
$\Pi'_{i\theta,1}$	influencia de la superficie sobre las correlaciones de presión-deformación $\Pi_{i\theta,1}$ [$\text{kg K}/\text{m}^2\cdot\text{s}^2$], ec. (3.26)
$\Pi'_{i\theta,2}$	influencia de la superficie sobre las correlaciones de presión-deformación $\Pi_{i\theta,2}$ [$\text{kg K}/\text{m}^2\cdot\text{s}^2$]
$\Pi'_{i\theta,3}$	influencia de la superficie sobre las correlaciones de presión-deformación $\Pi_{i\theta,3}$ [$\text{kg K}/\text{m}^2\cdot\text{s}^2$]
ρ	densidad del fluido [kg/m^3]
σ_v	desviación estándar de las fluctuaciones de velocidad [m/s]
σ_c	número de Prandtl de la disipación de turbulencia []
σ_κ	número de Prandtl de la energía turbulenta []
τ	variable temporal [s]
τ_{ij}	tensor de esfuerzos [N/m^2]
τ_L	tiempo de vida característico de los remolinos Lagrangianos [s], ec. (4.34)
τ_p	tiempo característico de la partícula [s], ec. (4.10)
Υ	tensor de la varianza del desplazamiento de las partículas [m^2]
ϕ	variable general

ϕ_h	función universal de energía térmica en la capa superficial []
ϕ_m	función universal de cantidad de movimiento en la capa superficial []
$\bar{\chi}$	concentración de especies [], ec. (1.7)
χ_o	concentración de especies inicial []
χ_p	concentración de partículas en un volumen de control [N_p/m^3]
Ψ_h	función universal de energía térmica en la capa superficial []
Ψ_m	función universal de cantidad de movimiento en la capa superficial []
ω	velocidad angular de la tierra [rad/s]

Capítulo 1

Introducción

1.1 Motivación

El ser humano durante su historia, se ha enfrentado a un sinnúmero de situaciones adversas que han puesto en riesgo su existencia. Entre estas adversidades destacan los fenómenos naturales (incendios, temblores, erupciones, tornados, huracanes y avalanchas) y los fenómenos creados por el hombre mismo, ya que en su afán por conseguir una mejor calidad de vida, ha ocasionado que el aire del medio ambiente se deteriore al grado que con frecuencia se presentan situaciones de emergencia (liberación de gases y partículas tóxicas a la atmósfera, explosiones y contaminación ambiental).

Algunos de estos fenómenos están estrechamente relacionados con la capacidad que tiene la atmósfera para transportar y dispersar partículas suspendidas.

En particular, en una erupción, una cantidad inmensa de material volcánico es lanzado hacia la atmósfera en forma de ceniza. En una explosión una buena parte del material contenedor de la fuente de energía es liberado en forma de partículas. Durante un incendio las corrientes convectivas transportan partículas hacia las capas superiores de la atmósfera. En las zonas industriales y urbanas los productos de la combustión (gases o partículas sólidas) que son liberados ocasionan daños al medio ambiente. El transporte del polen, granizo y gotas de lluvia son ejemplos adicionales de flujos atmosféricos con partículas en suspensión.

El estudio teórico y computacional de los flujos atmosféricos acompañados por una nube de partículas, recibió un gran impulso a partir de la décadas de los 70's, debido principalmente a los siguientes factores: (a) los altos índices de contaminación que se presentan en diversas ciudades, en donde no es favorable la dispersión de los gases, (b) los daños ocasionados por los fenómenos naturales o por la liberación accidental de gases tóxicos, (c) el accidente nuclear de Chernobyl (1986), (d) el desarrollo de algoritmos computacionales que resuelven las ecuaciones que rigen el comportamiento del aire de la atmósfera, (e) el desarrollo de modelos de turbulencia que permiten determinar la varianza de las fluctuaciones de velocidad ($\overline{u_i^2}$), las cuales interaccionan con la trayectoria de partículas suspendidas en el aire, y (f) el incremento de la velocidad de proceso y capacidad de almacenamiento de los sistemas de cómputo.

En el presente trabajo, se establecen las bases teóricas y computacionales que permiten comprender, modelar y simular los flujos atmosféricos con partículas en sus-

pensión.

Contribuir al conocimiento de estos flujos, es de interés para el autor ya que al desarrollar modelos capaces de predecir la dispersión de nubes tóxicas, se podrán establecer zonas de riesgo de las instalaciones industriales, e identificar políticas a seguir en caso de accidentes severos.

1.2 Antecedentes

Determinar la dispersión de contaminantes gaseosos o sólidos que son liberados a la atmósfera es un problema difícil de abordar. La complicada naturaleza de los procesos físicos y químicos que una nube de partículas experimenta en un flujo atmosférico, la irregularidad de la superficie terrestre, la estratificación de la atmósfera y los cambios con respecto al tiempo de las características medias y turbulentas del flujo de aire; son algunos de los factores que hacen que la solución al problema de la dispersión de partículas sea muy compleja. Como se mencionó en la sección [1.1], el estudio de los flujos con partículas tuvo un gran impulso a partir de la década de los 70's. Anteriormente, este tipo de flujos fue estudiado de manera intensiva por los militares de los Estados Unidos de Norteamérica (EUA), ya que en caso de detonación accidental, o por actos de terrorismo, de un explosivo químico colocado en un depósito de armas nucleares, era necesario conocer la dispersión y trayectoria de las partículas radioactivas y consecuentemente determinar las acciones a tomar en cuanto a evacuación y resguardo de la población civil (Church, 1969), (Cederwall and Peterson, 1990), (Beck, 1984), (Thompson, 1990), (Beck and Anspaugh, 1990), (Glasston and Dolan, 1977), (Baskett and Cederwall, 1991a). Estos estudios se realizaron mediante experimentos llevados a cabo en el estado de Nevada de los EUA desde 1955 a 1963, año en que se prohibió que plutonio en forma de aerosol se liberara a la atmósfera (Boughton and DeLaurentis, 1992).

El accidente del reactor nuclear de Chernobyl (Dickerson and Sullivan, 1986); motivó que la industria nuclear tomara conciencia de la importancia de realizar investigación relacionada con el cálculo de la dispersión intercontinental de partículas (Zannetti, 1990) y la determinación del término fuente (energía y cantidad de material que se libera en caso de accidente severo) de una central nuclear.

Al principio de la década de los 80's, la industria aeronáutica se interesó en el problema de flujos atmosféricos con partículas suspendidas, ya que ocurrieron incidentes en donde aviones de pasajeros se dañaron al encontrarse de manera repentina con nubes de ceniza volcánica. En 1982 dos aviones del tipo Jumbo 747-200 (en un lapso de tres semanas), se encontraron con ceniza proveniente de dos erupciones del volcán Galunggung en Java, Indonesia. En ambos casos la ceniza volcánica entró a las turbinas haciendo que las aeronaves perdieran empuje; por lo que tuvieron que aterrizar con dificultad en el aeropuerto de Jakarta. Entre diciembre de 1989 y febrero de 1990, cinco aviones comerciales sufrieron daño al encontrarse con nubes de ceniza proveniente del volcán Redoubt en Alaska. El incidente más serio le ocurrió a un Jumbo 747-400, cuyo costo de reparación se evaluó en \$80 millones de dólares (Casadeval, 1991).

A partir de los años 70 's, diversos grupos de investigación han desarrollado modelos

matemático-computacionales, con el objeto de entender los fenómenos meteorológicos locales (< 10 km), intermedios (entre 10 km y 100 km), regionales (> 100 km) y globales (del orden de las dimensiones de la capa atmosférica), y proporcionar los parámetros meteorológicos (velocidad, temperatura y características turbulentas) requeridos por los modelos de dispersión de partículas. Sin embargo, la física que se incluye en varios de estos códigos es limitada (Williams and Yamada, 1990), tal es el caso de los modelos que hacen uso de la tradicional formulación Gaussiana, o aquéllos que consideran que la velocidad media y las características turbulentas del flujo de aire son independientes del tiempo. En la actualidad, los modelos matemático-computacionales son la herramienta más adecuada tanto para determinar las características meteorológicas de la atmósfera, como para realizar estudios de la calidad del aire. Estos modelos se clasifican en dos grupos: (a) modelos de diagnóstico y (b) modelos de pronóstico. En algunos casos, ambos modelos han sido acoplados con modelos de dispersión de partículas del tipo Lagrangiano. El acoplamiento de los modelos meteorológicos con los modelos de dispersión de partículas; da como resultado que se tenga un enfoque híbrido (Euleriano-Lagrangiano) al problema de la dispersión. Las variables meteorológicas que influyen en la dispersión de partículas; se determinan en un dominio Euleriano ya sea al interpolar valores medidos (métodos de diagnóstico) o al resolver las ecuaciones diferenciales (métodos de pronóstico) que rigen el comportamiento del aire de la atmósfera. El enfoque Lagrangiano; consiste en seguir varios miles de trayectorias individuales de partículas (o cúmulos de partículas) en el interior de los volúmenes (celdas) utilizados para discretizar el dominio en estudio. La naturaleza tan complicada de los mecanismos de interacción entre la fase continua (aire) y la fase dispersa (partículas); ha propiciado que existan diferentes alternativas para modelar los fenómenos físicos de difusión turbulenta.

A continuación se presentan algunas características de los modelos meteorológicos (Euleriano-Lagrangianos), que son utilizados en la actualidad.

1.3 Modelos de diagnóstico

Los modelos de diagnóstico, calculan los parámetros meteorológicos a partir de la interpolación o extrapolación de datos experimentales. El campo de velocidades se encuentra al satisfacer la ecuación de continuidad $\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0$, donde $\bar{\mathbf{u}} = \bar{u}_1 \mathbf{i} + \bar{u}_2 \mathbf{j} + \bar{u}_3 \mathbf{k}$. Desafortunadamente, al satisfacer exclusivamente el criterio de no divergencia, no es posible conocer una solución única, por lo que se requiere de condiciones adicionales, comúnmente en la forma de parámetros de estabilidad (parámetros empíricos dependientes de la estabilidad de la atmósfera), que deben de cumplirse para poder escoger una solución de las muchas que satisfacen la ecuación de continuidad (Boughton and DeLaurentis, 1992). Estos modelos, tienen las siguientes desventajas: (a) requieren para su funcionamiento de una gran cantidad de datos experimentales, que deben ser tomadas mediante redes densas de medición, (b) no son utilizados para predecir la evolución temporal de las variables meteorológicas, sino que proporcionan una estimación de la condición en estado estacionario, (c) no es posible predecir apropiadamente flujos tridimensionales, estratificados a mesoescala (Lyons et al., 1993). La

ventaja principal de estos métodos es que incorporan información tomada de mediciones. Uno de los modelos híbridos de diagnóstico más conocidos, es el constituido por el modelo meteorológico MATHEW (Mass-Consistent Three-dimensional Wind field) y el modelo de dispersión ADPIC (the Atmospheric Diffusion Particle-in-Cell), desarrollados en la década de los 70's en el Laboratorio Nacional de Lawrence Livermore (LLNL) en los EUA (Sherman, 1978), (Lange, 1978).

El modelo MATHEW-ADPIC, constituye el núcleo computacional del sistema ARAC (Atmospheric Release Advisory Capability), el cual es un servicio de respuesta a emergencias en caso de liberación accidental de material nuclear hacia la atmósfera. Este servicio, tiene la tarea (asignada por el Departamento de Energía de los EUA) de estimar el impacto de accidentes radiológicos que pueden ocurrir en cualquier parte del mundo (Dickerson and Lange, 1986), (Gudiksen et al., 1985).

La experiencia del grupo del LLNL es muy amplia ya que desde 1973 (Lange, 1973), han realizado múltiples ejercicios de simulación de la dispersión de contaminantes atmosféricos a escala intermedia (mesoescala) (Rodríguez and Rosen, 1984), a escala regional (Lange, 1978), (Ellis and Sullivan, 1991), a escala intercontinental (Rodríguez, 1988) y han respondido a situaciones de emergencia tales como el accidente nuclear de Chernobyl (Dickerson and Sullivan, 1986). El modelo MATHEW-ADPIC, también ha sido utilizado para validar modelos que simulan la evolución temporal de una nube de partículas, en los segundos posteriores a una explosión química (Baskett and Cederwall, 1991a), (Foster et al., 1990).

MATHEW, es un modelo de diagnóstico, tridimensional, a escala regional que determina el campo de velocidades en coordenadas cartesianas a partir de una formulación variacional. En este modelo, se define una funcional integral (E), la cual si se minimiza ($\delta E = 0$); se obtienen expresiones algebraicas que hacen mínima la varianza de la diferencia entre los valores "observados" y los valores "ajustados" de las velocidades. En la definición de la funcional; se considera que los valores "ajustados" deben satisfacer la condición de no-divergencia del vector velocidad (Rodríguez et al., 1985). La funcional utilizada en MATHEW es la siguiente (Sherman, 1978):

$$E(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}, \lambda) = \int_V \left[\alpha_h^2 (\bar{u} - \bar{u}_o)^2 + \alpha_h^2 (\bar{v} - \bar{v}_o)^2 + \alpha_v^2 (\bar{w} - \bar{w}_o)^2 + \lambda \nabla \cdot \bar{u} \right] dx dy dz \quad (1.1)$$

donde: $\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ son las velocidades "ajustadas" o calculadas por el modelo, $\bar{u}_o, \bar{v}_o, \bar{w}_o$, son velocidades interpoladas o extrapoladas a partir de datos experimentales (valores "observados"), λ es un multiplicador de Lagrange y los valores α_h y α_v , son los factores de "peso" de Gauss ("Gauss precision moduli"), en la dirección horizontal y en la dirección vertical respectivamente. Los factores de Gauss dependen de la estabilidad atmosférica y de la razón de aspecto de las celdas Eulerianas, en las cuales se divide el dominio (Rodríguez et al., 1985). Las expresiones que minimizan la funcional (1.1), tienen la siguiente forma:

$$\bar{u} = \bar{u}_o + \frac{1}{2\alpha_h^2} \frac{\partial \lambda}{\partial x} \quad (1.2)$$

$$\bar{v} = \bar{v}_o + \frac{1}{2\alpha_h^2} \frac{\partial \lambda}{\partial y} \quad (1.3)$$

$$\bar{w} = \bar{w}_o + \frac{1}{2\alpha_v^2} \frac{\partial \lambda}{\partial z} \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} = 0 \quad (1.5)$$

La ecuación de λ , se obtiene al derivar las ecuaciones (1.2-1.4) y sustituir el resultado en la ecuación (1.5), por lo que se obtiene la ecuación elíptica de Poisson:

$$\frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \lambda}{\partial y^2} + \left(\frac{\alpha_h^2}{\alpha_v^2} \right) \frac{\partial^2 \lambda}{\partial z^2} = -2\alpha_h^2 \left(\frac{\partial \bar{u}_o}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}_o}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}_o}{\partial z} \right) \quad (1.6)$$

La ecuación (1.6), se resuelve numéricamente (mediante diferencias finitas) en un dominio definido por un prisma rectangular, cuya superficie inferior se localiza en la región de menor nivel topográfico. La región de estudio se discretiza en una malla rectangular con tamaños de celda Δx , Δy , Δz . La forma de analizar superficies complejas en MATHEW, es a partir del "bloqueo" de las celdas rectangulares, las cuales se localizan en la frontera sólida (velocidad nula). Utilizando este tipo de procedimiento, no es posible simular adecuadamente la topografía de la región, ya que se analizan geometrías en forma de "dientes de sierra" cuyo tamaño depende de la discretización del dominio. Para resolver este problema, es necesario recurrir a los métodos numéricos que permiten deformar las fronteras (método de elemento finito) o resolver las ecuaciones de transporte en coordenadas generalizadas. Estos últimos, hacen uso de los algoritmos que permiten deformar las mallas computacionales, y ajustarlas a la geometría de la superficie (body fitted coordinates). El modelo matemático que se presenta en esta tesis (como se explicará en detalle), resuelve las ecuaciones de conservación y transporte en coordenadas cartesianas, por lo que recurre también al bloqueo de volúmenes rectangulares para simular geometrías complejas.

Una vez que se conoce la distribución de los factores $\lambda(x, y, z)$; el campo de velocidades "ajustado" se determina a partir de las ecuaciones (1.2-1.4). Estas velocidades constituyen el campo de vientos, que será utilizado por el modelo ADPIC para calcular la difusión de contaminantes. Recientemente Gross (Gross, 1996), comparó los resultados obtenidos con un modelo tridimensional (no-hidroestático), semejante al que se presenta en este trabajo doctoral, con los obtenidos con un modelo de diagnóstico similar a MATHEW. Gross, realizó estudios sobre la aplicabilidad de los modelos de diagnóstico (mass-consistent) para el caso de dos geometrías: una correspondiente a superficie homogénea (región costera) y la otra en zona montañosa. Las conclusiones más relevantes del trabajo de Gross fueron: (a) el campo de velocidades "ajustado", depende en gran medida del campo inicial de velocidades que se obtiene a partir de mediciones e interpolaciones, (b) la evolución temporal del campo de velocidades no puede ser determinada adecuadamente, (c) entre menor es el número de datos proporcionados al procedimiento variacional, el error es cada vez mayor, (d) para una orografía complicada, los modelos de diagnóstico proporcionan resultados adecuados, únicamente si se cuenta con una red muy densa de medición. El comentario más interesante de Gross es en el sentido de que, si no se dispone de redes muy densas de medición, la utilización general de estos métodos no es recomendable.

ADPIC, es un modelo de difusión de partículas, que permite determinar la dispersión de contaminantes atmosféricos en diferentes condiciones como son: (a) campos de velocidad no uniformes, (b) rugosidad de la superficie no uniforme, (c) precipitación seca y húmeda, (d) decaimiento radioactivo y (e) parámetros difusivos que dependen del espacio y del tiempo. ADPIC, resuelve a partir de un procedimiento Euleriano-Lagrangiano, la ecuación tridimensional de advección-difusión en coordenadas cartesianas. El campo de velocidades del aire atmosférico, es proporcionado por el modelo MATHEW. El algoritmo de dispersión incluido en ADPIC, es el llamado Particle-in-Cell algorithm (Crowe et al., 1977) (Crowe, 1982), el cual considera que varios miles de partículas individuales (representadas como trazadores Lagrangianos), se desplazan en el interior de una malla numérica Euleriana. En ADPIC, se supone que las partículas se mueven con una velocidad de transporte (pseudo-velocidad) que es función de la velocidad del aire, de los coeficientes del tensor de difusividad turbulenta \mathbf{D} y del gradiente de la concentración de la fase dispersa $\nabla\bar{\chi}$. La expresión de la velocidad que transporta a las partículas, se obtiene al representar la ecuación de advección-difusión en la siguiente forma:

$$\frac{\partial\bar{\chi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\chi}\bar{\mathbf{u}}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla\bar{\chi}) \quad (1.7)$$

Si se combinan los dos términos de divergencia, se obtiene:

$$\frac{\partial\bar{\chi}}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\bar{\chi} \left(\bar{\mathbf{u}} - \frac{\mathbf{D}}{\bar{\chi}} \nabla\bar{\chi} \right) \right] = \frac{\partial\bar{\chi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\chi}\bar{\mathbf{u}}_p) = 0 \quad (1.8)$$

donde \mathbf{D} es el tensor de difusividad turbulenta (3x3) cuyos elementos son cero excepto en la diagonal principal. Se ha observado que en la atmósfera; los coeficientes de difusión turbulenta en la dirección horizontal son diferentes al coeficiente de difusión en la dirección vertical, es decir: $D_{11} = D_x = D_{22} = D_y \neq D_{33} = D_z$. La velocidad de transporte (pseudo-velocidad) se expresa como:

$$\bar{\mathbf{u}}_p = \bar{\mathbf{u}} - \bar{\mathbf{u}}_d \quad (1.9)$$

donde la velocidad de difusión es:

$$\bar{\mathbf{u}}_d = \frac{\mathbf{D}}{\bar{\chi}} \nabla\bar{\chi} \quad (1.10)$$

El procedimiento de solución de la ecuación Euleriana de advección-difusión, a partir del modelo Lagrangiano incluido en ADPIC sigue los siguientes pasos:

(a).- Si se conoce el campo de concentraciones en el tiempo t ($\bar{\chi}_t$), a partir de las condiciones iniciales o a partir del resultado de una iteración anterior, entonces es posible calcular la velocidad de difusión $\bar{\mathbf{u}}_d$, la cual se suma al campo de velocidades "ajustado" $\bar{\mathbf{u}}$ (proporcionado por MATHEW), para obtener las pseudo-velocidades $\bar{\mathbf{u}}_p$ ec. (1.9).

(b).- Se calcula la nueva posición de cada partícula, considerando que son transportadas con la velocidad $\bar{\mathbf{u}}_p$, durante el intervalo de tiempo Δt , es decir:

$$\bar{\mathbf{r}}_{t+\Delta t} = \bar{\mathbf{r}}_t + \bar{\mathbf{u}}_p \Delta t \quad (1.11)$$

donde $\bar{r}_{t+\Delta t}$ y \bar{r}_t , representan las coordenadas de las partículas en el tiempo anterior y posterior respectivamente.

(c).-Con la nueva distribución de partículas, se calcula la concentración $\bar{\chi}_{t+\Delta t}$, que dará inicio al siguiente ciclo.

Con el propósito de discutir el modelo de turbulencia que utiliza ADPIC para definir la difusividad turbulenta D y la velocidad de difusión \bar{u}_d , a continuación, se presenta una breve descripción de los modelos utilizados en la actualidad para el cálculo de flujos turbulentos.

Para representar las características turbulentas de un fluido en movimiento, se recurre regularmente a descomponer el valor instantáneo de las variables dependientes, que aparecen en las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento, energía, etc., en un valor medio más una fluctuación: $a = \bar{a} + a'$, en donde a puede ser cualquiera de las variables: densidad ρ , velocidad u_i , presión p , temperatura potencial θ , concentración χ , etc. Al sustituir la descomposición de Reynolds en las ecuaciones de conservación y transporte, y realizar un promedio estadístico, surgen los términos turbulentos: $\overline{u'_i u'_j}$, $\overline{u'_i \theta'}$, $\overline{u'_i \chi'}$, etc., los cuales tienen que ser representados ya sea a partir de relaciones semi-empíricas que incluyen el primer momento (valor medio) de la variable en cuestión; o a partir de ecuaciones de transporte para cada uno de los términos turbulentos (segundos momentos). Sin embargo; en las ecuaciones de los segundos momentos aparecen correlaciones de mayor orden (terceros momentos), las cuales tendrán que ser modeladas a su vez, ya sea a partir relaciones semi-empíricas que son función de correlaciones de menor orden; o a partir de formular nuevas ecuaciones para los terceros momentos, ésto conduce al problema de "cerradura".

En los modelos de diagnóstico que son acoplados con modelos de dispersión de partículas, los términos turbulentos se determinan exclusivamente a partir de relaciones empíricas. Esta forma de modelar la turbulencia, tiene la desventaja de que los parámetros que se incluyen en las relaciones empíricas, tienen que ser ajustados dependiendo del tipo de flujo en estudio (Ying and Canuto, 1996).

En los modelos de pronóstico, las correlaciones turbulentas se evalúan a partir de diferentes modelos entre los que se cuentan principalmente:

.-(a) modelos de segundo orden, los cuales resuelven ecuaciones de transporte para los segundos momentos: $\overline{u'_i u'_j}$, $\overline{u'_i \theta'}$, $\overline{\theta'^2}$, $\overline{u'_i \chi'}$, etc. Las correlaciones de tercer orden que aparecen en estas ecuaciones se modelan mediante formulaciones semi-empíricas.

(b) Los modelos de primer orden, los cuales "cierran" las ecuaciones de transporte en el primer momento estadístico. Estos modelos, recurren a la aproximación de Boussinesq (Launder and Spalding, 1972) para representar los términos turbulentos como función de un coeficiente de difusión, y del gradiente del primer momento de las variables dependientes, es decir:

$$-\overline{u'_i u'_j} = \nu_t \left[\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \delta_{ij} \kappa \quad (1.12)$$

$$-\overline{u'_i \theta'} = \alpha_t \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \quad (1.13)$$

$$-\overline{u'_i \chi'} = D_t \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x_i} \quad (1.14)$$

donde: ν_t es la difusividad turbulenta de cantidad de movimiento, $\alpha_t = \nu_t/Pr_t$ es la difusividad turbulenta de energía térmica (Pr_t es el número de Prandtl turbulento), $D_t = \nu_t/Sc_t$ es la difusividad turbulenta de concentración (Sc_t es el número de Schmidt turbulento) y $\kappa = 0.5(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2})$ es la energía cinética turbulenta.

El principal problema de estos modelos es contar con una expresión para evaluar el coeficiente de difusividad turbulenta; el cual es una representación de las escalas de velocidad y de las escalas de longitud de la turbulencia. Según sea la forma de evaluar la difusividad turbulenta, los modelos de primer orden se clasifican en:

.-modelos algebraicos, los cuales no resuelven ecuaciones diferenciales de transporte para las cantidades turbulentas (modelos de longitud de Mezcla).

.-modelos de una ecuación, en donde se resuelve una ecuación de transporte para la escala de velocidad (energía cinética turbulenta κ).

.-modelos de dos ecuaciones, en donde se resuelve una ecuación de transporte para κ y otra ecuación para la escala de longitud de la turbulencia (regularmente se considera la ecuación para la disipación de energía turbulenta ϵ).

(c) Modelos híbridos, jerárquicamente se encuentran entre los modelos de segundo y primer orden, y tienen la ventaja de que combinan las características de cada uno de ellos (Hanjalić, 1994). Se recurre a los modelos híbridos, ya que los modelos de turbulencia basados en la difusividad turbulenta (modelos de primer orden), no son capaces de cuantificar el valor de cada esfuerzo normal $\overline{u'^2}$, $\overline{v'^2}$, $\overline{w'^2}$, lo cual es fundamental para el estudio del transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera (Ying and Canuto, 1996). Por otro lado, utilizar un modelo de segundo orden para evaluar los flujos turbulentos, implica resolver al menos seis ecuaciones de transporte para los esfuerzos de Reynolds ($\overline{u'_i u'_j}$), tres ecuaciones para los flujos de calor $\overline{u'_i \theta'}$ y una ecuación para la varianza de las fluctuaciones de temperatura $\overline{\theta'^2}$. El trabajo de resolver al menos este sistema de ecuaciones, no es trivial y sobre todo no es económico considerando la tecnología actual de computadoras (Ying and Canuto, 1996), (Uliasz, 1994b).

Como un compromiso entre exactitud y eficiencia, varios autores han desarrollado los modelos híbridos conocidos como Modelos Algebraicos de los Esfuerzos de Reynolds (Algebraic Reynolds Stress Models ARSM) (Rodi, 1980), (Gibson and Launder, 1978), (Ying and Canuto, 1996), los cuales no recurren al concepto de difusividad turbulenta, sino que utilizan expresiones algebraicas para los segundos momentos. Para obtener las expresiones algebraicas, se supone que los flujos turbulentos son función de los valores locales de la energía cinética turbulenta (κ) y de la la disipación de energía turbulenta (ϵ).

Los modelos híbridos, actualmente representan la forma más adecuada de representar flujos a mesoescala, sobre todo si el campo de velocidades resultante está acoplado con un modelo de dispersión de partículas (Uliasz, 1994b).

Una vez que se han descrito de manera general los modelos que se utilizan con mayor frecuencia para el cálculo de flujos turbulentos, no es difícil identificar que en ADPIC, los términos turbulentos de la ecuación de concentración $\overline{\chi}$, se modelan utilizando la aproximación de Boussinesq. La difusividad turbulenta en la dirección horizontal, se conoce a partir de formulaciones semi-empíricas que dependen de las características de la fuente (continua o instantánea). El coeficiente de difusión vertical D_z , se calcula

tomando en cuenta las características dinámicas (esfuerzos cortantes debido a la presencia de la superficie terrestre) y térmicas (movimientos convectivos) de la atmósfera (Rodríguez et al., 1985).

Es importante hacer notar que el modelo ADPIC, supone que la difusividad turbulenta de concentración es igual a la difusividad turbulenta de cantidad de movimiento (lo cual no es necesariamente cierto). Esta igualdad de difusividades, se observa en la formulación que evalúa el desplazamiento de las partículas ec. (1.9), en donde se supone que el tensor de difusividades de concentración D , es el que gobierna el desplazamiento turbulento de las partículas. En ADPIC, el cálculo de la dispersión de partículas, se realiza sin considerar las escalas de longitud y tiempo de los remolinos turbulentos. Las partículas en ADPIC, se consideran únicamente como trazadores, los cuales se comportan como "Elementos de Fluidos" (excepto por que se considera una velocidad terminal para partículas más pesadas que el aire), por lo que no se toman en cuenta los efectos de inercia, ni el efecto de trayectorias cruzadas (partículas-remolino turbulento) (Snyder and Lumley, 1971), (Wells and Stock, 1983). De acuerdo a la clasificación de los métodos Lagrangianos, ADPIC se encuentra dentro de la familia de los métodos Determinísticos, ya que no toma en consideración la estructura estocástica de los remolinos turbulentos que se encuentran en interacción con las partículas. En conclusión, el modelo MATHEW-ADPIC, a pesar de que tiene serias deficiencias desde el punto de vista de la física involucrada (ya que únicamente satisface la condición de no divergencia), es un algoritmo que se utiliza ampliamente para el cálculo de la dispersión de contaminantes en cualquier parte del mundo. La razón por la cual es utilizado, incluso en sistemas de emergencia de aviso oportuno, se debe fundamentalmente a que computacionalmente es muy económico ya que no involucra la solución de ninguna ecuación, ya sea de conservación, o de transporte.

Otro de los modelos de diagnóstico (Lagrangiano-Euleriano), utilizado en la actualidad para determinar la dispersión de partículas en la atmósfera, es el modelo ERAD (the Explosive Release Atmospheric Dispersion model), desarrollado en el Laboratorio Nacional de Sandia, EUA, (Boughton and DeLaurentis, 1992), (Boughton et al., 1987). En ERAD, el campo de velocidades del viento; se determina únicamente mediante la interpolación de datos experimentales y es utilizado por el modelo de dispersión de partículas sin satisfacer el principio de conservación de masa del aire. Boughton y DeLaurentis (Boughton and DeLaurentis, 1992), argumentan que el satisfacer la condición de no divergencia no es de mucha importancia, ya que el campo de velocidades resultante depende (como ya se ha mencionado) de diversos parámetros externos (factores de peso de Gauss y de la base de datos que representa la topografía y vegetación del dominio en estudio). Además mencionan, que la evidencia disponible; no indica que el uso de un modelo que satisface la ecuación de continuidad mejora de manera significativa la capacidad de predicción de la dispersión de partículas.

Con el propósito de identificar las características del modelo de dispersión utilizado en ERAD (y en el modelo que se propone en este trabajo doctoral); a continuación se presentan las bases teóricas de los modelos matemáticos que se proponen en la literatura, para calcular la trayectoria de partículas en el interior de un flujo turbulento.

De acuerdo a la teoría de la difusión debida al movimiento turbulento continuo (diffusion by continuous turbulent movement), formulada inicialmente por Taylor (Hinze,

1975), la manera natural de describir la difusión turbulenta; es mediante la determinación de la trayectoria aleatoria de un gran número de partículas individuales, y evaluar a lo largo de esta trayectoria, las características estadísticas Lagrangianas de la turbulencia.

La descripción Lagrangiana propuesta por Taylor, constituye la base de los dos tipos de modelos estocásticos (stochastic or random-walk models) propuestos en la literatura para el cálculo de trazadores pasivos: (a) modelos de Montecarlo (modelos Markovianos de orden cero) y (b) modelos de Cadenas de Markov (modelos Markovianos de primer orden) (Thomson, 1987), (Wang and Stock, 1992b), (Luhar and Rao, 1993), (Sawford, 1985), (Wilson and Sawford, 1996), (Baas et al., 1986), (Boughton et al., 1987).

En estos modelos, se supone que las partículas se comportan como elementos de fluido (volumen de fluido que tiene dimensiones lineales que son muy grandes comparadas con la distancia promedio entre moléculas; pero al mismo tiempo son tan pequeñas que la velocidad y la presión en el interior del volumen, se pueden considerar prácticamente constantes).

En la literatura, la mayoría de los autores coinciden en que los métodos de partículas tienen las siguientes características:

-La descripción Lagrangiana, es adecuada para el estudio de la dispersión en flujos turbulentos complicados (turbulencia no-homogénea, no-estacionaria, con distribución de probabilidad no Gaussiana), en donde otros procedimientos, tales como la teoría de semejanza o la teorías del transporte debido al gradiente (métodos de difusividad turbulenta), no son apropiados.

-En los modelos Lagrangianos, la dispersión; representada por el tensor de la varianza del desplazamiento de las partículas $\Upsilon_{ii}(t) = \overline{Y_i^2(t)} \approx \overline{u_i^2} t^2$, se describe de manera satisfactoria para intervalos de tiempo muy pequeños $t \ll T_L$, donde T_L es la escala integral de tiempo Lagrangiana. Esta característica no la tiene el procedimiento Euleriano; el cual define una difusividad turbulenta válida para escalas de tiempo mucho mayores que la escala T_L . Monin y Yaglom (Monin and Yaglom, 1971), presentan una interesante discusión, en la que apartir de tomar en cuenta las características probabilísticas de la ecuación semi-empírica de difusión-advención ec. (1.7); demuestran que esta ecuación es válida únicamente cuando el tiempo de difusión es grande en comparación con la escala lagrangiana T_L .

-En los modelos de trayectorias, la conservación de masa se satisface de manera natural y no se tienen problemas de difusión numérica.

-Los modelos de trayectorias, son llamados de "una partícula", ya que cada partícula tiene un movimiento independiente de las otras.

-Si el número de Reynolds es grande, la aceleración de la partícula está auto-correlacionada únicamente en intervalos de tiempo del orden de la escala de tiempo de Kolmogorov τ_n (escala de tiempo en la que los procesos viscosos transforman la energía cinética turbulenta en calor). Para esta misma condición de número de Reynolds grande, el efecto de la difusión molecular puede considerarse despreciable, por lo que las partículas trazadoras se desplazan a la misma velocidad del fluido (Thomson, 1987).

-En los métodos Lagrangianos, es más directo tratar fenómenos tales como: flotación, evaporación de gotas, decaimiento radioactivo y liberación de partículas con propiedades

físicas diferentes entre sí.

Con el propósito de comprender las bases teóricas de los modelos Lagrangianos o modelos estocásticos de dispersión de trazadores pasivos; es conveniente establecer la relación que existe entre estos métodos y la tradicional descripción Euleriana.

En un marco de referencia Euleriano, la velocidad de un fluido $u_i(x, t)$ y la concentración $\chi(x, t)$ de un material pasivo que se introduce en su interior, se definen en puntos fijos del espacio en el tiempo t . La evolución de los campos de velocidad y de concentración, se describen a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes y de la ecuación de conservación de especies:

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\partial u_\alpha \chi}{\partial x_\alpha} = D \nabla^2 \chi \quad (1.15)$$

donde D es la difusividad molecular.

En la descripción Euleriana de un flujo turbulento, el promedio estadístico conduce, como ya se ha mencionado, al problema de cierre de las ecuaciones de evolución de las velocidades medias \bar{u}_i y de la concentración media $\bar{\chi}$. Es decir, después de realizar el promedio estadístico, aparecen términos de mayor orden, tales como el vector de flujo turbulento de material pasivo $S_\alpha = \overline{u'_i \chi'}$. Utilizando la aproximación de Boussinesq (Monin and Yaglom, 1971), para el caso de turbulencia anisótropa se tiene:

$$S_i = -D_{ij} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x_j} \quad (1.16)$$

donde el tensor de difusividad turbulenta D_{ij} , es función de la posición y el tiempo. Utilizando la hipótesis semi-empírica ec. (1.16), se obtiene la ecuación Euleriana de difusión-advección de conservación de especies para un flujo turbulento ec. (1.7).

Si se formula la ecuación de conservación de especies ec. (1.15), desde el punto de vista Lagrangiano, resulta la siguiente expresión:

$$\frac{d\chi}{dt} = D \nabla^2 \chi \quad (1.17)$$

la cual describe la concentración en un marco de referencia localizado en un punto que se desplaza con el fluido. La posición \mathbf{X} y la velocidad \mathbf{U} (letras mayúsculas se refieren a variables Lagrangianas) de este punto, en cualquier tiempo t , dependen de su posición inicial \mathbf{x} y del tiempo t en consideración. En cada instante de tiempo, la partícula trazadora se mueve con la velocidad Euleriana del punto en que se localiza, es decir: $\mathbf{U} = \mathbf{u}[\mathbf{X}(\mathbf{x}, t), t]$

Si el número de Reynolds es grande, la difusividad molecular, como ya se ha mencionado, puede despreciarse por lo que la ecuación Lagrangiana de conservación de especies ec. (1.17), es trivial y establece que la partícula de fluido, conserva su concentración original conforme se desplaza en el interior del flujo, es decir: $d\chi/dt = 0$. Debido a que cada partícula mantiene su concentración inicial; los cambios en el campo de concentración, se deben fundamentalmente a la redistribución de las partículas en el flujo. Un resultado muy importante; es que las características estadísticas de la concentración del material pasivo, están directamente relacionadas con las características

estadísticas del desplazamiento de las partículas trazadoras. Por lo que es posible escribir (Wilson and Sawford, 1996):

$$\overline{\chi(\mathbf{X}, t)} = \int p(\mathbf{X}, t | \mathbf{x}, t_o) \chi_o(\mathbf{x}, t_o) d\mathbf{x} \quad (1.18)$$

donde: $p(\mathbf{X}, t | \mathbf{x}, t_o)$ es la densidad de probabilidad para la posición \mathbf{X} en el tiempo t , para las partículas que se localizaban en \mathbf{x} al tiempo inicial t_o y $\chi_o(\mathbf{x}, t_o)$ es la distribución espacial de la concentración al tiempo inicial. La ec. (1.18) indica que si se desprecia la difusividad molecular; el proceso de calcular la concentración media $\overline{\chi(\mathbf{X}, t)}$, se reduce a determinar la densidad de probabilidad de la función aleatoria $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$.

En la descripción Lagrangiana de un fluido incompresible en movimiento turbulento, la función estocástica $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$, describe para cualquier tiempo t , las coordenadas \mathbf{X} de todos los posibles elementos de fluido identificados por los valores del parámetro \mathbf{x} . Este parámetro representa los valores iniciales de las coordenadas espaciales \mathbf{X} , en el tiempo $t = t_o$, es decir:

$$\mathbf{x} = \mathbf{X}(\mathbf{x}, t_o) \quad (1.19)$$

En consecuencia, la descripción Lagrangiana, consiste en representar el flujo mediante una familia de trayectorias, las cuales son distintas entre sí, por los valores del parámetro \mathbf{x} (Monin and Yaglom, 1971).

En la literatura, se reporta que los modelos estocásticos (stochastic or random-walk models) para el cálculo de trazadores pasivos, son considerados como un caso especial de un proceso de Markov. El punto de partida de estos modelos, es el postulado que el "estado" de los trazadores pasivos (partículas), evoluciona como un proceso de Markov (Wilson and Sawford, 1996). Suponer que el "estado" de las partículas es una función Markoviana, se debe básicamente a que las ecuaciones de evolución ecs. (1.7, 1.15 y 1.17), son de primer orden en t , por lo que su solución en el tiempo depende exclusivamente de las condiciones iniciales. La solución numérica de estas ecuaciones parabólicas, se lleva a cabo mediante procedimientos de "marcha hacia adelante".

En los modelos de orden cero (métodos de Montecarlo), el "estado" es únicamente la posición de las partículas $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$. La función $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$, es un proceso de Markov, si la densidad de probabilidad condicional para el valor de $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ en el tiempo t (bajo la condición que los valores de $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ se conocen en los tiempos arbitrarios $t_o < t_1 < \dots < t_n < t$), depende únicamente del último de estos valores, es decir, de $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n)$. Entonces para el intervalo de tiempo de t_o a t , donde $t_o < t_1 < t$, se tiene que la densidad de probabilidad de transición de una función aleatoria arbitraria no necesariamente Markoviana $\mathbf{X} = \mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ es:

$$p(\mathbf{X} | \mathbf{x}, t_o) = \int (p(\mathbf{X} | \mathbf{X}_1, t_1; \mathbf{x}, t_o) p(\mathbf{X}_1 | \mathbf{x}, t_o)) d\mathbf{X}_1 \quad (1.20)$$

Si la función es un proceso de Markov entonces:

$$p(\mathbf{X} | \mathbf{x}, t_o) = \int (p(\mathbf{X} | \mathbf{X}_1, t_1) p(\mathbf{X}_1 | \mathbf{x}, t_o)) d\mathbf{X}_1 \quad (1.21)$$

donde el primer término dentro de la integral, es la densidad de probabilidad condicional para los valores de $\mathbf{X}(t)$.

Si $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ es Markoviana, el cambio en la posición de cada partícula en dos intervalos sucesivos de tiempo Δt (donde Δt es mucho mayor que la escala Lagrangiana de tiempo T_L), prácticamente no tienen correlación, por lo que es de esperarse que los incrementos de \mathbf{X} ($\Delta \mathbf{X}$), sean independientes entre sí. Si $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ es un proceso de Markov, la varianza de los incrementos de $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ para intervalos de tiempo $\Delta t \gg T_L$ en turbulencia homogénea, es proporcional al tiempo t , es decir:

$$\Upsilon_{ii}(t) \approx 2\overline{u_i^2} T_L t \quad (1.22)$$

Para intervalos de tiempo $\Delta t \gg T_L$, el coeficiente de correlación Lagrangiana;

$$R_{ij}(\Delta t) = \frac{\overline{U_i^j(\mathbf{x}, t) U_j^i(\mathbf{x}, t + \Delta t)}}{(\overline{u_i^2 u_j^2})^{1/2}} \quad (1.23)$$

es pequeño, por lo que las velocidades de una partícula en el tiempo t y en el tiempo $t + \Delta t$, son independientes entre sí. Una conclusión importante, es que si se supone que la función $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ es un proceso de Markov; para intervalos de tiempo $\Delta t \gg T_L$, los incrementos de la posición de la partícula $\Delta \mathbf{X}$, son independientes entre sí, por lo que la trayectoria de cada partícula, puede determinarse a partir de generar las velocidades Lagrangianas como números aleatorios independientes, con propiedades estadísticas (valor medio y desviación estándar) que son función de las características turbulentas Eulerianas del flujo (Wang and Stock, 1992b). Una consecuencia de suponer a \mathbf{X} como una función Markoviana; es que los modelos de orden cero únicamente pueden representar el movimiento de las partículas debido a los remolinos turbulentos de gran escala.

Los métodos de Monte Carlo, ya sea con incrementos de tiempo Δt constantes, o aleatorios, han sido utilizados en múltiples ocasiones de manera muy eficiente, para simular numéricamente la difusión turbulenta de partículas en flujos a escala industrial y a escala laboratorio (Avila and Cervantes, 1987), (Avila, 1994), (Avila and Cervantes, 1995), (Milojevic et al., 1987). Avila (Avila, 1994), presenta un panorama general de los diferentes modelos de Montecarlo y sus aplicaciones, adicionalmente se incluye una bibliografía extensa sobre el tema.

Las velocidades que una partícula adquiere durante un proceso de Montecarlo con intervalos de tiempo aleatorios Δt_i (proporcionados con cierta distribución de probabilidad), tienen la forma (Wang and Stock, 1992b):

$$\begin{aligned} U(0 \rightarrow \Delta t_1) &= U_1, & U(\Delta t_1 \rightarrow \Delta t_1 + \Delta t_2) &= U_2, \\ U(\Delta t_1 + \Delta t_2 \rightarrow \Delta t_1 + \Delta t_2 + \Delta t_3) &= U_3, \dots, \end{aligned} \quad (1.24)$$

donde: U_1, U_2, U_3, \dots , son números aleatorios independientes con cualquier distribución de probabilidad, con valor de la media estadística igual a cero y desviación estándar (rms) definida por las fluctuaciones de velocidad del flujo $(\overline{u_i^2})^{1/2}$. Wang y Stock (Wang and Stock, 1992b), mencionan que el método de Montecarlo es más versátil que

un modelo de cadenas de Markov, ya que es posible reproducir adecuadamente diversas formas (cuadrada, triangular y exponencial) del coeficiente de correlación de velocidad Lagrangiana R_{ij} . Además concluyen que utilizar un proceso de Montecarlo (en lugar de un proceso de cadenas de Markov), en los modelos numéricos de difusión turbulenta atmosférica, el tiempo de cómputo puede reducirse de manera significativa; ya que el Δt en el método de Montecarlo puede (y debe) ser del orden de la escala integral de tiempo. Una conclusión interesante que mencionan Wang y Stock (Wang and Stock, 1992b), y por lo cual se justifica el modelo que se presenta en este trabajo doctoral, es en el sentido que recomiendan que se lleve a cabo trabajo de investigación para determinar las características del proceso de Montecarlo (con incrementos de tiempo aleatorios), cuando se utiliza para modelar la difusión turbulenta de la atmósfera.

Un tipo particular de modelo de Montecarlo, el cual no genera velocidades Lagrangianas aleatorias que dependen de las condiciones locales de turbulencia, sino que recurre a la formulación de una ecuación diferencial estocástica, es el utilizado por Boughton y DeLaurentis (Boughton and DeLaurentis, 1992), (Boughton et al., 1987), y por Luhar y Rao (Luhar and Rao, 1993). En este modelo, se supone que la posición de cada partícula en la dirección vertical $X_3(t)$ (donde $X_3(t)$ es un proceso de Markov), está definida por la siguiente expresión:

$$dX_3(t) = \left(\bar{u}_3 + \frac{\partial D_3}{\partial x_3} \right) dt + \sqrt{2D_3(x_3)} d\omega(t) \quad (1.25)$$

donde D_3 es la difusividad turbulenta vertical.

Para simular numéricamente la trayectoria de partículas, se discretiza la ecuación estocástica (1.25) mediante la expresión:

$$X_3(t_i + 1) - X_3(t_i) = \left(\bar{u}_3 + \frac{\partial D_3}{\partial x_3} \right) \Delta t_i + \sqrt{2D_3(x_3)} \Delta\omega(t_i) \quad (1.26)$$

donde $\Delta\omega$ es ruido estocástico (números aleatorios independientes con distribución de probabilidad Gaussiana, valor de la media estadística igual a cero y varianza Δt). Luhar y Rao (Luhar and Rao, 1993) utilizaron este método para simular la dispersión de partículas en vientos Catabáticos. Estos autores compararon los resultados del modelo de Montecarlo con los resultados de un modelo de primer orden (los cuales se presentarán a continuación) y no encontraron diferencias significativas.

Boughton y DeLaurentis (Boughton and DeLaurentis, 1992), incluyeron dentro del modelo ERAD, la ecuación diferencial estocástica (1.25) (con términos adicionales como la velocidad terminal e impulso vertical debido a flotación), para simular la posición vertical de las partículas. La posición horizontal de cada partícula, se evalúa de manera determinística, y es función de la velocidad media del fluido y de la varianza de los desplazamientos en la dirección horizontal (ver ec. (1.22)), es decir:

$$X_1(t_i + 1) - X_1(t_i) = \bar{u}_1 \Delta t + \sqrt{\Upsilon_{11}} \quad (1.27)$$

$$X_2(t_i + 1) - X_2(t_i) = \bar{u}_2 \Delta t + \sqrt{\Upsilon_{22}} \quad (1.28)$$

En los modelos de primer orden (métodos de cadenas de Markov), se supone que la función aleatoria $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ es diferenciable con respecto al tiempo t y que su derivada;

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial \mathbf{X}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (1.29)$$

está definida en cualquier punto del espacio. En estos modelos, la función $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ por lo tanto no es Markoviana.

Si la velocidad instantánea está definida, es posible tomar en cuenta la inercia de las partículas a partir de suponer que su "estado", está representado por la función Markoviana conjunta $[\mathbf{X}(\mathbf{x}, t), \mathbf{U}(\mathbf{x}, t)]$ (Thomson, 1987), (Sawford, 1985), (Wilson and Sawford, 1996) (Borgas and Sawford, 1994).

Actualmente, no se ha podido verificar a partir de principios básicos que la función conjunta $[\mathbf{X}(\mathbf{x}, t), \mathbf{U}(\mathbf{x}, t)]$ es realmente Markoviana (Borgas and Sawford, 1994), sin embargo, en flujos con grandes números de Reynolds es una buena aproximación considerarla como un proceso de Markov. Si el número de Reynolds es grande, la correlación Lagrangiana de la aceleración, es pequeña cuando el intervalo de tiempo Δt es mucho mayor que la escala de tiempo de Kolmogorov τ_n (pero menor que la escala de tiempo de los grandes remolinos turbulentos T_L). Por lo que los incrementos de la velocidad de la partícula $\Delta \mathbf{U}$, en dos intervalos sucesivos de tiempo Δt , son prácticamente independientes. Thomson (Thomson, 1987), menciona que los incrementos $\Delta \mathbf{U}$ no pueden ser totalmente independientes, ya que la varianza de las velocidades (al igual que la varianza de los desplazamientos ec. (1.22)), crecería de manera indefinida. La forma de lograr que los incrementos $\Delta \mathbf{U}$ no sean independientes entre sí, es hacer que éstos dependan de la posición \mathbf{X} y la velocidad \mathbf{U} que la partícula tiene en el tiempo t (hipótesis Markoviana). Como consecuencia de suponer que la función $[\mathbf{X}(\mathbf{x}, t), \mathbf{U}(\mathbf{x}, t)]$ es Markoviana (cuando $\Delta t \gg \tau_n$); los modelos de primer orden no pueden representar adecuadamente los detalles del movimiento de las partículas en intervalos de tiempo del orden de τ_n . Existen diferentes tipos de modelos de primer orden (dependiendo del tipo de flujo turbulento) y la diferencia entre éstos; es básicamente la forma que tiene la función que relaciona los incrementos de la velocidad con las variables \mathbf{X} , \mathbf{U} y t , es decir:

$$\Delta \mathbf{U} = \Delta \mathbf{U}(\mathbf{X}, \mathbf{U}, t) \quad (1.30)$$

En los modelos de primer orden (al igual que en los modelos de orden cero), se supone que las características estadísticas Eulerianas del flujo se conocen; y que éstas constituyen las condiciones que debe de satisfacer la función representada por la ec. (1.30) (Wilson and Sawford, 1996).

Si se supone que \mathbf{X} y \mathbf{U} son funciones continuas del tiempo y que la velocidad está definida por la ec. (1.29), la evolución de la función (\mathbf{X}, \mathbf{U}) se describe a partir de las ecuaciones diferenciales estocásticas siguientes (Thomson, 1987), (Sawford, 1985), (Wilson and Sawford, 1996) (Borgas and Sawford, 1994):

$$dU_i = a_i(\mathbf{X}, \mathbf{U}, t) dt + (C_0 \epsilon)^{1/2} dW_i \quad (1.31)$$

$$dX_i = U_i dt \quad (1.32)$$

donde: dW_i es un número aleatorio independiente (de la posición \mathbf{X} , de la velocidad \mathbf{U} y del tiempo t) con valor de la media estadística igual a cero y varianza dt , ϵ es la rapidez de disipación de energía cinética turbulenta, C_0 es una constante universal y la función a_i , depende de las características turbulentas Eulerianas del flujo y de las variables \mathbf{X} , \mathbf{U} y t .

El coeficiente $(C_0\epsilon)^{1/2}$, se obtiene al considerar la teoría de Kolmogorov para turbulencia localmente isotrópica (Hinze, 1975), (Monin and Yaglom, 1971), (Landau and Lifshitz, 1987), (Tennekes and Lumley, 1972). De acuerdo a esta teoría, para intervalos de tiempo dentro del subrango inercial, las características estadísticas de los incrementos de velocidad $\Delta\mathbf{U}$ tienen una forma universal, la cual depende únicamente del intervalo de tiempo dt y de la rapidez de disipación de la energía turbulenta ϵ . Por lo que entonces este coeficiente depende únicamente de las propiedades universales de pequeña escala (Wilson and Sawford, 1996).

Mucho del esfuerzo realizado en el desarrollo (y aplicación en flujos atmosféricos) de los modelos de primer orden, se ha concentrado en la determinación de la forma del coeficiente a_i . Presentar los procedimientos utilizados en la literatura para determinar este coeficiente, está fuera del propósito de este trabajo doctoral, por lo que únicamente se presentarán algunas de las expresiones más utilizadas para modelar casos particulares de flujos turbulentos.

Para turbulencia homogénea, isotrópica y estacionaria (Thomson, 1987), (Wang and Stock, 1992b), (Luhar and Rao, 1993), (Sawford, 1985), (Wilson and Sawford, 1996), (Baas et al., 1986), (Boughton et al., 1987), reportan que a_i tiene la forma:

$$a_i = -\frac{U_i}{T_L} \quad (1.33)$$

donde

$$T_L = \frac{2\sigma_u^2}{C_0\epsilon} \quad (1.34)$$

es la escala Lagrangiana integral de tiempo y σ_u es la desviación estándar (rms) de las fluctuaciones de velocidad.

Sustituyendo la ec. (1.33) en la ecuación diferencial estocástica ec. (1.31), se obtiene una ecuación de Langevin independiente para cada componente de velocidad (sistema desacoplado):

$$dU_i = -\frac{C_0\epsilon}{2\sigma_u^2} U_i dt + (C_0\epsilon)^{1/2} dW_i \quad (1.35)$$

En turbulencia homogénea, isotrópica pero no-estacionaria, Wilson y Sawford (Wilson and Sawford, 1996) reportan que:

$$a_i = \left(-\frac{1}{2} \frac{C_0\epsilon}{\sigma_u^2} - \frac{1}{\sigma_u} \frac{\partial\sigma_u}{\partial t} \right) U_i \quad (1.36)$$

Si la turbulencia es anisótropa, homogénea y estacionaria, pero el flujo tiene un campo de velocidades representado por:

$$\bar{u}(z) = \bar{u}_0(1 + Cz) \quad (1.37)$$

entonces

$$a_i = -\frac{(U_i - \bar{u}_i)}{T_{L_i}} \quad (1.38)$$

En turbulencia estacionaria, horizontalmente homogénea (nohomogénea en la dirección vertical), como es el caso de la capa límite atmosférica, los modelos de primer orden son unidimensionales en la dirección vertical, Wilson y Sawford (Wilson and Sawford, 1996) reportan que:

$$a_w = -\frac{C_0 \epsilon(z)}{2\sigma_w^2(z)} W + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_w^2(z)}{\partial z} \left(\frac{W^2}{\sigma_w^2(z)} + 1 \right) \quad (1.39)$$

De acuerdo a lo presentado en párrafos anteriores, se concluye entonces que los métodos basados en la ecuación de Langevin, tienen un paso de "memoria" cuando el intervalo de tiempo Δt es menor que la escala integral de tiempo T_L (Sawford, 1985), (Wang and Stock, 1992b). La función de autocorrelación de las velocidades en este intervalo de tiempo se supone que es exponencial:

$$R_{L_i}(\Delta t) = \exp(-\Delta t/T_{L_i}) \quad (1.40)$$

La ecuación de Langevin ec. (1.35), se resuelve utilizando un método de diferencias finitas, por lo que se convierte en un proceso de cadenas de Markov. La ecuación de Langevin ec. (1.35) y la ecuación que describe la posición de cada partícula ec. (1.32), en forma discreta, se representan como (Sawford, 1985), (Luhar and Britter, 1989), (Baas et al., 1986):

$$U_i(t + \Delta t) = U_i(t) R_{L_i}(\delta t) + \sigma_{u_i} [1 - R_{L_i}^2(\delta t)]^{1/2} W'(t + \Delta t) \quad (1.41)$$

$$X_i(t + \Delta t) = X_i(t) + U_i(\Delta t) \quad (1.42)$$

donde $W'(t + \Delta t)$ es un número aleatorio con distribución Gaussiana con valor medio cero y varianza unitaria. Con el propósito de conservar la "memoria" del modelo, el intervalo de tiempo deber ser del orden de $\Delta t < 0.1T_L$.

En la literatura es común encontrar modelos que utilizan la ecuación de Langevin no para calcular de manera explícita la velocidad instantánea de las partículas, sino para determinar una fluctuación de velocidad (Williams and Yamada, 1990) (Uliasz, 1994a), (Uliasz et al., 1996) (Lyons et al., 1995) (Lincoln et al., 1991) (Ferrero et al., 1995) (Hernandez et al., 1995) (Wilson et al., 1993) (Zannetti, 1990). En estos modelos, se toma en cuenta que la velocidad instantánea de los trazadores pasivos, está compuesta por la velocidad media Euleriana y por una fluctuación de velocidad:

$$U_i = \bar{u}_i + u_i \quad (1.43)$$

La posición de cada partícula, se calcula a partir de la expresión:

$$X_i(t + \Delta t) = X_i(t) + (\bar{u}_i + u_i) (\Delta t) \quad (1.44)$$

En la ec. (1.43), la velocidad Euleriana \bar{u}_i (del lugar en que se encuentra la partícula), es proporcionada por un modelo meteorológico, mientras que las fluctuaciones u_i , representan perturbaciones numéricas artificiales, las cuales están relacionadas con la intensidad de turbulencia y las características de los remolinos turbulentos del subrango inercial. En estos métodos, se supone que las fluctuaciones de velocidad Eulerianas se comportan como un proceso de Markov de primer orden, y que la ecuación de Langevin en forma discreta, se representa por la siguiente expresión:

$$u_i(t + \Delta t) = R_{L_i}(\Delta t) u_i(t) + u_i''(t + \Delta t) \quad (1.45)$$

donde la función de autocorrelación es exponencial (ver ec. (1.40)) y u_i'' es un número aleatorio independiente.

Williams y Yamada (Williams and Yamada, 1990), utilizan este tipo de proceso de Markov en su modelo RAPTAD (RANDOM Particle Transport and Diffusion), el cual está acoplado con el modelo de pronóstico HOTMAC (Higher Order Turbulence Model for Atmospheric Circulation). Williams y Yamada (Williams and Yamada, 1990), generan las fluctuaciones de velocidad u_i mediante el siguiente modelo de cadenas de Markov:

$$u_i(t + \Delta t) = a u_i(t) + b \sigma_{u_i} \zeta + \delta_{i3} \times (1 - a) T_{L_i} \frac{\partial}{\partial x_i} (\sigma_{u_i}^2) \quad (1.46)$$

donde

$$a = \exp\left(-\frac{\Delta t}{T_{L_i}}\right) \quad (1.47)$$

y

$$b = (1 - a^2)^{1/2} \quad (1.48)$$

donde ζ es un número aleatorio con distribución de probabilidad Gaussiana, valor de la media estadística cero y varianza unitaria, T_{L_i} es la escala integral de tiempo para la fluctuación u_i , σ_{u_i} es la desviación estandar de las fluctuaciones de velocidad u_i y δ_{i3} es la delta de Dirac. El último término del lado derecho de la ecuación (1.46), se incluye para prevenir la acumulación de partículas en zonas de baja energía turbulenta.

El grupo de la Universidad del Estado de Colorado (Colorado State University) en los E.U.A., utiliza también un modelo de cadenas de Markov (sobre las fluctuaciones de velocidad), y lo incluye en su modelo LPDM (Lagrangian Particle Dispersion Model), el cual está acoplado con el modelo meteorológico de pronóstico ARAMS (Advanced Regional Atmospheric Modeling System) (Uliasz, 1994a), (Uliasz et al., 1996), (Lincoln et al., 1991), (Lyons et al., 1995).

Uliasz (Uliasz, 1994a) y Zannetti (Zannetti, 1990) generan las fluctuaciones velocidad u_i a partir de las siguientes expresiones:

$$u_1(t + \Delta t) = \phi_1 u_1(t) + \sigma_{r_1} \eta_1 \quad (1.49)$$

$$u_2(t + \Delta t) = \phi_2 u_2(t) + \phi_3 u_1(t + \Delta t) + \sigma_{r_2} \eta_2 \quad (1.50)$$

$$u_3'(t + \Delta t) = \phi_4 u_3'(t) + \phi_5 u_2'(t + \Delta t) + \phi_6 u_1'(t + \Delta t) + (\sigma_{r_3} \eta_3 + w_d) \quad (1.51)$$

donde los coeficientes ϕ_1, \dots, ϕ_6 , se expresan como función de las varianzas $\sigma_i^2 = \overline{u_i'^2}$, de las covarianzas $\overline{u'w'}$, $\overline{v'w'}$ y $\overline{u'v'}$ y de los coeficientes (exponenciales) de autocorrelación Lagrangiana R_{L_i} (ver ec. (1.40)). El último término de las ecs. (1.49-1.51), es la componente estocástica del modelo, los valores de η_i son números aleatorios con distribución de probabilidad Gaussiana. En la ec. (1.51) se observa que Zannetti, al igual Williams y Yamada, incluye un término adicional w_d (drift velocity) para evitar que se acumulen partículas en regiones con energía turbulenta reducida. Uliasz (Uliasz, 1994a), calcula las varianzas y covarianzas requeridas por este modelo, utilizando un modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds semejante al que se presenta en este trabajo doctoral.

Aunque los modelos Lagrangianos de primer orden como los propuestos por Williams y Yamada (Williams and Yamada, 1990), Zannetti (Zannetti, 1990) y Uliasz (Uliasz, 1994a), son utilizados con frecuencia en modelos meteorológicos para determinar la dispersión de partículas, a juicio del autor de este trabajo, es necesario que se lleve a cabo trabajo adicional para verificar que tan válido es suponer que las fluctuaciones de velocidad son procesos de Markov. Por otro lado, es conveniente verificar que tan bueno es aproximar las ecuaciones de Langevin para las fluctuaciones de velocidad (en forma discreta), con expresiones como la ec. (1.46) o como las ecs. (1.49-1.51). Thomson (Thomson, 1987) menciona, que en condiciones de turbulencia no homogénea y no estacionaria (como es el caso de la atmósfera), no es muy claro como debe formularse un modelo de cadenas de Markov. Thomson menciona además, que en la literatura se han propuesto diversos modelos que no cumplen con los criterios de consistencia que él propone, y que por lo tanto proporcionan resultados erróneos.

En los párrafos anteriores se presentaron (en el marco de referencia de los modelos de diagnóstico), los conceptos físicos y matemáticos de los modelos Lagrangianos de "una partícula". Los modelos de orden cero y de primer orden representan el estado del arte en cuanto a simulación de dispersión de partículas se refiere. Estos modelos, (como ya se ha mencionado) han sido acoplados con modelos de diagnóstico o con modelos de pronóstico como el que se presenta en este trabajo.

En esta sección, se presentaron dos modelos de diagnóstico, los cuales son representativos de una gran variedad de modelos (desarrollados en todo el mundo) que tienen características semejantes.

Presentar una lista completa de los modelos de diagnóstico que existen en la actualidad está fuera del alcance de este trabajo. Al lector interesado en conocer al menos las características generales y los autores de varios de estos modelos, se le sugiere que consulte el libro de Zannetti (Zannetti, 1990)

1.4 Modelos de pronóstico

Los modelos meteorológicos de pronóstico, son utilizados para simular la evolución temporal del sistema atmosférico. La simulación se lleva a cabo mediante la integración

en el tiempo y en el espacio de las ecuaciones Eulerianas de continuidad, cantidad de movimiento y energía. Adicionalmente, estos modelos resuelven ecuaciones de transporte para las variables que representan la turbulencia y ecuaciones de conservación de especies (dispersión de gases). Estos modelos, representan la técnica numérica más compleja para modelar el campo de velocidades, temperaturas y características turbulentas de la atmósfera. Los modelos de pronóstico, requieren de una gran cantidad de datos para dar inicio al proceso de cálculo, y requieren de gran capacidad de memoria de cómputo y tiempo de procesamiento. Varios modelos meteorológicos de pronóstico se han desarrollado en los últimos años, sin embargo, la mayoría de ellos son herramientas sofisticadas de investigación, que requieren para su buen uso, de la participación activa de sus creadores.

Hasta hace diez años, en la mayoría de los modelos de pronóstico se utilizaba la aproximación de capa límite, en donde la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección vertical, se reduce a la condición hidrostática:

$$\frac{\partial p}{\partial x_3} = -\rho g \quad (1.52)$$

donde p es la presión media, ρ es la densidad del aire de la atmósfera y g es la aceleración de la gravedad. Las ecuaciones parabólicas de cantidad de movimiento que resultan al utilizar la aproximación de capa límite, no pueden ser utilizadas para simular flujos en donde el campo de velocidades y en consecuencia el campo de presiones, dependen fuertemente de la geometría del dominio en estudio.

Schlünzen (Schlünzen, 1994) menciona, que la aproximación hidrostática no debe utilizarse cuando se modelan fenómenos entre 2 y 10 km (escala meso- γ , Orlandi (Orlandi, 1975), presenta la definición de las escalas de longitud y tiempo de los fenómenos atmosféricos). En los últimos años, los modelos hidrostáticos han sido reemplazados por los modelos no-hidrostáticos (como el que se presenta en este trabajo doctoral), para simular fenómenos en las escalas meso- γ y meso- β (entre 20 y 200 km).

Los modelos no-hidrostáticos son utilizados para simular procesos sobre terreno no uniforme (complex terrain). La mayoría de estos modelos, simula la superficie terrestre mediante el uso de una coordenada vertical transformada (following terrain coordinate) η , de la forma (Pielke, 1984):

$$\eta = x_{3t} \frac{x_3 - x_{3s}}{x_{3t} - x_{3s}} \quad (1.53)$$

donde x_{3t} es la altura superior del modelo, x_{3s} es la altura del terreno y x_3 es la altura sobre la superficie. Otros modelos formulados en coordenadas cartesianas, utilizan procedimientos en los que la velocidad en la frontera sólida se obliga a ser cero mediante técnicas numéricas conocidas como "bloqueo de celdas" (Patankar, 1980), (Gosman and Ideriah, 1976). Estos procedimientos numéricos suponen, ya sea que la viscosidad es muy grande, o que existen términos fuente (artificiales) en las ecuaciones de cantidad de movimiento, que motivan que la velocidad del fluido sea igual a cero.

Los modelos de pronóstico de mesoescala, se utilizan para la simulación de fenómenos atmosféricos como: brisa tierra-mar, vientos en valles y montañas, y movimientos convectivos intensos.

En 1984, Pielke (Pielke, 1984), presentó un panorama general de las principales características de los modelos que habían aparecido hasta entonces. Diez años después Schlünzen (Schlünzen, 1994), presentó una revisión de los modelos no-hidrostáticos desarrollados y utilizados en Alemania. Schlünzen se limitó a los modelos alemanes ya que según comenta, presentar un revisión de todos los modelos de pronóstico, no-hidrostáticos de mesoescala que se utilizan en todo el mundo, es prácticamente imposible. En su revisión, Schlünzen únicamente incluye a aquellos modelos que satisfacen ciertos criterios de selección:

- .-Se incluyen únicamente modelos que simulan diferentes tipos de superficie (diferente longitud efectiva de la rugosidad de superficie z_0).
- .-Los modelos simulan flujo sobre geometría compleja (complex terrain).
- .-En los modelos que se incluyen, los flujos turbulentos se determinan a partir de un modelo de turbulencia al menos de primer orden.
- .-La resolución de los modelos debe estar entre 1 y 5 km en la dirección horizontal y entre 50 y 200 m en la dirección vertical (escalas meso- γ y meso- β). Sin embargo, una resolución más pequeña es aceptable.
- .-Las áreas que simulan los modelos, deben de estar en el rango de 10 x 10 km² a 250 x 250 km² (vientos montaña-valle, brisas tierra-mar e islas de calor urbanas).
- .-Los modelos, deben tener la posibilidad de simular el dominio en estudio mediante mallas numérica nonuniformes.
- .-Se incluyen modelos cuyos resultados han sido publicados al menos en tres artículos con arbitraje.

Los modelos que se incluyen en la revisión de Schlünzen son:

- .-**EZM-MEMO** (EUMAC Zooming Model-Meso Escale MOdel) (Kunz and Mousiopoulos, 1995).
- .-**FITNAH** (Flow over Irregular Terrain with Natural and Anthropogenic Heat sources).
- .-**GESIMA** (GEesthachter SIMulationsModell in der Atmosphäre).
- .-**KAMM** (Karlsruher Atmosphärisches Mesoskaliges Modell).
- .-**MESOSCOP** (MESOSCaliges Modell Ober Pfaffenhofen).
- .-**METRAS** (MEsoskaliges TRANsport-und Strömungsmodell).

La mayoría de los modelos mencionados, resuelven además de las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y temperatura potencial, las ecuaciones de transporte de la energía cinética turbulenta κ y de la rapidez de disipación ϵ . El método numérico utilizado en los modelos, es el de los volúmenes finitos (Patankar, 1980), con excepción del modelo **KAMM**, que utiliza diferencias finitas. La mayoría de los modelos utiliza la aproximación de Boussinesq (las variaciones de la densidad únicamente se toman en cuenta en el término de gravedad).

Dos modelos meteorológicos de mesoescala que se utilizan con frecuencia en la actualidad, y que tienen características semejantes a los mencionados por Schlünzen (Schlünzen, 1994), son: el modelo **HOTMAC** (modelo hidrostático) (Mellor and Yamada, 1982) (Williams and Yamada, 1990) y el modelo **ARAMS** (modelo nohidrostático) (Uliasz, 1994a), (Uliasz et al., 1996), (Lincoln et al., 1991), (Lyons et al., 1995).

Los modelos mencionados en párrafos anteriores, tienen características similares con el modelo **ATFLOW** que se presenta en este trabajo. Sin embargo, también existen

diferencias significativas entre estos modelos y se enlistan a continuación:

.-El modelo de turbulencia (algebraico) de esfuerzos de Reynolds que se incorpora en el modelo **ATFLOW** (para el cálculo de las varianzas y covarianzas de las fluctuaciones de velocidad y temperatura-velocidad), es totalmente tridimensional.

.-La topografía del terreno se modela mediante la técnica numérica de "bloqueo de celdas".

.-**ATFLOW** se acopla con el modelo LSD (Lagrangian-Stochastic-Deterministic), el cual además de utilizar un modelo de Montecarlo para simular las fluctuaciones de velocidad para los elementos de fluidos, simula la trayectoria de partículas sólidas (más pesadas que el aire), que se desplazan en el interior de los remolinos de gran escala (Milojevic, 1985), (Avila, 1994), (Milojevic et al., 1987).

El modelo LSD, originalmente desarrollado por Milojevic (Milojevic, 1985), y utilizado por el autor de esta tesis y por algunos otros investigadores (Avila, 1994) para el cálculo de flujos bidimensionales, a escala laboratorio y en condiciones de estado estacionario, se modificó en el transcurso de la presente investigación; para que estuviera en posibilidad de predecir la dispersión de partículas provenientes de fuentes instantáneas o continuas, en flujos tridimensionales, en estado transitorio y a escala atmosférica.

Como se explicará posteriormente, el modelo LSD; resuelve la ecuación de cantidad de movimiento (en un marco de referencias Lagrangiano) de partículas sólidas individuales que se desplazan en el interior de un flujo turbulento. Recientemente Avila y Cervantes (Avila and Cervantes, 1995), incluyeron en el modelo LSD la ecuación de conservación de energía térmica con el propósito de estudiar el intercambio de calor entre las fases (sólida y gaseosa). Una de las características importantes que tiene el modelo de pronóstico Euleriano-Lagrangiano (**ATFLOW-LSD**) que se presenta en esta tesis y que lo hace único es que; determina en dos sentidos la interacción de cantidad de movimiento y transferencia de calor que existe entre la fase gaseosa (aire de la atmósfera) y la fase sólida (partículas). Si bien es cierto, que las partículas sólidas no alteran de manera significativa el campo de velocidades y temperaturas del viento, cuando se presenta la condición de flujo disperso (lejos de la fuente de partículas), en ocasiones y sobre todo muy cerca de la fuente, las partículas pueden modificar las condiciones del flujo que las transporta. Esto ocurre regularmente en explosiones, erupciones e incendios. El modelo **ATFLOW-LSD**, determina a partir de términos fuente en las ecuaciones de conservación y de transporte, el intercambio de cantidad de movimiento y energía térmica que existe entre las fases. La expresión de estos términos se mostrará posteriormente.

En este capítulo de introducción, se han presentado de manera general, las bases teóricas de los modelos utilizados para determinar la dispersión de partícula de gas en la atmósfera. Adicionalmente, se mencionaron algunos de los modelos meteorológicos que proporcionan el campo de velocidades a los modelos de dispersión. A continuación se presenta en detalle el modelo matemático que se incluye en el modelo tridimensional, noestacionario, de dispersión de partículas sólidas, Euleriano-Lagrangiano: **ATFLOW-LSD**.

1.5 Objetivos

Los objetivos generales del presente estudio son los siguientes:

- 1).-Desarrollar un modelo matemático-computacional (Euleriano-Lagrangiano) de pronóstico, que esté en posibilidad de predecir la dispersión de partículas sólidas, en flujos atmosféricos dominados por la topografía del terreno.
- 2).-Desarrollar un modelo matemático-computacional que permita calcular los esfuerzos de Reynolds y los flujos turbulentos de calor, en flujos atmosféricos con topografía compleja.
- 3).-Desarrollar un modelo de dispersión de partículas Lagrangiano-Estocástico-Determinístico, que permita determinar la trayectoria de una nube de partículas sólidas, en un flujo tridimensional con turbulencia no homogénea, anisótropa y no estacionaria.
- 4).-Generar un documento en donde se establezcan las bases teóricas y computacionales necesarias (y que representen el estado del arte), para llevar a cabo la simulación numérica de los flujos atmosféricos con partículas sólidas en suspensión.

Capítulo 2

Modelos matemáticos de la fase continua - aire atmosférico

Los modelos de pronóstico, no-hidrostáticos, de escala intermedia, describen el comportamiento de la capa límite atmosférica, a partir de resolver el sistema acoplado de ecuaciones diferenciales parciales, no lineales, constituido por: (1) la ecuación de continuidad, (2) las ecuaciones de cantidad de movimiento, y (3) diversas ecuaciones de transporte de variables escalares (temperatura, energía cinética turbulenta, disipación de energía turbulenta y concentración de especies). En la versión del modelo que se presenta en esta tesis, se considera que el aire está libre de humedad, adicionalmente, al igual que lo hacen varios de los modelos de pronóstico actualmente en uso (Schlünzen, 1994), se supone que las variaciones de la densidad debido a los cambios de presión, son despreciables ya que se satisfacen las siguientes condiciones: (1) la velocidad absoluta $|u|$ del fluido en cada punto del dominio en estudio, es pequeña en comparación con la velocidad del sonido a (Monin and Yaglom, 1971), (Landau and Lifshitz, 1987), (2) el tiempo L/a , que toma una señal de sonido en viajar una distancia L , es pequeño comparado con el tiempo τ que toma el fluido en cambiar su velocidad de manera perceptible (Landau and Lifshitz, 1987), donde L y τ , son las escalas de longitud y tiempo respectivamente en las que el fluido cambia perceptiblemente su velocidad, y (3) en un campo gravitacional con transferencia de calor, las velocidades (ascendentes o descendientes) que adquiere el fluido debido a las fuerzas de Arquímedes, son pequeñas. Si se satisfacen las tres condiciones anteriores, el fluido puede considerarse como incompresible. Adicionalmente, si la distribución de temperaturas en la capa límite atmosférica es no uniforme (capa límite estable o inestable), la densidad es necesariamente una función del campo escalar de temperaturas. Sin embargo; si las variaciones de la densidad producidas por las inhomogeneidades de la temperatura son pequeñas en valor absoluto, es decir, si el valor absoluto de las diferencias de temperatura en el flujo son pequeñas, en comparación con el valor absoluto de la temperatura media T_0 , el fluido puede considerarse también como incompresible (Monin and Yaglom, 1971).

Aún si el fluido se supone incompresible, es posible considerar a la temperatura (en un campo gravitacional) como un escalar no pasivo, el cual afecta el campo de velocidades. La influencia de la temperatura sobre la densidad, se toma en cuenta en la fuerza de cuerpo que aparece en la ecuación de cantidad de movimiento en la

dirección vertical. Esta fuerza tiene la forma ¹:

$$X_2 = \rho g_y \quad (2.1)$$

donde ρ depende de la temperatura.

Tomando en cuenta lo anterior, la ecuación de conservación de masa y las ecuaciones de cantidad de movimiento que se incluyen en el modelo para el cálculo de flujos turbulentos, son las siguientes (debido a que el modelo ha sido utilizado para realizar estudios en flujos laminares (Paulo, 1995), se incluyen los términos de viscosidad molecular):

2.1 Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial(\rho\bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{v})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho\bar{w})}{\partial z} = 0 \quad (2.2)$$

2.2 Ecuación de cantidad de movimiento en x

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho\bar{u})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\bar{u}u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{u}v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho\bar{u}w)}{\partial z} = \\ & = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \\ & \quad + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right) - \\ & - \frac{\partial(\rho\bar{u}'u')}{\partial x} - \frac{\partial(\rho\bar{u}'v')}{\partial y} - \frac{\partial(\rho\bar{u}'w')}{\partial z} - 2\rho\bar{w}\omega\sin(\phi) + \rho g_x + \bar{S}_{px} \end{aligned} \quad (2.3)$$

2.3 Ecuación de cantidad de movimiento en y

$$\frac{\partial(\rho\bar{v})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\bar{u}v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{v}v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho\bar{w}v)}{\partial z} = \quad (2.4)$$

¹Es conveniente aclarar, que el modelo matemático que se presenta en este trabajo, considera que el eje vertical del sistema de coordenadas es el eje y . El autor reconoce que este sistema no es la forma usual de modelar problemas atmosféricos con movimiento convectivo. Sin embargo, dado que el modelo en sus orígenes, fue concebido para realizar investigación en el área de transferencia de calor y masa en flujos en dos fases con partículas en suspensión a pequeña escala, y en el área de convección natural en cavidades rectangulares, el autor prefirió mantener (en las ecuaciones de la fase continua y de la fase dispersa) la influencia de la gravedad a lo largo de la dirección de y . Los términos que representan la aceleración de Coriolis y que aparecen en las ecuaciones de cantidad de movimiento, se obtuvieron utilizando este sistema de referencia. Finalmente es conveniente aclarar, que al utilizar este sistema de referencia, no se pierde generalidad en el plantamiento del modelo.

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) + \\
&\quad + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right) - \\
&-\frac{\partial (\overline{\rho u'v'})}{\partial x} - \frac{\partial (\overline{\rho v'v'})}{\partial y} - \frac{\partial (\overline{\rho v'w'})}{\partial z} - 2\overline{\rho w \omega \cos(\phi)} + \rho g_y + \overline{S_{py}}
\end{aligned}$$

2.4 Ecuación de cantidad de movimiento en z

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial (\rho \bar{w})}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \bar{u} \bar{w})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho \bar{v} \bar{w})}{\partial y} + \frac{\partial (\rho \bar{w} \bar{w})}{\partial z} = \tag{2.5} \\
&= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) + \\
&\quad + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) - \\
&\quad - \frac{\partial (\overline{\rho w'u'})}{\partial x} - \frac{\partial (\overline{\rho w'v'})}{\partial y} - \frac{\partial (\overline{\rho w'w'})}{\partial z} + \\
&\quad + 2\rho (\omega \bar{v} \cos(\phi) + \omega \bar{u} \sin(\phi)) + \rho g_z + \overline{S_{pz}}
\end{aligned}$$

donde: μ es la viscosidad dinámica molecular, $g_x = g_y = 0$, $g_z = -g = -9.81 \text{ m/s}^2$, g es la aceleración de la gravedad, ω es la velocidad angular de la tierra $= 7.29 \times 10^{-5} \text{ rad/s}$, ϕ es la latitud de la región de estudio y $\overline{S_{pi}}$ son los términos fuente que toman en cuenta la interacción entre las fases (partículas sólidas-aire de la atmósfera).

La influencia de la temperatura en la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección vertical ec. (2.4), se toma en cuenta a partir de suponer que la temperatura absoluta del fluido es:

$$T = T_o + \Delta T \tag{2.6}$$

donde: T_o , como ya se ha mencionado, es un valor medio de la temperatura y ΔT es una pequeña variación de la temperatura T_o . La densidad del fluido se determina como:

$$\rho = \rho_o + \Delta \rho \tag{2.7}$$

donde: ρ_o es una densidad constante correspondiente a T_o y ρ es la densidad correspondiente a T . Reescribiendo la ec. (2.7) se tiene que:

$$\Delta \rho = \rho - \rho_o \tag{2.8}$$

Utilizando la definición del coeficiente de expansión térmica β de un fluido:

$$\beta = -\frac{1}{\rho_o} \left(\frac{\partial \rho_o}{\partial T} \right)_p \tag{2.9}$$

la relación de incrementos de temperatura y densidad, se escribe de la siguiente forma:

$$\Delta\rho = -\rho_o\beta\Delta T \quad (2.10)$$

Si se toma en cuenta que para: $\rho=\rho_o=cte$ y $T=T_o=cte$, la presión p_o no es constante sino que disminuye con la altura, es decir:

$$p_o = -\rho_o g y + cte \quad (2.11)$$

donde p_o es la presión hidrostática.

Por tanto, la presión puede descomponerse en la suma dos términos: uno que es función de la altura y y otro que depende de las características dinámicas y térmicas del flujo, es decir:

$$p = p_o(y) + p_1(\Delta\rho, \Delta T, u_i) \quad (2.12)$$

Si el flujo se considera incompresible, el término que involucra el gradiente de la presión en la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección vertical ec. (2.4), puede escribirse como:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1}{(\rho_o + \Delta\rho)} \left(\frac{\partial p_o}{\partial y} + \frac{\partial p_1}{\partial y} \right) \quad (2.13)$$

Si se desarrolla esta ecuación en una serie y se mantienen únicamente los términos de primer orden de $\Delta\rho$, se tiene:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial p_o}{\partial y} + \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial p_1}{\partial y} - \frac{\Delta\rho}{\rho_o^2} \frac{\partial p_o}{\partial y} \quad (2.14)$$

Utilizando las ecuaciones (2.10 y 2.11) en la ec. (2.14), se tiene que:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = -g + \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial p_1}{\partial y} - \beta g \Delta T \quad (2.15)$$

Si se sustituye esta expresión en la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección vertical ec. (2.4), los términos de gravedad y gradiente de presión de esta ecuación se expresan como (ver ec. 2.4, donde $g_y = -g$):

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - g = -\frac{1}{\rho_o} \frac{\partial p_1}{\partial y} + \beta g \Delta T \quad (2.16)$$

Si el fluido es incompresible, y la influencia de la temperatura sobre la densidad se considera únicamente en el término de gravedad de la ec. (2.4), en las dos ecuaciones restantes de cantidad de movimiento, es decir en las ecs. (2.3 y 2.5), la densidad ρ es sustituida por la densidad media constante ρ_o y la presión p , es sustituida por p_1 , es decir la desviación de la presión a partir del valor medio hidrostático p_o .

Otra forma de considerar la presión en las ecuaciones de cantidad de movimiento, resulta si la ec. (2.14) se escribe como:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial}{\partial y} (p_o + p_1) - \frac{\Delta\rho}{\rho_o^2} \frac{\partial p_o}{\partial y} \quad (2.17)$$

la relación de incrementos de temperatura y densidad, se escribe de la siguiente forma:

$$\Delta\rho = -\rho_o\beta\Delta T \quad (2.10)$$

Si se toma en cuenta que para: $\rho=\rho_o=cte$ y $T=T_o=cte$, la presión p_o no es constante sino que disminuye con la altura, es decir:

$$p_o = -\rho_o g y + cte \quad (2.11)$$

donde p_o es la presión hidrostática.

Por tanto, la presión puede descomponerse en la suma dos términos: uno que es función de la altura y y otro que depende de las características dinámicas y térmicas del flujo, es decir:

$$p = p_o(y) + p_1(\Delta\rho, \Delta T, u_i) \quad (2.12)$$

Si el flujo se considera incompresible, el término que involucra el gradiente de la presión en la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección vertical ec. (2.4), puede escribirse como:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1}{(\rho_o + \Delta\rho)} \left(\frac{\partial p_o}{\partial y} + \frac{\partial p_1}{\partial y} \right) \quad (2.13)$$

Si se desarrolla esta ecuación en una serie y se mantienen únicamente los términos de primer orden de $\Delta\rho$, se tiene:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial p_o}{\partial y} + \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial p_1}{\partial y} - \frac{\Delta\rho}{\rho_o^2} \frac{\partial p_o}{\partial y} \quad (2.14)$$

Utilizando las ecuaciones (2.10 y 2.11) en la ec. (2.14), se tiene que:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = -g + \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial p_1}{\partial y} - \beta g \Delta T \quad (2.15)$$

Si se sustituye esta expresión en la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección vertical ec. (2.4), los términos de gravedad y gradiente de presión de esta ecuación se expresan como (ver ec. 2.4, donde $g_y = -g$):

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - g = -\frac{1}{\rho_o} \frac{\partial p_1}{\partial y} + \beta g \Delta T \quad (2.16)$$

Si el fluido es incompresible, y la influencia de la temperatura sobre la densidad se considera únicamente en el término de gravedad de la ec. (2.4), en las dos ecuaciones restantes de cantidad de movimiento, es decir en las ecs. (2.3 y 2.5), la densidad ρ es sustituida por la densidad media constante ρ_o y la presión p , es sustituida por p_1 , es decir la desviación de la presión a partir del valor medio hidrostático p_o .

Otra forma de considerar la presión en las ecuaciones de cantidad de movimiento, resulta si la ec. (2.14) se escribe como:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial}{\partial y} (p_o + p_1) - \frac{\Delta\rho}{\rho_o^2} \frac{\partial p_o}{\partial y} \quad (2.17)$$

Utilizando las ecs. (2.10 y 2.11) en la ec. (2.17), se tiene que:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial y} - \beta g \Delta T \quad (2.18)$$

Al sustituir esta expresión en la ec. (2.4), los términos de gradiente de presión y de gravedad se expresan como:

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - g = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial y} + g(\beta \Delta T - 1) \quad (2.19)$$

Cuando se utiliza esta forma del gradiente de presiones y de la fuerza de gravedad, la presión p (la cual incluye la presión hidrostática de manera implícita), es utilizada en las tres ecuaciones de cantidad de movimiento ecs. (2.3-2.5). Al igual que en la formulación anterior, la densidad ρ se sustituye en las ecs. (2.3-2.5), por la densidad media constante ρ_0 .

En el modelo matemático que se presenta en este trabajo, se ha utilizado la presión p en las ecuaciones de cantidad de movimiento.

2.5 Ecuación de la energía térmica

El equilibrio mecánico de un fluido (sin movimiento macroscópico en la dirección vertical) en un campo gravitacional, está representado por la ecuación:

$$\frac{dp_0}{dy} = -\rho g \quad (2.20)$$

El equilibrio puede alterarse debido al campo de temperaturas, el cual no se comporta como un escalar pasivo (ver ec. (2.12)).

En la condición de equilibrio mecánico, la presión ec. (2.20), al igual que la densidad;

$$\rho = -\frac{1}{g} \frac{dp_0}{dy} \quad (2.21)$$

son función únicamente de y . Consecuentemente, dado que la presión y la densidad determinan la temperatura, esta última es una función única de la altitud.

La condición de equilibrio mecánico en la atmósfera ec. (2.20), puede lograrse aún si la temperatura no es constante. Landau y Lifshitz (Landau and Lifshitz, 1987), presentan la condición para lograr la estabilidad del equilibrio mecánico. Esta condición, resulta después de considerar que un elemento de fluido que se encuentra a cierta altura y y que tiene un volumen específico $v(p_0, s)$ (donde p_0 y s , son la presión y entropía de equilibrio en y), se desplaza en un proceso adiabático reversible (entropía=cte), en la dirección vertical una pequeña cantidad ξ positiva. El volumen específico del elemento de fluido en la nueva posición es $v(p'_0, s)$, donde p'_0 es la presión de equilibrio en la altura $y + \xi$. Si el equilibrio es estable, la fuerza resultante sobre el elemento de fluido, tratará de regresarlo a la posición original. Es decir, el volumen específico del elemento de fluido $v(p'_0, s)$, será menor que el volumen específico $v(p_0, s)$

(donde s' es la entropía de equilibrio en la posición $y + \xi$) del elemento de fluido que dejó su lugar al primero. La condición de estabilidad del equilibrio mecánico es:

$$v(p'_o, s') - v(p'_o, s) > 0 \quad (2.22)$$

después de utilizar relaciones de la termodinámica, Landau y Lifshitz (Landau and Lifshitz, 1987), establecen que la condición de estabilidad se cumple cuando:

$$\frac{ds}{dy} > 0 \quad (2.23)$$

es decir la entropía debe de aumentar con la altura.

La variación de la temperatura con respecto a la altura dT/dy , se obtiene a partir de la ecuación (2.23), es decir (Reynolds and Perkins, 1977):

$$\frac{ds}{dy} = \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_p \frac{dT}{dy} + \left(\frac{\partial s}{\partial p} \right)_T \frac{dp}{dy} = \frac{c_p}{T} \frac{dT}{dy} - \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p \frac{dp}{dy} > 0 \quad (2.24)$$

En esta ecuación $dp/dy = dp_o/dy = -\rho g$, por lo que sustituyendo en la ec. (2.24), se obtiene la condición de estabilidad en función del gradiente de temperaturas:

$$- \frac{dT}{dy} < \frac{g\beta T}{c_p} \quad (2.25)$$

para un gas perfecto, $\beta T = 1$. Por tanto, la ec. (2.25) se escribe como:

$$- \frac{dT}{dy} < \frac{g}{c_p} \quad (2.26)$$

La atmósfera estará en equilibrio mecánico, siempre y cuando se cumpla la condición de estabilidad representada por la ec. (2.26). Si no se satisface esta condición, es decir: si la temperatura disminuye con un gradiente cuyo valor absoluto es mayor que los valores dados en las ecs. (2.25 y 2.26), se tendrán movimientos convectivos (condición inestable). Si la atmósfera está en equilibrio térmico, $dT/dy = 0$, se encuentra también en equilibrio mecánico, ya que se satisfacen las ecs. (2.25 y 2.26).

Es importante señalar que la igualdad:

$$- \frac{dT}{dy} = \frac{g}{c_p} \quad (2.27)$$

surge al considerar que el volumen específico del elemento de fluido que se movió verticalmente (en un proceso adiabático reversible), es igual al volumen específico del elemento de fluido que dejó su lugar al primero, es decir (ver. ec. (2.22)):

$$v(p'_o, s') - v(p'_o, s) = 0 \quad (2.28)$$

A esta condición se le conoce como estabilidad neutra, ya que cualquier elemento de fluido al ser llevado de una posición (vertical) y_1 a otra posición y_2 , donde $y_1 < y_2$ (ó $y_1 > y_2$), no estará sujeto a fuerzas en la dirección negativa (o positiva) de y que lo traten de regresar a su posición inicial (condición estable), o a fuerzas en

la dirección positiva (negativa) de y que lo impulsen aún más hacia arriba (o hacia abajo) (condición inestable). A la igualdad representada por la ec. (2.27), se le conoce como el **gradiente adiabático de la temperatura** y es muy importante en esta discusión, ya que éste representa en la ecuación de la energía térmica, lo que el gradiente de presión hidrostática representa en la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección vertical. En la sección anterior, se definió la variación de la presión en la dirección vertical como (ver ec. (2.13)):

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial p_o}{\partial y} + \frac{\partial p_1}{\partial y} \quad (2.29)$$

Si no existen desviaciones p_1 , de la presión de la atmósfera p con respecto a la presión media hidrostática p_o , el fluido se encuentra en equilibrio mecánico.

De igual manera es posible escribir el gradiente de la temperatura del fluido como la suma del gradiente adiabático ec. (2.27) (donde la temperatura T se sustituye por la temperatura media adiabática T_o), más el gradiente de una temperatura T_1 , la cual representa una desviación de la temperatura de la atmósfera T con respecto a la temperatura media adiabática T_o , es decir:

$$\frac{dT}{dy} = \frac{dT_o}{dy} + \frac{dT_1}{dy} = -\frac{g}{c_p} + \frac{dT_1}{dy} \quad (2.30)$$

En la sección anterior, se indicó que las ecuaciones de cantidad de movimiento, pueden ser formuladas como función del gradiente de la diferencia de presión p_1 ver ec. (2.16), de igual manera, la ecuación de la energía puede formularse considerando que la variable dependiente, no sea la temperatura T , sino la la diferencia de temperaturas T_1 . Si en la ec. (2.30), se despeja la derivada de la diferencia de temperaturas T_1 , se tiene:

$$\frac{dT_1}{dy} = \frac{g}{c_p} + \frac{dT}{dy} \quad (2.31)$$

La ec. (2.31), es utilizada en la meteorología para definir la estabilidad atmosférica en los siguientes casos:

(1).-Atmósfera neutra.

Esta condición se satisface si el gradiente de temperaturas en la atmósfera dT/dy , es igual al gradiente adiabático, $-g/c_p$.

$$\frac{dT_1}{dy} = 0 \quad (2.32)$$

(2).-Atmósfera estable.

En la ecuación que define el criterio de estabilidad ec. (2.26), se observa que la relación g/c_p siempre es positiva por tanto, la atmósfera se encuentre en equilibrio estable si se satisfacen las dos condiciones: (a) que el gradiente dT/dy sea positivo (inversión térmica) y (b) que dT/dy sea negativo pero con valor absoluto menor que la relación g/c_p . Tomando en cuenta lo anterior la condición de atmósfera estable es (ver ec. (2.31)):

$$\frac{dT_1}{dy} > 0 \quad (2.33)$$

(3).-Atmósfera Inestable.

De acuerdo al criterio de estabilidad ec. (2.26), se tiene que la condición de equilibrio inestable se satisface siempre y cuando la atmósfera tenga un gradiente de temperaturas dT/dy negativo, pero con valor absoluto mayor que la relación g/c_p . La condición de atmósfera inestable es entonces (ver ec. (2.31)):

$$\frac{dT_1}{dy} < 0 \quad (2.34)$$

Si la ec. (2.31) se integra desde $y=0$ hasta cierta altura y , se tiene:

$$\int_{y=0}^y dT_1 = \frac{g}{c_p} \int_{y=0}^y dy + \int_{y=0}^y dT \quad (2.35)$$

Al realizar la integral:

$$T_1 - T_{1s} = \frac{g}{c_p} y + (T - T_s) \quad (2.36)$$

donde: T_{1s} es la desviación de la temperatura T con respecto a T_o en la superficie terrestre ($y = 0$), y T_s es la temperatura de la superficie.

Se supone que en la superficie terrestre se satisface la siguiente condición:

$$T(0) = T_s = T_o(0) \quad (2.37)$$

por lo que la desviación de la temperatura en $y=0$ desaparece, es decir $T_{1s}=0$.

La expresión de la desviación de la temperatura T_1 ec. (2.36) queda entonces:

$$T_1 = \frac{g}{c_p} y + (T - T_s) \quad (2.38)$$

Si se define a la temperatura θ como la suma de la desviación de la temperatura T_1 más la temperatura en la superficie T_s , es decir, $\theta = T_1 + T_s$, la ec. (2.38) se escribe como:

$$\theta = \frac{g}{c_p} y + T = \Gamma y + T \quad (2.39)$$

donde $\Gamma=g/c_p$. Para el aire de la atmósfera $\Gamma \approx 0.0098$ [K/m].

A la temperatura θ se le conoce como la "Temperatura Potencial", esta temperatura tiene dos significados: (1) el que está relacionado con la desviación de la temperatura T_1 entre la temperatura media adiabática $T_o(y)$ y la temperatura real de la atmósfera $T(y)$ (procedimiento que se siguió en los párrafos anteriores), y (2) el que se utiliza regularmente en la literatura, en el sentido que representa la temperatura θ que un elemento de fluido podría adquirir si es transportado con entropía constante a partir de una altura y (o presión hidrostática media $p_o(y)$), hasta una altura al nivel del mar (o presión estándar $p_e(0)$). Considerando este último enfoque, la temperatura

potencial se define como (Tietjens, 1957), (Monin and Yaglom, 1971), (Zannetti, 1990), (Wanta and Lowry, 1976):

$$\theta = T \left(\frac{p_e}{p_o} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \quad (2.40)$$

donde $\gamma = c_p/c_v$.

La ec. (2.40), no es más que la expresión para la temperatura de un gas ideal en un proceso adiabático, reversible (Reynolds and Perkins, 1977).

Las definiciones representadas por las ecs. (2.39 y 2.40) son equivalentes, sin embargo, la ecuación (2.39) tiene el significado siguiente: Si se conoce la desviación de temperaturas $T_1(y)$ como función de la altura, y se supone que la temperatura de la superficie ($y = 0$) satisface la ec. (2.37), entonces la temperatura potencial θ , es la temperatura de la superficie más la desviación de la temperatura T_1 que se presenta en la altura y .

Si la atmósfera tiene la distribución de temperaturas $T = -\Gamma y + T_s$ (atmósfera adiabática), la temperatura potencial θ no es función de la altura y es igual a la temperatura de la superficie T_s , ver ec. (2.39), es decir, la desviación de la temperatura $T_1(y)$ es cero. Por otro lado si la atmósfera es isotérmica $T(y) = T_s$, al sustituir este valor en la ec. (2.39), se observa que la temperatura potencial aumenta con la altura. En este caso, la desviación de la temperatura T_1 , también aumenta con la relación $dT_1 = \Gamma y$, es decir $dT_1 > 0$, por lo que se tiene una condición estable.

Utilizando la expresión de la temperatura potencial ec. (2.39), la ecuación de la energía térmica se expresa como (al igual que en las ecuaciones de cantidad de movimiento, los coeficientes de difusión molecular aparecen en esta ecuación ya que el modelo ha sido utilizado para simular flujos laminares (Paulo, 1995) y problemas de difusión de calor en cuerpos sólidos tridimensionales, (Avila et al., 1994), (Avila et al., 1997), en este caso las velocidades del fluido son cero):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\rho \bar{\theta})}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \bar{u} \bar{\theta})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho \bar{v} \bar{\theta})}{\partial y} + \frac{\partial (\rho \bar{w} \bar{\theta})}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x} - \overline{\rho u' \theta'} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y} - \overline{\rho v' \theta'} \right) + \\ & \quad + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} - \overline{\rho w' \theta'} \right) + \rho \bar{v} \Gamma \end{aligned} \quad (2.41)$$

donde Pr es el número de Prandtl.

En la ec. (2.41), se ha utilizado la descomposición de Reynolds para la temperatura instantánea, es decir: $\theta = \bar{\theta} + \theta'$. Con el propósito de utilizar la aproximación de Boussinesq que se discutió en la sección anterior, la densidad ρ en la ec. (2.41), se sustituye por la densidad media constante ρ_o . Si se tiene una atmósfera adiabática ($\theta = \text{cte} = T_s$), un elemento de fluido que se desplaza una cierta distancia ξ (con entropía constante) verticalmente a las capas superiores (inferiores) de la atmósfera, estará en equilibrio con el medio ambiente que prevalece en esa altura $y + \xi$ ($y - \xi$), es decir el elemento de

fluido adquiere la misma temperatura que su medio ambiente, por lo que la desviación de temperaturas $T_1(y) = \theta - T_s = 0$, es decir, el término ΔT que aparece en la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección vertical ec. (2.19), puede ser sustituido por: $\Delta T = T_1 = 0$

Por otro lado, si la atmósfera es estable, un elemento de fluido que es desplazado una cierta distancia ξ (con entropía constante) verticalmente a las capas superiores (inferiores) de la atmósfera, tendrá una temperatura menor (mayor) que la que existe en $y + \xi$ ($y - \xi$). En este caso el elemento de fluido estará sometido a fuerzas que lo tratan de regresar a su posición original. El término ΔT , en la ec. (2.19), para esta condición es: $\Delta T = -T_1 = T_s - \theta$.

Si la atmósfera es inestable, un elemento de fluido que es desplazado verticalmente con entropía constante a las capas superiores (inferiores) de la atmósfera, estará sujeto a fuerzas que lo impulsan aún más hacia arriba (abajo). En esta condición de inestabilidad, el término Δt que aparece en la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección vertical ec. (2.19), es sustituido también por $\Delta T = -T_1 = T_s - \theta$.

2.6 Ecuación de la energía cinética turbulenta

En la introducción de este trabajo, se mencionaron los diferentes modelos que existen en la actualidad para cerrar las ecuaciones que describen el comportamiento de un flujo turbulento, ecs. (2.3-2.5,2.41). En los modelos de primer orden, el coeficiente de difusividad turbulenta ver ecs. (1.12-1.14), se define a partir de las escalas de velocidad y de longitud de los grandes remolinos turbulentos. En la literatura, la energía cinética turbulenta $\kappa = 0.5(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2})$ ha sido utilizada con frecuencia para establecer la escala de velocidad de la turbulencia. En el modelo que se presenta en este trabajo, las ecuaciones que rigen el comportamiento de un flujo turbulento, se resuelven utilizando dos modelos de turbulencia: el primero es un modelo de primer orden de dos ecuaciones y el segundo es un modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds. En ambos modelos, se hace uso de la energía cinética turbulenta κ , para evaluar; ya sea el coeficiente de difusión turbulenta o las correlaciones $\overline{u'_i u'_j}$ y $\overline{u'_i T'}$.

Al igual que en las secciones anteriores, en la ecuación de κ , los términos de producción de energía turbulenta debido a flotación, se han modelado de acuerdo a la aproximación de Boussinesq (las fluctuaciones de presión son pequeñas en comparación con las fluctuaciones de temperatura). Con esta aproximación, el término de producción; $g_i \overline{\rho' u'_i}$ (que aparece en la ecuación de la energía turbulenta), se escribe como (Monin and Yaglom, 1971):

$$g_i \overline{\rho' u'_i} \approx -\rho \beta g_i \overline{u'_i T'} \quad (2.42)$$

Con el propósito de utilizar la definición de la temperatura potencial θ , se supone que las fluctuaciones de la temperatura T' son iguales a las fluctuaciones de θ , es decir: $T' = \theta'$. La ecuación de la energía turbulenta que se resuelve en este trabajo es la siguiente ²:

²La ecuación de la energía cinética turbulenta se presenta en diversos libros y artículos (Hinze,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \kappa}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i \kappa) = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[u'_i \left(\frac{\rho u'_j u'_j}{2} + p' \right) \right] - \\ - \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mu \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} \right) - \mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} - \rho \beta g_i \overline{u'_i \theta'} + \bar{S}_{p\kappa} \end{aligned} \quad (2.43)$$

En la ec. (2.43), el término $\bar{S}_{p\kappa}$ representa la disminución (o aumento) de la intensidad turbulenta debido a la presencia de partículas sólidas en el flujo. El término de difusión y los términos de producción debido a cortante y flotación, tienen diferentes expresiones dependiendo del modelo de turbulencia utilizado (como se ha mencionado, en este trabajo se resuelven las ecuaciones que rigen el comportamiento del flujo, utilizando dos modelos de turbulencia: (a) modelo de primer orden de dos ecuaciones y (b) modelo híbrido de esfuerzos de Reynolds). En el modelo de dos ecuaciones (κ - ϵ), se hace uso de la viscosidad turbulenta ν_t , por lo que los términos de difusión, esfuerzos de Reynolds y flujos de calor, que aparecen en la ec. (2.43), se escriben como:

$$- \left[u'_i \left(\frac{\rho u'_j u'_j}{2} + p' \right) - \mu \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} \right] = \frac{\rho \nu_t}{\sigma_\kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} \quad (2.44)$$

$$- \overline{u'_i u'_j} = \nu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij} \quad (2.45)$$

$$- \overline{u'_i \theta'} = \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \quad (2.46)$$

Si se sustituyen estas expresiones en la ec. (2.43), resulta la ecuación de la energía turbulenta del modelo de dos ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \kappa}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i \kappa) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\rho \nu_t}{\sigma_\kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} \right) + \\ + \rho \nu_t \left[\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right] \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \epsilon + \rho \beta g_i \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} + \bar{S}_{p\kappa} \end{aligned} \quad (2.47)$$

donde: $\epsilon = \nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}$, $\nu_t = c_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon}$, $\sigma_\kappa = 0.74$, $c_\mu = 0.0256$, $Pr_t \equiv$ número de Prandtl turbulento = 0.86.

Al utilizar un modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds (el cual se presentará en detalle en el siguiente capítulo), el término difusivo de la ec. (2.43), se aproxima mediante la siguiente expresión:

$$- \frac{\partial}{\partial x_i} \left[u'_i \left(\frac{\rho u'_j u'_j}{2} + p' \right) - \mu \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} \right] \approx C_s \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \frac{\kappa}{\epsilon} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right) \quad (2.48)$$

1975), (Monin and Yaglom, 1971), (Tennekes and Lumley, 1972), (Launder and Spalding, 1972), (Hanjalić, 1994), (Launder et al., 1975), (Launder and Spalding, 1974), (Cebeci and Smith, 1974) y (Cervantes, 1990). Avila (Avila, 1994) presenta en detalle la derivación de la ecuación de κ y de las ecuaciones de los esfuerzos de Reynolds $u'_i u'_j$

Al sustituir la ec. (2.48) en la ec. (2.43), resulta la ecuación de la energía turbulenta que se utiliza en el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds:

$$\frac{\partial \rho \kappa}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i \kappa) = C_s \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \frac{\kappa}{\epsilon} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right) - \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \epsilon - \rho \beta g_i \overline{u'_i \theta'} + \bar{S}_{p\kappa} \quad (2.49)$$

donde $C_s=0.2$ (Rodi, 1980).

2.7 Ecuación para la disipación de la energía cinética turbulenta

En la literatura, es común encontrar que la escala de longitud de los grandes remolinos, se obtiene a partir de la solución de una ecuación de transporte para la disipación de la energía turbulenta ϵ . Aunque la disipación de energía no tiene unidades de longitud, la combinación de ϵ con la energía turbulenta, proporciona las unidades requeridas ($\kappa^{3/2}/\epsilon$).

Si se considera flujos con grandes números de Reynolds (isótropos en las pequeñas escalas), y haciendo uso del concepto de la viscosidad turbulenta ν_t (modelos de turbulencia de primer orden), la ecuación de ϵ se escribe como (Hanjalić, 1994) (Launder and Spalding, 1972), (Rodi, 1980):

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i \epsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\rho \nu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{\kappa} \rho \nu_t \left[\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right] \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho C_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{\kappa} \quad (2.50)$$

donde: $C_{1\epsilon}=1.13$, $C_{2\epsilon}=1.9$ y $\sigma_\epsilon=1.298$.

Si se utiliza un modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds, el término difusivo de la ec. (2.50), puede ser sustituido por la siguiente expresión (Launder et al., 1975):

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\rho \nu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) = C_\epsilon \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \frac{\kappa}{\epsilon} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) \quad (2.51)$$

En la ec. (2.50), las correlaciones $\overline{u'_i u'_j}$ que aparecen en el término de producción debido al cortante medio (gradientes de la velocidad media), se modelaron a partir de la definición de la viscosidad turbulenta (modelos de primer orden), si las correlaciones de velocidad se obtienen directamente a partir de un modelo de esfuerzos de Reynolds, la ecuación de ϵ se escribe como:

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i \epsilon) = C_\epsilon \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \frac{\kappa}{\epsilon} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) - C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{\kappa} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho C_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{\kappa} \quad (2.52)$$

donde $C_\epsilon=0.18$ (Rodi, 1980).

Capítulo 3

Modelo algebraico de los esfuerzos de Reynolds

Gibson y Launder (Gibson and Launder, 1978), (Gibson and Launder, 1976), propusieron un modelo en donde los flujos turbulentos $\overline{u'_i u'_j}$ y $\overline{u'_i \theta'}$, se calculan a partir de relaciones algebraicas que involucran los valores locales de: (a) energía cinética turbulenta κ , (b) disipación de energía turbulenta ϵ , (c) velocidad media \overline{u}_i y (d) temperatura media $\overline{\theta}$. Este modelo no considera el concepto de la viscosidad turbulenta el cual es utilizado en los modelos convencionales de dos ecuaciones κ - ϵ . Los modelos algebraicos de esfuerzos Reynolds, según menciona Uliasz (Uliasz, 1994b) son los más populares hoy en día para aplicaciones en la atmósfera en escala intermedia (mesoescala). Una característica importante que tienen estos modelos, es que permiten determinar las varianzas de las componentes de velocidad: $\overline{u'^2}$, $\overline{v'^2}$, $\overline{w'^2}$, las cuales son indispensables cuando se calcula la dispersión de partículas en la atmósfera.

Para grandes números de Reynolds (isotropía local en las escalas disipativas), las ecuaciones exactas que rigen el comportamiento de los esfuerzos de Reynolds y de los flujos de calor se escriben de la siguiente forma (Monin and Yaglom, 1971):

$$\frac{D\rho\overline{u'_i u'_j}}{Dt} - D_{ijff}(\rho\overline{u'_i u'_j}) = P_{ij} + G_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\rho\epsilon + \Pi_{ij} \quad (3.1)$$

$$\frac{D\rho\overline{u'_i \theta'}}{Dt} - D_{ijff}(\rho\overline{u'_i \theta'}) = -\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \rho \overline{\theta}}{\partial x_k} + P_{i\theta} + G_{i\theta} + \Pi_{i\theta} \quad (3.2)$$

donde el operador D_{ijff} , representa el transporte difusivo de la cantidad dentro del paréntesis. Las cantidades P_{ij} , G_{ij} , $P_{i\theta}$ y $G_{i\theta}$, representan la producción de $\overline{u'_i u'_j}$, y $\overline{u'_i \theta'}$ atribuible al cortante medio y a los efectos de flotación, es decir:

$$P_{ij} = -\left\{ \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \rho \overline{u}_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial \rho \overline{u}_i}{\partial x_k} \right\} \quad (3.3)$$

$$G_{ij} = -\rho\beta\{g_j \overline{u'_i \theta'} + g_i \overline{u'_j \theta'}\} \quad (3.4)$$

$$P_{i\theta} = -\overline{u'_k \theta'} \frac{\partial \rho \overline{u}_i}{\partial x_k} \quad (3.5)$$

$$G_{i\theta} = -\rho\beta g_i \overline{\theta'^2} \quad (3.6)$$

Los términos Π_{ij} y $\Pi_{i\theta}$ de las ecuaciones (3.1 y 3.2), representan las correlaciones de presión-deformación y de presión-gradiente de temperatura respectivamente:

$$\Pi_{ij} = p' \overline{\left(\frac{\partial u'_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)}, \quad \Pi_{i\theta} = p' \overline{\frac{\partial \theta'}{\partial x_i}} \quad (3.7)$$

Puede observarse que en el lado derecho de las ecuaciones de los esfuerzos de Reynolds y de los flujos de calor ecs. (3.1 y 3.2), las únicas incógnitas presentes son: la varianza de las fluctuaciones de temperatura $\overline{\theta'^2}$, que aparece en $G_{i\theta}$ ec. (3.6) y las correlaciones que contienen las fluctuaciones de presión ecs. (3.7). Estas correlaciones, se han aproximado siguiendo los trabajos de Gibson y Launder (Gibson and Launder, 1978) y de Rodi (Rodi, 1980). Estos autores, consideran que las fluctuaciones de presión se rigen por una ecuación de Poisson, la cual se obtiene a partir de la divergencia de la ecuación de transporte de las fluctuaciones de velocidad u'_i :

$$-\frac{\partial^2 p'}{\partial x_i^2} = \frac{\partial^2 (\rho u'_i u'_j - \rho \overline{u'_i u'_j})}{\partial x_j \partial x_i} + 2 \frac{\partial \rho \overline{u_i}}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} + \rho \beta g_i \frac{\partial \theta'}{\partial x_i} \quad (3.8)$$

En la ec. (3.8), se observa que las fluctuaciones de presión que aparecen en las ecs. (3.7), se originan debido a tres procesos distintos: (1) interacción de las fluctuaciones de velocidad ($\Pi_{ij,1}$ y $\Pi_{i\theta,1}$), (2) interacción de la deformación media y las fluctuaciones de velocidad ($\Pi_{ij,2}$ y $\Pi_{i\theta,2}$) y (3) presencia de las fuerzas de flotación ($\Pi_{ij,3}$ y $\Pi_{i\theta,3}$). Launder (Launder et al., 1975), propuso el siguiente modelo lineal en el que se supone que las fluctuaciones de presión, motivan que las fluctuaciones de velocidad y los flujos de calor tiendan a ser isótropos (return to isotropy):

$$\Pi_{ij} = \Pi_{ij,1} + \Pi_{ij,2} + \Pi_{ij,3} + S_{ij} \quad (3.9)$$

donde

$$\Pi_{ij,1} = -C_1 \rho \frac{\epsilon}{\kappa} \left(\overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \kappa \right) \quad (3.10)$$

$$\Pi_{ij,2} = -C_2 \left(P_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} P \right) \quad (3.11)$$

$$\Pi_{ij,3} = -C_3 \left(G_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} G \right) \quad (3.12)$$

Los términos P y G en las ecs. (3.11 y 3.12), representan la producción de energía cinética turbulenta debido: al cortante medio y a las fuerzas de flotación respectivamente. La forma de estos términos es la siguiente:

$$P = -\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \rho \overline{u_i}}{\partial x_k} \quad (3.13)$$

$$G = -\rho \beta g_i \overline{u'_i \theta'} \quad (3.14)$$

donde: $C_1=1.8$ y $C_2=C_3=0.6$.

El término S_{ij} de la ec. (3.9), representa la influencia que tiene la frontera del dominio en estudio (superficie terrestre) sobre las fluctuaciones de presión (Launder et al., 1975), (Rodi, 1980).

Al igual que el término presión-deformación Π_{ij} se aproxima por la suma de tres términos (ver ec. (3.9)), la correlación presión-gradiente de temperatura $\Pi_{i\theta}$ de la ec. (3.7), puede aproximarse mediante:

$$\Pi_{i\theta} = \Pi_{i\theta,1} + \Pi_{i\theta,2} + \Pi_{i\theta,3} + S_{i\theta} \quad (3.15)$$

El modelo más común para el primer término de la ec. (3.15), es el que propuso Monin y Yaglom (Monin and Yaglom, 1971):

$$\Pi_{i\theta,1} = -C_{1\theta}\rho\frac{\epsilon}{\kappa}\overline{u'_i\theta'} \quad (3.16)$$

Launder et al. (Launder et al., 1975) suponen que la deformación media y el campo gravitacional modifican la correlación presión-gradiente de temperatura, en el sentido que ambos tienden a disminuir la generación de energía ($P_{i\theta}$ y $G_{i\theta}$) de la correlación $\overline{u'_i\theta'}$ (ver ec. (3.2)). Los términos de fluctuación de velocidad y de flotación de la ec. (3.15) (segundo y tercero del lado derecho), se escriben como:

$$\Pi_{i\theta,2} = -C_{2\theta}P_{i\theta} \quad (3.17)$$

$$\Pi_{i\theta,3} = -C_{3\theta}G_{i\theta} \quad (3.18)$$

donde: $C_{1\theta}=3$ y $C_{2\theta}=C_{3\theta}=0.33$. El término $S_{i\theta}$ de la ec. (3.15), representa el efecto de la condición de frontera (superficie terrestre) sobre la correlación presión-gradiente de temperatura (Launder et al., 1975), (Rodi, 1980).

Con el propósito de tomar en cuenta los términos S_{ij} y $S_{i\theta}$ que aparecen en las ecs. (3.9 y 3.15), se recurrió a utilizar el modelo de Launder et al. (Launder et al., 1975).

El motivo que tuvieron Launder et al. para cuantificar la influencia de una superficie sobre las fluctuaciones de presión, es que experimentalmente se ha observado; que la relación entre esfuerzos turbulentos $\overline{u'_i u'_j}$ (y la relación entre esfuerzos turbulentos y κ), es diferente para flujos cortantes cerca y lejos de superficies sólidas. En turbulencia cerca de paredes, la magnitud de las fluctuaciones de velocidad normales a la superficie disminuye, mientras que las fluctuaciones paralelas a la superficie aumentan apreciablemente. Los experimentos también han mostrado, que los efectos de flotación sobre el valor relativo de los esfuerzos turbulentos es muy diferente en los dos tipos de flujo (flujos cortantes cerca y lejos de superficies). La influencia que una superficie ejerce sobre las fluctuaciones de presión, se incluye como un término que se suma al modelo de presión-deformación ec. (3.9) y al modelo presión-gradiente de temperatura ec. (3.15). Los términos S_{ij} y $S_{i\theta}$, tienen la siguiente forma:

$$S_{ij} = \Pi'_{ij,1} + \Pi'_{ij,2} + \Pi'_{ij,3} \quad (3.19)$$

$$S_{i\theta} = \Pi'_{i\theta,1} + \Pi'_{i\theta,2} + \Pi'_{i\theta,3} \quad (3.20)$$

En las ecs. (3.19 y 3.20), se observa que la presencia de una superficie sólida altera las fluctuaciones de presión, debido a los tres procesos que se indican en la ecuación de Poisson (ver ec. (3.8)), es decir: interacción entre las fluctuaciones de velocidad (término $\Pi'_{ij,1}$ de la ec. (3.19)), interacción entre las correlaciones $\overline{u'_i\theta'}$ (término $\Pi'_{i\theta,1}$ de la ec. (3.20)), interacción entre la deformación media y las fluctuaciones de velocidad (término $\Pi'_{ij,2}$ de la ec. (3.19)), interacción entre la deformación media y la correlación $\overline{u'_i\theta'}$ (término $\Pi'_{i\theta,2}$ de la ec. (3.20)), presencia de la gravedad (término $\Pi'_{ij,3}$ de la ec. (3.19) y término $\Pi'_{i\theta,3}$ de la ec. (3.20)).

Para el término de turbulencia $\Pi'_{ij,1}$, Shir (Shir, 1973) propuso:

$$\Pi'_{ij,1} = C'_1 \frac{\rho \epsilon}{\kappa} \left(\overline{u'_k u'_m n_k n_m} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \overline{u'_k u'_i n_k n_j} - \frac{3}{2} \overline{u'_k u'_j n_k n_i} \right) f \left(\frac{l}{n_i r_i} \right) \quad (3.21)$$

donde: \mathbf{r} es el vector de position, l es una escala de longitud característica de la turbulencia y \mathbf{n} es el vector unitario normal a la superficie.

Gibson y Launder (Gibson and Launder, 1978) propusieron una expresión análoga para el término de deformación media $\Pi'_{ij,2}$:

$$\Pi'_{ij,2} = C'_2 \left(\Pi_{km,2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \Pi_{ik,2} n_k n_j - \frac{3}{2} \Pi_{jk,2} n_k n_i \right) f \left(\frac{l}{n_i r_i} \right) \quad (3.22)$$

El término correspondiente a la interacción de la gravedad con las fluctuaciones temperatura $\Pi'_{ij,3}$, no se toma en cuenta ya que según Rodi (Rodi, 1980), una expresión para este término no se ha logrado obtener de manera satisfactoria.

Si la superficie coincide con en el eje x , y y es la distancia a la superficie (en la dirección vertical), las ecuaciones (3.21 y 3.22) se simplifican a lo siguiente:

$$\Pi'_{ij,1} = C'_1 \frac{\rho \epsilon}{\kappa} \left(\overline{u'^2_n} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \overline{u'_n u'_i} \delta_{nj} - \frac{3}{2} \overline{u'_n u'_j} \delta_{ni} \right) f \left(\frac{l}{x_n} \right) \quad (3.23)$$

$$\Pi'_{ij,2} = C'_2 \left(\Pi_{nn,2} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \Pi_{ni,2} \delta_{nj} - \frac{3}{2} \Pi_{nj,2} \delta_{ni} \right) f \left(\frac{l}{x_n} \right) \quad (3.24)$$

donde: $C'_1=0.5$, $C'_2=0.3$ y el subíndice n indica la dirección normal a la superficie ($n=2$).

Gibson y Launder (Gibson and Launder, 1978), suponen que la presencia de la pared también tiene un efecto sobre la correlación presión-gradiente de temperatura y en analogía con el término presión-deformación, propusieron para $\Pi'_{i\theta,1}$, la siguiente expresión:

$$\Pi'_{i\theta,1} = -C'_{1\theta} \frac{\rho \epsilon}{\kappa} \overline{u'_k \theta' n_i n_k} f \left(\frac{l}{n_i r_i} \right) \quad (3.25)$$

De manera semejante, si la superficie está orientada en la dirección del eje x (y el eje y está orientado en la dirección vertical), la ec. (3.25), se simplifica a lo siguiente:

$$\Pi'_{i\theta,1} = -C'_{1\theta} \frac{\rho\epsilon}{\kappa} \overline{u'_n \theta'} \delta_{in} f\left(\frac{l}{x_n}\right) \quad (3.26)$$

donde $C'_{1\theta}=0.5$.

Gibson y Launder (Gibson and Launder, 1978) propusieron expresiones semejantes a las ecs. (3.21-3.26) para evaluar los términos $\Pi'_{i\theta,2}$ y $\Pi'_{i\theta,3}$, sin embargo, Rodi (Rodi, 1980) menciona que en la capa límite de la atmósfera, éstos términos no son de importancia.

Es conveniente mencionar que el propósito de incluir la función $f(l/x_2)$ en las ecs. (3.21-3.26), es básicamente para disminuir el efecto de la corrección de pared conforme aumenta la distancia a la superficie.

Si las ecs. (3.10-3.12, 3.23 y 3.24) que determinan en conjunto la correlación presión-deformación ec. (3.9), y las ecs. (3.16-3.18 y 3.26) que modelan la correlación presión-gradiente de temperatura ec. (3.15), se sustituyen en las ecuaciones de transporte de los esfuerzos de Reynolds y de los flujos de calor ecs. (3.1 y 3.2) se obtienen las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \frac{D\rho\overline{u'_i u'_j}}{Dt} - D_{ijf}(\rho\overline{u'_i u'_j}) &= P_{ij} + G_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\rho\epsilon - C_1\rho\frac{\epsilon}{\kappa}\left(\overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\kappa\right) - \\ &- C_2\left(P_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij}P\right) - C_3\left(G_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij}G\right) + \Pi'_{ij,1} + \Pi'_{ij,2} \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \frac{D\rho\overline{u'_i \theta'}}{Dt} - D_{ijf}(\rho\overline{u'_i \theta'}) &= -\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \rho \overline{\theta}}{\partial x_k} + P_{i\theta} + G_{i\theta} - C_{1\theta}\rho\frac{\epsilon}{\kappa}\overline{u'_i \theta'} - \\ &- C_{2\theta}P_{i\theta} - C_{3\theta}G_{i\theta} + \Pi'_{i\theta,1} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Resolver estas ecuaciones para las seis componentes de los esfuerzos de Reynolds $\overline{u'_i u'_j}$, tres componentes de los flujos de calor $\overline{u'_i \theta'}$, y para la varianza de la temperatura $\overline{\theta'^2}$, requiere de la solución de diez ecuaciones diferenciales parciales, lo cual hasta la fecha no es conveniente cuando se pretende evaluar la dispersión de partículas en la atmósfera (Uliasz, 1994b). Con el propósito de utilizar las ecuaciones de esfuerzo/flujo ecs. (3.27 y 3.28), no con el fin de resolverlas sino de aprovechar la información que está implícita en ellas, Rodi (Rodi, 1980) propuso convertir este sistema de ecuaciones diferenciales parciales, en un sistema algebraico lineal. Para obtener las expresiones algebraicas de los esfuerzos de Reynolds, Rodi (Rodi, 1980) supone que el transporte de $\overline{u'_i u'_j}$ es proporcional al transporte de κ , es decir:

$$\frac{D\rho\overline{u'_i u'_j}}{Dt} - D_{ijf}(\rho\overline{u'_i u'_j}) = \frac{\overline{u'_i u'_j}}{\kappa} \left\{ \frac{D\rho\kappa}{Dt} - D_{ijf}(\rho\kappa) \right\} \quad (3.29)$$

por lo que utilizando la ecuación de κ ec. (2.49), se obtiene;

$$\frac{D\rho\overline{u'_i u'_j}}{Dt} - D_{ijf}(\rho\overline{u'_i u'_j}) = \frac{\overline{u'_i u'_j}}{\kappa} (P + G - \rho\epsilon) \quad (3.30)$$

Sustituyendo la ec. (3.30) en la ec. (3.27) se obtiene:

$$\frac{\overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \kappa}{\kappa} = \frac{\Phi}{\epsilon} \left(P_{ij}^* - \frac{2}{3} \delta_{ij} P^* \right) + \Phi_{m-1} \left(\Pi'_{ij,1} + \Pi'_{ij,2} \right) \quad (3.31)$$

donde $C_2 = C_3$,

$$P^* = P + G \quad (3.32)$$

$$P_{ij}^* = P_{ij} + G_{ij} \quad (3.33)$$

$$\Phi = \frac{1 - C_2}{P^* / \epsilon + \rho C_1 - \rho} \quad (3.34)$$

$$\Phi_{m-1} = (\epsilon (P^* / \epsilon + \rho C_1 - \rho))^{-1} \quad (3.35)$$

Para obtener las expresiones algebraicas de los flujos de calor, Gibson y Launder (Gibson and Launder, 1976) suponen que el transporte de $\overline{u'_i \theta'}$ es proporcional al transporte de κ y al transporte de la varianza de las fluctuaciones de temperatura $\overline{\theta'^2}$, es decir:

$$\frac{D}{Dt} (\overline{\rho u_i \theta'}) - D_{ijj} (\overline{\rho u_i \theta'}) \approx \frac{\overline{u'_i \theta'}}{2\kappa} \left\{ \frac{D\rho\kappa}{Dt} - D_{ijj} (\rho\kappa) \right\} + \frac{\overline{u'_i \theta'}}{2\overline{\theta'^2}} \left\{ \frac{D\rho\overline{\theta'^2}}{Dt} - D_{ijj} (\rho\overline{\theta'^2}) \right\} \quad (3.36)$$

La ec. (3.36) puede escribirse como:

$$\frac{D}{Dt} (\overline{\rho u_i \theta'}) - D_{ijj} (\overline{\rho u_i \theta'}) \approx \frac{\overline{u'_i \theta'}}{2\kappa} (P + G - \rho\epsilon) + \frac{\overline{u'_i \theta'}}{2\overline{\theta'^2}} (P_\theta - \rho\epsilon_\theta) \quad (3.37)$$

donde P_θ y ϵ_θ representan la producción y disipación de la varianza $\overline{\theta'^2}$, es decir;

$$P_\theta = -2\overline{u'_j \theta'} \frac{\partial \rho \overline{\theta'}}{\partial x_j} \quad (3.38)$$

$$\epsilon_\theta = 2\alpha \frac{\partial \overline{\theta'}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{\theta'}}{\partial x_j} \quad (3.39)$$

donde α es la difusividad molecular.

Sustituyendo la ec. (3.37) en la ec. (3.28) se obtiene la expresión algebraica de los flujos de calor:

$$-\overline{u'_i \theta'} = \Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \rho \overline{\theta'}}{\partial x_k} - \Phi'_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} P_{i\theta}^* - \Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \Pi'_{i\theta,1} \quad (3.40)$$

donde $C_{2\theta} = C_{3\theta}$,

$$\Phi'_\theta = \Phi_\theta (1 - C_{2\theta}) \quad (3.41)$$

$$\Phi_\theta = \left(\frac{\kappa \rho}{\epsilon} \frac{\epsilon_\theta}{2 \overline{\theta'^2}} \left(\frac{P_\theta}{\rho \epsilon_\theta} - 1 \right) + \frac{\rho}{2} \left(\frac{P^*}{\rho \epsilon} - 1 \right) + \rho C_{1\theta} \right)^{-1} \quad (3.42)$$

$$P_{i\theta}^* = P_{i\theta} + G_{i\theta} \quad (3.43)$$

Gibson y Launder (Gibson and Launder, 1976), suponen que existe equilibrio entre la producción y disipación de $\overline{\theta'^2}$, es decir; $P_\theta = \rho\epsilon_\theta$, por lo que la ec. (3.42) puede escribirse como:

$$\Phi_\theta = \left(\frac{\rho}{2} \left(\frac{P^*}{\rho\epsilon} - 1 \right) + \rho C_{1\theta} \right)^{-1} \quad (3.44)$$

Con las dos expresiones algebraicas ecs. (3.31 y 3.40), es posible conocer los esfuerzos de Reynolds y los flujos de calor a partir de los valores de κ y ϵ , y de los gradientes de velocidad y temperatura media. Sin embargo, aún existe una variable que todavía es incógnita, ya que no se resuelve su ecuación de transporte. Esta variable es la varianza de las fluctuaciones de temperatura $\overline{\theta'^2}$, la cual se obtiene, a partir de definir la relación que existe entre la escala de tiempo de las fluctuaciones de velocidad, y la escala de tiempo de las fluctuaciones de temperatura, es decir:

$$R = \frac{\epsilon \overline{\theta'^2}}{\kappa \epsilon_\theta} \quad (3.45)$$

Si la relación de escalas de tiempo se supone constante e igual a: $R = C'_\theta/2$, donde $C'_\theta=1.6$ (valor que permite evaluar el decaimiento de las fluctuaciones de temperatura en turbulencia de malla "grid turbulence"). La varianza de la temperatura puede escribirse entonces como:

$$\overline{\theta'^2} = \frac{C'_\theta}{2} \epsilon_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \quad (3.46)$$

Si existe equilibrio entre la producción y disipación de $\overline{\theta'^2}$, es decir $P_\theta = \rho\epsilon_\theta$, se tiene:

$$\overline{\theta'^2} = -\frac{C'_\theta}{\rho} \frac{\kappa}{\epsilon} \left(\overline{u'_j \theta'} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_j} \right) \quad (3.47)$$

Las expresiones algebraicas ecs. (3.31 y 3.40), que representan los seis esfuerzos de Reynolds y los tres flujos de calor respectivamente, se presentan en el apéndice A. En el apéndice B, se presenta el desglose de cada uno de los términos que conforman la ec. (3.31) para el caso en que: $i=2$ y $j=2$. En el apéndice B, también se presentan los términos que constituyen la ec. (3.40) para el caso $i=2$.

Para finalizar la presentación del modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds, es necesario definir la función $f(l/x_2)$ que aparece en las ecuaciones (3.23, 3.24 y 3.26). De acuerdo a la hipótesis de semejanza de Monin y Obukhov (Monin and Yaglom, 1971), las características turbulentas de la capa superficial de la atmósfera (si $x_2 \gg y_0$, donde y_0 es el parámetro de rugosidad), dependen únicamente de cinco variables: x_2 , ρ , βg , u_τ y $q/\rho c_p$, donde: u_τ y q son la velocidad de fricción y el flujo de calor [W/m^2] en la superficie respectivamente. A partir de estas cinco variables es posible formular únicamente una combinación adimensional:

$$\xi = \frac{x_2}{L} \quad (3.48)$$

donde:

$$L = -\frac{u_\tau^3}{\kappa_o \beta g q / (\rho c_p)} \quad (3.49)$$

κ_o es la constante de von Kármán y L es la escala de Monin-Obukhov. En la ec. (3.49), se observa que si $L > 0$ ($q < 0$), la atmósfera se encuentra en una condición de equilibrio estable, si $L < 0$ ($q > 0$) la atmósfera es inestable, y si $|L| \rightarrow \infty$ ($q = 0$), la atmósfera se encuentra en equilibrio neutro.

Utilizando la hipótesis de semejanza de Monin y Obukhov (Monin and Yaglom, 1971), es posible definir en la capa superficial; la variación (con respecto a la altura x_2) de las características medias y turbulentas a partir de funciones universales de ξ . En particular, para los gradientes de la velocidad media y temperatura media se tiene:

$$\frac{\kappa_o y}{u_\tau z} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} = \phi_m(\xi) \quad (3.50)$$

$$\frac{\kappa_o y}{u_\tau z} \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} = \phi_m(\xi) \quad (3.51)$$

$$\frac{\kappa_o y}{\theta_\tau} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y} = \phi_h(\xi) \quad (3.52)$$

donde:

$$u_{\tau_x} = u_\tau \cos(\alpha_o) \quad (3.53)$$

$$u_{\tau_z} = u_\tau \sin(\alpha_o) \quad (3.54)$$

$$\theta_\tau = -\frac{q Pr_t \phi_m(\xi)}{\rho c_p u_\tau \phi_h(\xi)} \quad (3.55)$$

$$u_\tau = \sqrt{u_{\tau_x}^2 + u_{\tau_z}^2} \quad (3.56)$$

donde: u_τ es la resultante de la velocidad de fricción, θ_τ es una temperatura de conducción (en analogía con la definición de u_τ) y $\alpha_o = \arctang(\bar{w}/\bar{u})$, es el ángulo formado por las componentes del vector de velocidad en un punto y_p , localizado en la vecindad de la superficie terrestre.

En la capa superficial, se lleva a cabo la transferencia de energía térmica ($q = q_s$) y la transferencia de cantidad de movimiento ($\tau_{sx} = \tau_{xy}$, $\tau_{sz} = \tau_{yz}$) entre la superficie y la atmósfera. En la región cercana a la superficie, es común suponer que los esfuerzos cortantes τ_{xy} y τ_{yz} , y el flujo de calor q , no varían con respecto a la altura. Con esta aproximación, no es difícil comprobar que a partir de las ecuaciones de cantidad de movimiento ecs. (2.3 y 2.5) y de la ecuación de la energía térmica ec. (2.41), se obtienen las ecs. (3.50-3.52) (White, 1991), (Monin and Yaglom, 1971). Estas ecuaciones son muy importantes en el modelo que se presenta en este trabajo, ya que además de definir (como ya se ha mencionado), la variación de las velocidades y temperaturas medias en

la región cercana a la superficie, constituyen las condiciones de frontera de las ecs. (2.3, 2.5 y 2.41). Es decir, las velocidades \bar{u} y \bar{w} y la temperatura $\bar{\theta}$, de la celda numérica más cercana a la superficie terrestre, se definen por las ecuaciones (3.50-3.52) ¹.

La condiciones de frontera de las ecuaciones de transporte de la energía cinética turbulenta ecs. (2.47 y 2.49) y de la disipación de energía ecs. (2.50 y 2.52), se obtienen al suponer que cerca de la superficie, existe equilibrio entre la producción de κ (debido al cortante medio y a las fuerzas de flotación) y la disipación ϵ , por lo que entonces, la ec. (2.49), puede escribirse como:

$$\epsilon = -\overline{u'_1 u'_2} \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2} - \overline{u'_3 u'_2} \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_2} - \beta g_2 \overline{u'_2 \theta'} \quad (3.57)$$

Si se toma en cuenta el concepto de la difusividad turbulenta, se puede escribir:

$$-\overline{u'_1 u'_2} = u_{\tau_x}^2 = \nu_{tx} \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2} \quad (3.58)$$

$$-\overline{u'_3 u'_2} = u_{\tau_z}^2 = \nu_{tz} \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_2} \quad (3.59)$$

Utilizando las ecs. (3.50 y 3.51) en las dos ecuaciones anteriores, se obtiene el valor de la viscosidad turbulenta en las direcciones x y z , es decir:

$$\nu_{tx} = \frac{u_{\tau_x} \kappa_0 y_p}{\phi_m} \quad (3.60)$$

$$\nu_{tz} = \frac{u_{\tau_z} \kappa_0 y_p}{\phi_m} \quad (3.61)$$

Si se define la viscosidad turbulenta ν_t como:

$$\nu_t = \sqrt{\nu_{tx}^2 + \nu_{tz}^2} \quad (3.62)$$

Sustituyendo las ecs. (3.60 y 3.61) en la ec. (3.62), se obtiene:

$$\nu_t = \frac{\kappa_0 y_p u_\tau}{\phi_m} \quad (3.63)$$

La ec. (3.63), es utilizada para definir el valor de la correlación $\overline{u'_2 \theta'}$ y el flujo de calor q , en la región cercana a la superficie terrestre:

$$-\overline{u'_2 \theta'} = -\frac{q}{\rho c_p} = \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_2} \quad (3.64)$$

En este trabajo, se propone aproximar la producción de la energía turbulenta ec. (3.57) cerca de la superficie, utilizando la definición de las tres viscosidades turbulentas ecs. (3.60, 3.61 y 3.63), por lo que se tiene:

¹El autor desea aprovechar este punto de la discusión, para presentar en detalle las condiciones de frontera de las ecuaciones de κ y ϵ . En la pag. 46, se continúa con la presentación de las características generales de la función $f(l/x_2)$.

$$\epsilon = \nu_t \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2} \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2} + \nu_t \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_2} \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_2} - \beta g \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_2} \quad (3.65)$$

en esta ecuación se ha utilizado la definición $g_2 = -g$.

Sustituyendo las ecs. (3.50-3.52 y 3.63) en la ec. (3.65), se obtiene:

$$\epsilon = \frac{\kappa_o y_p u_\tau}{\phi_m} \left[\frac{u_\tau^2 \phi_m^2}{\kappa_o^2 y_p^2} + \frac{u_\tau^2 \phi_m^2}{\kappa_o^2 y_p^2} \right] - \frac{\beta g}{Pr_t} u_\tau \theta_\tau \frac{\phi_h}{\phi_m} \quad (3.66)$$

Al utilizar en la ec. (3.66), la definición de u_τ ec. (3.56), se obtiene la condición de frontera para la ecuación de la disipación de la energía turbulenta:

$$\epsilon = \frac{u_\tau^3 \phi_m}{\kappa_o y_p} - \frac{\beta g}{Pr_t} u_\tau \theta_\tau \frac{\phi_h}{\phi_m} \quad (3.67)$$

Si el término de producción, se pone en función del flujo de calor q , la ec. (3.67), se escribe como (ver ec. (3.64)):

$$\epsilon = \frac{u_\tau^3 \phi_m}{\kappa_o y_p} + \beta g \frac{q}{\rho c_p} \quad (3.68)$$

Con el propósito de definir la condición de frontera de la ecuación de κ , es conveniente recordar que la viscosidad turbulenta ν_t , en los modelos de primer orden de dos ecuaciones, se define como función de κ y ϵ , a partir de la relación:

$$\nu_t = c_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (3.69)$$

Igualando la ec. (3.69) con la ec. (3.63), y despejando la energía turbulenta, se obtiene la condición de frontera de κ :

$$\kappa^2 = \frac{\kappa_o y_p u_\tau}{c_\mu \phi_m} \epsilon \quad (3.70)$$

Si en la ec. (3.70), se sustituye la condición de frontera de ϵ ec. (3.67), se tiene:

$$\kappa = \frac{u_\tau^2}{c_\mu^{1/2}} - u_\tau \left(\frac{\kappa_o y_p \theta_\tau}{c_\mu} \right)^{1/2} \frac{\phi_h^{1/2}}{\phi_m} \left(\frac{\beta g}{Pr_t} \right)^{1/2} \quad (3.71)$$

Si la celda numérica que representa la condición de frontera, se localiza cerca de la superficie terrestre, entonces, $y_\tau \rightarrow 0$ por lo que el segundo término de la ec. (3.71) se considera despreciable. La condición de frontera de la ecuación de κ es entonces:

$$\kappa = \frac{u_\tau^2}{c_\mu^{1/2}} \quad (3.72)$$

Los esfuerzos cortantes y el flujo de calor en la superficie, se obtienen a partir de las siguientes relaciones:

$$\tau_{xz} = -\rho \overline{u'_1 u'_2} = \rho \nu_t \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2} = \rho \frac{\kappa_o y_p u_\tau}{c_\mu} \frac{u_\tau}{\kappa_o y_p} \phi_m = \rho u_\tau^2 \cos(\alpha_c) \quad (3.73)$$

$$\epsilon = \nu_t \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2} \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2} + \nu_t \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_2} \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_2} - \beta g \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_2} \quad (3.65)$$

en esta ecuación se ha utilizado la definición $g_2 = -g$.

Sustituyendo las ecs. (3.50-3.52 y 3.63) en la ec. (3.65), se obtiene:

$$\epsilon = \frac{\kappa_o y_p u_\tau}{\phi_m} \left[\frac{u_{\tau z}^2 \phi_m^2}{\kappa_o^2 y_p^2} + \frac{u_{\tau x}^2 \phi_m^2}{\kappa_o^2 y_p^2} \right] - \frac{\beta g}{Pr_t} u_\tau \theta_\tau \frac{\phi_h}{\phi_m} \quad (3.66)$$

Al utilizar en la ec. (3.66), la definición de u_τ ec. (3.56), se obtiene la condición de frontera para la ecuación de la disipación de la energía turbulenta:

$$\epsilon = \frac{u_\tau^3 \phi_m}{\kappa_o y_p} - \frac{\beta g}{Pr_t} u_\tau \theta_\tau \frac{\phi_h}{\phi_m} \quad (3.67)$$

Si el término de producción, se pone en función del flujo de calor q , la ec. (3.67), se escribe como (ver ec. (3.64)):

$$\epsilon = \frac{u_\tau^3 \phi_m}{\kappa_o y_p} + \beta g \frac{q}{\rho c_p} \quad (3.68)$$

Con el propósito de definir la condición de frontera de la ecuación de κ , es conveniente recordar que la viscosidad turbulenta ν_t , en los modelos de primer orden de dos ecuaciones, se define como función de κ y ϵ , a partir de la relación:

$$\nu_t = c_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (3.69)$$

Igualando la ec. (3.69) con la ec. (3.63), y despejando la energía turbulenta, se obtiene la condición de frontera de κ :

$$\kappa^2 = \frac{\kappa_o y_p u_\tau}{c_\mu \phi_m} \epsilon \quad (3.70)$$

Si en la ec. (3.70), se sustituye la condición de frontera de ϵ ec. (3.67), se tiene:

$$\kappa = \frac{u_\tau^2}{c_\mu^{1/2}} - u_\tau \left(\frac{\kappa_o y_p \theta_\tau}{c_\mu} \right)^{1/2} \frac{\phi_h^{1/2}}{\phi_m} \left(\frac{\beta g}{Pr_t} \right)^{1/2} \quad (3.71)$$

Si la celda numérica que representa la condición de frontera, se localiza cerca de la superficie terrestre, entonces, $y_p \rightarrow 0$ por lo que el segundo término de la ec. (3.71) se considera despreciable. La condición de frontera de la ecuación de κ es entonces:

$$\kappa = \frac{u_\tau^2}{c_\mu^{1/2}} \quad (3.72)$$

Los esfuerzos cortantes y el flujo de calor en la superficie, se obtienen a partir de las siguientes relaciones:

$$\tau_{xy} = -\overline{\rho u'_1 u'_2} = \rho \nu_t \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2} = \rho \frac{\kappa_o y_p u_\tau}{\phi_m} \frac{u_{\tau z}}{\kappa_o y_p} \phi_m = \rho u_\tau^2 \cos(\alpha_o) \quad (3.73)$$

$$\tau_{yz} = -\rho \overline{u'_2 u'_3} = \rho \nu_t \frac{\partial \overline{u_3}}{\partial x_2} = \rho \frac{\kappa_o y_p u_\tau}{\phi_m} \frac{u_{\tau z}}{\kappa_o y_p} \phi_m = \rho u_\tau^2 \text{sen}(\alpha_o) \quad (3.74)$$

$$q = \rho c_p \overline{u'_2 \theta'} = -\rho c_p \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_2} = -\frac{\rho c_p \kappa_o y_p u_\tau}{Pr_t} \frac{\theta_\tau}{\phi_m \kappa_o y_p} \phi_h = -\frac{\rho c_p u_\tau \theta_\tau}{Pr_t} \frac{\phi_h}{\phi_m} \quad (3.75)$$

La velocidad y la temperatura de la celda numérica que constituye la frontera del dominio en estudio (y que se localiza en la capa superficial), se obtienen integrando las ecs. (3.50-3.52), es decir;

$$\overline{u}(y) = \frac{u_{\tau z}}{\kappa_o} \left(\ln \left(\frac{y}{y_o} \right) - \Psi_m(\xi) \right) \quad (3.76)$$

$$\overline{w}(y) = \frac{u_{\tau z}}{\kappa_o} \left(\ln \left(\frac{y}{y_o} \right) - \Psi_m(\xi) \right) \quad (3.77)$$

$$\overline{\theta}(y) - \overline{\theta}_s = \frac{\theta_\tau}{\kappa_o} \left(\ln \left(\frac{y}{y_o} \right) - \Psi_h(\xi) \right) \quad (3.78)$$

donde $\overline{\theta}_s = T_s$ es la temperatura de la superficie y las funciones Ψ_m y Ψ_h se obtienen a partir de la integral:

$$\Psi_{m,h}(\xi) = \int_0^\xi \frac{1 - \phi_{m,h}(\xi)}{\xi} d\xi \quad (3.79)$$

Si en las ecs. (3.76-3.78), se despejan las variables $u_{\tau z}$, $w_{\tau z}$ y θ_τ , y se sustituyen en las ecs. (3.73-3.75), se obtiene las expresiones utilizadas en este trabajo para evaluar los esfuerzos cortantes y el flujo de calor en la superficie terrestre:

$$\tau_{xy} = \frac{\rho \kappa^{1/2} c_\mu^{1/4} \kappa_o}{\ln \frac{y_p}{y_o} - \Psi_m} \overline{u}(y_p) \quad (3.80)$$

$$\tau_{yz} = \frac{\rho \kappa^{1/2} c_\mu^{1/4} \kappa_o}{\ln \frac{y_p}{y_o} - \Psi_m} \overline{w}(y_p) \quad (3.81)$$

$$q = -\frac{\rho c_p \kappa^{1/2} c_\mu^{1/4} \phi_h}{Pr_t \phi_m} \left[\frac{(\overline{\theta}(y_p) - \overline{\theta}_s) \kappa_o}{\ln \frac{y_p}{y_o} - \Psi_h} \right] \quad (3.82)$$

Monin y Yaglom (Monin and Yaglom, 1971) presentan una discusión en relación a la forma que deben de tener las funciones universales $\phi_{m,h}$ y $\Psi_{m,h}$, en donde lo más relevante a observar (y es lo que utilizaron Gibson y Launder (Gibson and Launder, 1976) para definir la función $f(l/x_2)$), es que para cualquier valor dado de y , u_τ y βg , si $|q| \rightarrow 0$ (atmósfera neutra), $|L| \rightarrow \infty$, entonces; $|\xi| = \frac{y}{L} \rightarrow 0$.

Considerando la condición $|\xi| \rightarrow 0$, si se define:

$$\phi_{m,h}(0) = \lim_{\xi \rightarrow 0} \phi_{m,h}(\xi) = 1 \quad (3.83)$$

y

$$\Psi_{m,h}(0) = \lim_{\xi \rightarrow 0} \Psi_{m,h}(\xi) = 0 \quad (3.84)$$

entonces, si se satisface la condición $|q| \rightarrow 0$, y se toman en cuenta las ecs. (3.83 y 3.84), se tiene una distribución logarítmica para la velocidad y para la temperatura (ver ecs. (3.76-3.78)).

De manera equivalente, para valores fijos de $|q|$ y u_τ , si $y \rightarrow 0$, $|\xi| \rightarrow 0$, entonces: $\phi_{m,h}(0) \rightarrow 1$ y $\Psi_{m,h}(0) \rightarrow 0$.

Esto significa que para valores de $y \ll |L|$, el efecto de la turbulencia es similar al que se presenta en una atmósfera neutra (temperatura potencial homogénea), por lo que la turbulencia en la capa $y \ll |L|$ se produce únicamente debido a factores dinámicos y no a efectos térmicos. En conclusión puede decirse que la condición $|\xi| \rightarrow 0$, se presenta tanto en la región cercana a la superficie como en una atmósfera neutra.

Se ha mencionado que el propósito de la función $f(l/y)$, es reducir el efecto de la corrección de pared conforme aumenta la distancia a la superficie. En la región cercana a la superficie (turbulencia de pared), la influencia de las fluctuaciones de presión sobre los esfuerzos $\overline{u_i u_j}$ y los flujos de calor $\overline{u_i \theta'}$, es grande por lo que se define que la función $f = f(l/y) \rightarrow 1$.

La forma de la función $f = f(l/y)$, puede obtenerse si se supone que el flujo está orientado en la dirección de x . En esta condición, la escala de longitud de los grandes remolinos turbulentos, se define como:

$$l = -\frac{(\overline{u_1' u_2'})^{\frac{3}{2}}}{\epsilon} \quad (3.85)$$

Si la energía cinética turbulenta se encuentra en equilibrio (ver ec. (3.57)),

$$\epsilon = P + G \quad (3.86)$$

donde

$$P \approx -\overline{u_1' u_2'} \frac{\partial \overline{u}}{\partial y} \quad (3.87)$$

y

$$u_\tau \approx u_{\tau z} = -(\overline{u_1' u_2'})^{1/2} \quad (3.88)$$

Si se define R_f (flux Richardson number) como:

$$R_f = -\frac{G}{P} \quad (3.89)$$

y utilizando las ecs. (3.87 y 3.89), en la ec. (3.86) se obtiene:

$$\epsilon = -\overline{u_1' u_2'} \frac{\partial \overline{u}}{\partial y} (1 - R_f) \quad (3.90)$$

Si se sustituye la ec. (3.90) y la relación $u_\tau^3 \approx -(\overline{u_1' u_2'})^{3/2}$ en la ec. (3.85) se obtiene:

$$l = \frac{u_\tau^3}{-u'_1 u'_2 \partial \bar{u} / \partial y (1 - R_f)} \quad (3.91)$$

Utilizando la ec. (3.50) en la ec. (3.91) se obtiene:

$$l = \frac{\kappa_o y}{(1 - R_f) \phi_m} \quad (3.92)$$

La función f , que representa la influencia de la superficie sobre las fluctuaciones de presión, se escribe como:

$$f = f(l/y) = \frac{l}{\kappa_o y} = \frac{1}{(1 - R_f) \phi_m} \quad (3.93)$$

Si la atmósfera es neutra $\phi_m = 1$ y $R_f = 0$, por lo que: $f = 1$.

El hecho de que en condiciones de atmósfera neutra, la función $f = f(l/y) = 1$, puede explicarse si se recurre a la hipótesis de Prandtl (longitud de mezcla), en la que establece que en turbulencia cerca de una superficie, la escala de longitud de los grandes remolinos turbulentos está definida por:

$$l_m = \kappa_o y \quad (3.94)$$

Si en la ec. (3.93), $l_m = l$, la función $f = f(l/y) = l_m / \kappa_o y = 1$. Por lo que se concluye entonces que en condiciones de atmósfera neutra, la escala de longitud de los remolinos turbulentos crece en proporción directa con la distancia a la superficie.

Es conveniente mencionar que en este trabajo, al igual que lo hicieron Gibson y Launder (Gibson and Launder, 1976), se ha utilizado la misma expresión de f para alterar los esfuerzos turbulentos y los flujos de calor (ver ecs. (3.23, 3.24 y 3.26), es decir la función ϕ_m que aparece en la ec. (3.93) es igual a la función ϕ_h . Sin embargo, en las condiciones de frontera para las ecuaciones de cantidad de movimiento ecs. (3.50 y 3.51), energía térmica ec. (3.52), energía turbulenta ec. (3.72) y disipación de energía ec. (3.67), se han utilizado formulaciones diferentes para las funciones ϕ_m , ϕ_h , Ψ_m y Ψ_h (ver apéndice C).

Cuando se presentan grandes valores de $|\xi|$, el comportamiento de la función de corrección f es distinto para las dos condiciones siguientes: (1) atmósfera estable $\xi \rightarrow +\infty$ y (2) atmósfera inestable $\xi \rightarrow -\infty$.

La condición de atmósfera estable, se presenta cuando se cumple lo siguiente: (a) para valores fijos de y y u_τ , si q tiende a un valor negativo grande (inversiones térmicas severas), $L \rightarrow 0$, entonces $\xi \rightarrow +\infty$, (b) para valores fijos de $q < 0$ y u_τ , si $y \rightarrow \infty$, entonces $\xi \rightarrow +\infty$.

Cuando se tiene la condición $\xi \rightarrow +\infty$, no se presentan fluctuaciones turbulentas de gran escala, ya que éstas pierden mucha de su energía al vencer las fuerzas de gravedad, por lo que la turbulencia sólo puede existir en las pequeñas escalas. En consecuencia, una gran estabilidad impide el intercambio turbulento entre las capas de la atmósfera, por lo que la turbulencia es de carácter local y no depende de la distancia a la superficie terrestre, por lo que se espera que $f \rightarrow 0$.

En la literatura, existe una gran cantidad de formulaciones que definen la función ϕ_m para una atmósfera estable, los datos experimentales en la capa superficial se ajustan a la siguiente expresión:

$$\phi_m = (1 + \beta_1 \xi) = (1 - \beta_1 R_f)^{-1} \quad (3.95)$$

donde $\beta_1=5.5$.

En esta última expresión se ha tomado en cuenta que:

$$\overline{u'_2 \theta'} = \frac{q}{\rho c_p} \quad (3.96)$$

y

$$R_f = \frac{y}{\phi_m L} \quad (3.97)$$

Si se sustituyen las ecs. (3.95 y 3.97) en la ec. (3.93), se obtiene la función f para una condición de equilibrio estable:

$$f = \frac{1}{1 + \xi(\beta_1 - 1)} \quad (3.98)$$

En la ec. (3.98), se observa que si $\xi \rightarrow +\infty$, $f \rightarrow 0$, es decir, la corrección debido a la presencia de la pared es despreciable.

La condición de atmósfera inestable se presenta cuando se cumple lo siguiente: (a) para valores fijos de y y $q > 0$, si $u_\tau \rightarrow 0$ (convección libre), entonces L tiende a un valor negativo pequeño, por tanto $\xi \rightarrow -\infty$, (b) para valores fijos de $q > 0$ y u_τ , si $y \gg |L|$, entonces $\xi \rightarrow -\infty$.

En equilibrio inestable (si $u_\tau \rightarrow 0$), el esfuerzo cortante en la superficie es cada vez más pequeño por lo que la turbulencia obtiene su energía debido a las inestabilidades térmicas y no al flujo medio. Monin y Yaglom (Monin and Yaglom, 1971), mencionan que la turbulencia presente cuando y es fijo (no muy grande) y u_τ adquiere un valor muy pequeño, tiene características semejantes a la turbulencia que aparece cuando u_τ es fijo y $y \gg |L|$. En flujos inestables a grandes alturas, la temperatura tiende a ser homogénea ya que se presenta un intenso mezclado entre las capas de la atmósfera. El proceso de mezcla es más intenso a mayor altura, lo que hace suponer que los remolinos turbulentos aumentan su tamaño al aumentar la distancia a la superficie ($f \approx 1$).

En la literatura se reportan diversas fórmulas de ϕ_m , que se ajustan a datos experimentales medidos en condiciones de equilibrio inestable.

En este trabajo, se hace uso de la expresión utilizada por Gibson y Launder (Gibson and Launder, 1978), es decir:

$$\phi_m = (1 - \beta_2 R_f)^{-\frac{1}{4}} \quad (3.99)$$

donde $\beta_2=14$ (Monin and Yaglom, 1971).

La función ϕ_m , puede ser evaluada como función de la variable ξ y del parámetro β_2 al encontrar los ceros de la ecuación:

$$\phi_m^4 - \beta_2 \xi \phi_m^3 - 1 = 0 \quad (3.100)$$

Al sustituir las ecs. (3.97 y 3.99) en la ec. (3.93), se obtiene:

$$f = \frac{\left(1 - \beta_2 \frac{\xi}{\phi_m}\right)^{\frac{1}{4}}}{\left(1 - \frac{\xi}{\phi_m}\right)} \quad (3.101)$$

En la ec. (3.101), se observa que para valores de $\xi \rightarrow -\infty$, $f \rightarrow 1$.

Capítulo 4

Modelo de dispersión de partículas, Lagrangiano Estocástico Determinístico

En este capítulo, se presenta el modelo matemático Lagrangiano-Estocástico-Determinístico (LSD), que propuso Milojevic (Milojevic, 1985), para calcular la dispersión de partículas sólidas ("pesadas") en flujos turbulentos. El modelo original de Milojevic, fue desarrollado para el cálculo de flujos turbulentos con partículas en suspensión, en condiciones de temperatura constante, en dos dimensiones y en estado estacionario. Avila y Cervantes (Avila and Cervantes, 1995), han modificado el modelo original y lo han utilizado para evaluar la transferencia de calor entre las fases (partículas-aire), y la transferencia de energía térmica entre la suspensión y las paredes del ducto que contiene la mezcla (aire-partículas). La utilización del modelo, ha servido también para establecer la correlación entre la reducción de la intensidad de turbulencia del flujo y el aumento en la concentración de partículas (Avila, 1994), (Avila and Cervantes, 1995), (Milojevic et al., 1987), (Avila and Cervantes, 1987), (Avila, 1986).

Una partícula pesada que se localiza en el interior de un flujo turbulento, es aquella partícula que tiene una densidad mucho mayor que la densidad del fluido. Debido a la inercia (dinámica y térmica) de las partículas y a las fuerzas de cuerpo que actúan sobre éstas, la respuesta de una partícula a las fluctuaciones turbulentas, es diferente a la capacidad de respuesta que tiene un elemento de fluido. Consecuentemente, la dispersión de partículas sólidas en flujos turbulentos, es un problema de mayor complejidad que la difusión de gases, de elementos de fluido o de pequeñas y ligeras partículas. La presencia de la fuerza de gravedad sobre una partícula pesada, ocasiona que exista una velocidad de caída libre o velocidad terminal (drift velocity, settling velocity or free-fall velocity) relativa al movimiento medio del fluido. Si la partícula tiene una velocidad relativa con respecto a la velocidad media del flujo, la partícula cambia continuamente de elemento de fluido que la acompaña, por lo que entonces aparece lo que Yudine (Yudine, 1959) llamó: el "efecto de trayectorias cruzadas". Al presentarse este fenómeno, la partícula cambia continuamente de remolino turbulento y pierde su correlación de velocidad más rápidamente que un elemento de fluido, el cual cambia su velocidad turbulenta debido únicamente al decaimiento del remolino (eddy decay). La expresión

"decaimiento del remolino", es utilizada según Csanady (Csanady, 1963), para describir los efectos de: la formación continua aleatoria de los remolinos y el proceso de transferencia de energía en cascada hacia las escalas pequeñas de la turbulencia. Por otro lado, debido a la gran inercia que tienen las partículas, sus fluctuaciones turbulentas $v_i(t)$ (utilizando la notación de Wang y Stock (Wang and Stock, 1993)), son diferentes a las fluctuaciones de velocidad de los elementos de fluido ¹. Es decir, la fuerza de inercia de las partículas, les impide responder a los cambios de velocidad con la misma rapidez con que lo hace el fluido, por lo que existe un movimiento relativo entre las partículas y el elemento de fluido que las acompaña ("efecto de inercia").

En la literatura, se han reportado diversos trabajos teóricos cuyo principal objetivo, es establecer la relación que existe entre la dispersión turbulenta de las partículas y: (a) las características medias y turbulentas del flujo y (b) los parámetros de inercia y velocidad terminal de las partículas (Yudine, 1959), (Csanady, 1963), (Wang and Stock, 1993), (Reeks, 1977), (Pismen and Nir, 1978).

Con el propósito de tener una idea general, de los fenómenos que ocurren en un flujo turbulento que transporta partículas sólidas, es conveniente discutir tres casos extremos:

(a) Las partículas tienen velocidad terminal ($v_d \rightarrow 0$) despreciable e inercia despreciable. En este caso, la partícula se encuentra confinada siempre al mismo remolino, y se comporta como un elemento de fluido, ya que no tiene velocidad media relativa y responde a las fluctuaciones con la misma rapidez que el fluido (los efectos de inercia y de trayectorias cruzadas son despreciables). Si la velocidad terminal y los efectos de inercia no existen, la correlación de velocidad del fluido en contacto con las partículas, a lo largo de su trayectoria;

$$R_{ij}^f(\tau) = \frac{\overline{u_i^p(0) u_j^p(\tau)}}{(\overline{u_i^{p2}} \overline{u_j^{p2}})^{1/2}} \quad (4.1)$$

es igual a la correlación de velocidad de las partículas;

$$R_{ij}^p(\tau) = \frac{\overline{v_i(0) v_j(\tau)}}{(\overline{v_i^2} \overline{v_j^2})^{1/2}} \quad (4.2)$$

donde u_j^p son las fluctuaciones de velocidad de los elementos de fluido en contacto con la partícula.

Adicionalmente si $R_{ij}^f = R_{ij}^p$, la escala integral de tiempo de las fluctuaciones de velocidad del fluido por donde pasa la partícula T_{ii}^f , la escala integral de tiempo de las partículas T_{ii}^p y la escala integral (Lagrangiana) de tiempo del flujo T_L , son iguales.

(b) Las partículas no tienen inercia y su velocidad terminal ($v_d \rightarrow \infty$) es grande. En esta condición, las partículas siguen exactamente las fluctuaciones del fluido por lo que la velocidad de fluctuación de las partículas $urms_p = (\overline{v_i^2})^{1/2} = v_d$, es igual a la velocidad

¹En las ecuaciones de esta sección, ecs. (4.3-4.6), se utiliza la notación de Wang y Stock (Wang and Stock, 1993). En esta notación, los dobles subíndices que aparecen en las escalas integrales de tiempo ecs. (4.3 y 4.4) y en los coeficientes de dispersión ecs. (4.5 y 4.6), no significa sumatoria.

de fluctuación del fluido $urms_f = (\overline{u_i^2})^{1/2} = u_{io}$. Si la velocidad terminal es muy grande $v_d \rightarrow \infty$, las partículas viajan muy rápido a través de la estructura turbulenta espacial (Euleriana) del flujo. Debido a que la inercia de las partículas es despreciable, cada vez que cambian de remolino turbulento, reciben una nueva fluctuación. El cambio de fluctuación se lleva a cabo con una frecuencia igual a v_d/L_f , donde L_f es la escala integral de longitud (Euleriana). En estas circunstancias, el coeficiente de correlación de las partículas R_{ii}^p ; es igual al coeficiente de correlación de las fluctuaciones de velocidad $u_i(x_i, t)$ del flujo en un marco de referencia Euleriano. Wang y Stock (Wang and Stock, 1993), han mostrado que debido al efecto de trayectorias cruzadas, la escala integral de tiempo de las partículas $T_{ii}^p = L_f/v_d$ es menor que la escala integral de tiempo del flujo T_L . En esta condición, el efecto del decaimiento de los remolinos turbulentos es despreciable ya que la frecuencia aproximada del decaimiento es u_{io}/L_f , la cual es mucho menor que la frecuencia de los cambios de remolino v_d/L_f .

(c) Las partículas tienen velocidad terminal ($v_d = 0$) despreciable y su inercia es muy grande. En este caso, el efecto de las trayectorias cruzadas es despreciable ya que no existe velocidad relativa media entre la fase sólida y el aire. En estas condiciones, la partícula responde lentamente a las fluctuaciones de velocidad y recibe una nueva fluctuación cada vez que un remolino turbulento desaparece. La escala de tiempo que dura el remolino en contacto con la partícula (tiempo que dura la fluctuación de velocidad), corresponde entonces a la escala integral de tiempo Euleriano del flujo T_{mE} . Si la inercia de las partículas es muy grande, su intensidad de turbulencia $(\overline{v_i^2}) = v_{io}^2$ es menor que la intensidad de turbulencia del fluido $(\overline{u_i^2}) = u_{io}^2$, además, la correlación de velocidad de las partículas $\overline{v_i(0) v_i(\tau)}$, es mayor que la correlación de velocidad del fluido $\overline{u_i(0) u_i(\tau)}$. Si se satisface lo anterior, la escala integral de tiempo de las partículas $T_{ii}^p = T_{mE}$, es mayor que la escala integral de tiempo del fluido "que observa" la partícula a lo largo de su trayectoria T_{ii}^f , es decir:

$$T_{ii}^p = \int_0^\infty R_{ii}^p dt = \int_0^\infty \frac{\overline{v_i(0) v_i(\tau)}}{(\overline{v_i^2} \overline{v_i^2})^{1/2}} dt = \int_0^\infty \frac{\overline{v_i(0) v_i(\tau)}}{v_{io}^2} dt \quad (4.3)$$

es mayor que:

$$T_{ii}^f = \int_0^\infty R_{ii}^f dt = \int_0^\infty \frac{\overline{u_i(0) u_i(\tau)}}{(\overline{u_i^2} \overline{u_i^2})^{1/2}} dt = \int_0^\infty \frac{\overline{u_i(0) u_i(\tau)}}{u_{io}^2} dt \quad (4.4)$$

Al ser muy grande la inercia de las partículas, su coeficiente de dispersión (para tiempos grandes $t \rightarrow \infty$), es mayor que el coeficiente de dispersión de los elementos de fluido, es decir:

$$D_{ii}^p(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{2} \frac{d\overline{X_{ii}^{p2}}}{dt} = v_{io}^2 \int_0^\infty R_{ii}^p(\infty) dt = v_{io}^2 T_{ii}^p \quad (4.5)$$

es mayor que:

$$D_{ii}^f(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{2} \frac{d\overline{X_{ii}^2}}{dt} = u_{io}^2 \int_0^\infty R_{ii}^f(\infty) dt = u_{io}^2 T_L \quad (4.6)$$

donde X_{ii}^{p2} y X_{ii}^2 , es la varianza de la dispersión de partículas y elementos de fluido respectivamente.

Cuando las partículas tienen una inercia infinitamente grande, sus fluctuaciones de velocidad son prácticamente cero, por lo que se espera (de manera errónea) que su coeficiente dispersión se aproxime a cero. Wang y Stock (Wang and Stock, 1993) aclaran esta situación y mencionan, que en el límite de gran inercia, la escala integral de tiempo de las partículas T_{ii}^p tiende a un valor infinito, y su coeficiente de dispersión es: $D_{ii}^p(\infty) = u_{io}^2 T_{ii}^p = 0 \times \infty$, lo cual es una cantidad finita e igual a: $D_{ii}^p(\infty) = u_{io}^2 T_{mE}$.

En trabajos experimentales y numéricos que se reportan en la literatura (Milojevic, 1985), (Avila, 1994), (Sato and Yamamoto, 1987) (Wang and Stock, 1992a), la relación entre la escala integral de tiempo (Lagrangiana) T_L y la escala integral de tiempo (Euleriana) T_{mE} , es aproximadamente; $T_L = 0.3 \sim 0.6 T_{mE}$, es decir, T_L es menor que T_{mE} . Se concluye entonces que en el límite de inercia infinita, el coeficiente de difusión de las partículas $D_{ii}^p(\infty) = u_{io}^2 T_{mE}$ es mayor al coeficiente de difusión de los elementos de fluido $D_{ii}^f(t \rightarrow \infty) = u_{io}^2 T_L$ (ver ecs. (4.5 y 4.6)).

En los párrafos anteriores, se comentaron tres situaciones extremas que se presentan cuando las partículas tienen propiedades especiales. Sin embargo, el análisis se complica demasiado cuando los efectos de inercia y de trayectorias cruzadas se presentan de manera combinada. Para determinar las características turbulentas de las partículas tomando en cuenta ambos efectos, diversos grupos de investigación, han abordado el problema desde el punto de vista teórico (Yudine, 1959), (Csanady, 1963), (Wang and Stock, 1993), (Reeks, 1977), (Pismen and Nir, 1978), experimental (Wells and Stock, 1983), (Snyder and Lumley, 1971), (Sato and Yamamoto, 1987) y numérico (Avila, 1994), (Avila and Cervantes, 1995), (Milojevic et al., 1987), (Avila and Cervantes, 1987), (Avila, 1986), (Milojevic, 1985), (Tsuji et al., 1987), (Laitone, 1981), (Shuen et al., 1983), (Kallio and Reeks, 1989), (Durst et al., 1984), (Chen and Wood, 1985). (Schönung, 1983). Avila (Avila, 1994), presenta una extensa bibliografía relacionada con trabajos de simulación numérica en flujos turbulentos con partículas sólidas en suspensión.

Desde el punto de vista teórico, lo que interesa conocer básicamente, es el tensor de correlaciones de velocidad de las partículas R_{ij}^p , como función del tensor de correlaciones de velocidad del fluido R_{ij}^f . Una vez que se conoce R_{ij}^p , es posible determinar las escalas de tiempo y el coeficiente de dispersión de las partículas.

En los estudios numéricos, se recurre frecuentemente a la formulación Lagrangiana de los elementos de fluido (ver capítulo de introducción) y de las partículas "pesadas". En una simulación numérica, lo que interesa conocer es la velocidad y la posición (trayectoria) de varios miles de partículas que se desplazan en el interior del flujo. Al evaluar la trayectoria de un gran número de partículas, es posible determinar sus características turbulentas mediante promedios estadísticos de grupo (ensemble average).

En la siguiente sección, se presenta el modelo matemático LSD que se utiliza en este trabajo para determinar la dispersión de partículas "pesadas". Debido a que el modelo LSD recurre a la formulación Lagrangiana de elementos de fluido y de partículas sólidas, sus dos componentes principales son: (a) la ecuación de cantidad de movimiento (Lagrangiana) de las partículas y (b) el modelo de generación de los remolinos turbulentos que acompañan a cada partícula en su trayectoria.

4.1 Características generales del modelo de dispersión de partículas

El modelo de dispersión de partículas "pesadas" LSD, es un modelo híbrido en sí mismo, ya que por un lado; las velocidades Lagrangianas de los elementos de fluido (que acompañan a las partículas), se generan como números aleatorios independientes, con propiedades estadísticas que son función de las características Eulerianas del flujo, mientras que por otro; la trayectoria de cada partícula "pesada" (en interacción con los remolinos turbulentos), se obtiene al resolver su ecuación Lagrangiana de cantidad de movimiento.

En el capítulo de introducción, se mencionó que si las fluctuaciones de velocidad (Lagrangianas) del fluido, se generan como números aleatorios independientes, la función $X(x, t)$ es Markoviana. También se comentó que si un modelo de dispersión (de elementos de fluido), genera las fluctuaciones de velocidad con intervalos de tiempo Δt mayores a la escala integral de tiempo T_L , éste pertenece a la familia de los modelos de Monte Carlo o modelos Markovianos de orden cero.

El modelo LSD, no calcula de manera explícita la trayectoria de los elementos de fluido en contacto con las partículas, sino que a partir de conocer la escala de velocidad (intensidad de turbulencia) y las escalas Lagrangianas de tiempo y longitud de los grandes remolinos turbulentos, genera una fluctuación de velocidad que "atrapa" a la partícula.

La trayectoria de cada partícula "pesada" en el interior del remolino que la "atrapó", se obtiene al integrar su ecuación Lagrangiana de cantidad de movimiento. Si se conoce la posición de la partícula en el interior de la estructura turbulenta de gran escala, es posible determinar tanto el tiempo de residencia de la partícula (en el interior del remolino), como la posición relativa que guarda la partícula con respecto al remolino.

El modelo LSD, caracteriza al remolino turbulento mediante dos parámetros: (a) su tiempo de vida τ_L y (b) su escala de longitud Lagrangiana λ_L . Si el tiempo de vida del remolino se agota, el modelo genera una nueva fluctuación de velocidad que acompañará a la partícula. Si la partícula en su trayectoria (independiente de la trayectoria del elemento de fluido), recorre una distancia mayor a la escala de longitud del remolino, la partícula abandona al remolino (trayectoria cruzada), cuando ésto sucede, el modelo genera una nueva fluctuación de velocidad la cual acompañará a la partícula hasta que cualquiera de los dos eventos siguientes tenga lugar: (a) que el remolino agote su tiempo de vida, o (b) que la partícula abandone el remolino. Al suceder cualquiera de estos eventos, se genera una nueva fluctuación de velocidad.

En la atmósfera, se presenta una condición de turbulencia no homogénea y no estacionaria, es decir, las escalas de longitud y tiempo de los grandes remolinos varía con respecto a la posición y al tiempo. Si se utiliza el modelo LSD en flujos atmosféricos, las fluctuaciones de velocidad que se generan tienen escalas de longitud y tiempo aleatorias con cierta distribución de probabilidad. Estudiar la dispersión de partículas en estas condiciones, es uno de los problemas que Wang y Stock (Wang and Stock, 1993) sugieren investigar.

Hasta donde el autor tiene conocimiento, ésta es la primera ocasión que el modelo

original LSD, ha sido modificado y utilizado para simular la dispersión de partículas en flujos atmosféricos. Para utilizar el modelo LSD en la atmósfera, fue necesario en primer lugar resolver las ecuaciones de continuidad ec. (2.2), cantidad de movimiento ecs. (2.3-2.5), energía térmica ec. (2.41) y las ecuaciones de transporte de variables turbulentas κ ec. (2.49) y ϵ ec. (2.52), así como también las ecuaciones algebraicas que proporcionan la varianza de las fluctuaciones de velocidad $\overline{u_i^2}$ ec. (3.31) y la correlación velocidad temperatura $\overline{u_i\theta'}$ ec. (3.40). Al resolver estas ecuaciones, se obtiene el campo (Euleriano, tridimensional y no estacionario) de velocidades, temperaturas y características turbulentas del flujo que transporta a las partículas.

El modelo de Milojevic (Milojevic, 1985), ha sido utilizado tradicionalmente para calcular la trayectoria de partículas individuales en flujos bidimensionales en estado estacionario. Esto implica necesariamente, que la fuente de liberación de partículas permanece constante con respecto al tiempo.

Con el modelo LSD (modificado) que se presenta en este trabajo, es posible calcular la dispersión de partículas cuando la fuente es continua (pero finita en el tiempo) o instantánea. Simular la dispersión de partículas "pesadas" que son liberadas a la atmósfera a través de fuentes continuas o instantáneas, es de mucha utilidad ya que permite realizar análisis de riesgos en situaciones de emergencia (explosiones, fugas de gas y de material tóxico).

Milojevic (Milojevic, 1985), considera que el flujo que transporta a las partículas es estacionario. Desde el punto de vista numérico, ésto es una simplificación importante, ya que la trayectoria de cada partícula individual, se calcula desde que se introduce al flujo, hasta que lo abandona. En un flujo que varía con el tiempo (como es el caso de la atmósfera), es necesario conocer con anticipación el campo de velocidades del fluido por donde pasarán las partículas. Esto implica que durante el proceso cálculo, las partículas tiene que "esperar" hasta que las características Eulerianas del flujo se conozcan para el siguiente incremento de tiempo Δt (incremento en tiempo para la solución de las ecuaciones del fluido). Esto trae como consecuencia que mientras se conocen las propiedades turbulentas del flujo para el siguiente Δt , es necesario almacenar diversos parámetros tanto de la fase dispersa como de la fase continua como son: (a) velocidad instantánea de los remolinos y de las partículas, (b) posición y temperatura de cada partícula, (c) tiempo que ha estado la partícula en contacto con el remolino y (d) posición relativa de cada partícula en el interior del remolino.

Una vez que se conoce el campo de flujo por donde viajarán las partículas durante el próximo intervalo de tiempo (tiempo en que se supone que permanece constante el campo de flujo), se calcula la trayectoria de cada partícula. Cuando todas las partículas que se encuentran en el flujo, han viajado el Δt correspondiente, se "detienen" y "esperan" a que se conozca el campo de flujo para el siguiente incremento de tiempo Euleriano. Este proceso se repite para cada partícula, hasta que cualquiera de los dos eventos siguientes suceda primero: (a) la partícula abandone el dominio en estudio o (b) transcurra el tiempo de simulación.

Durante un proceso de simulación numérica de dispersión de partículas, es necesario calcular la trayectoria de varios miles de partículas, y realizar un promedio estadístico de grupo mediante el cual, es posible obtener las propiedades medias y turbulentas de la fase dispersa y los términos de interacción entre las fases.

4.2 Ecuación de cantidad de movimiento de una partícula sólida

El movimiento de cada partícula que se libera en la atmósfera, se considera en un marco de referencia Lagrangiano. Para formular la ecuación de movimiento de una partícula sólida y esférica, es conveniente suponer lo siguiente:

- (a) El tamaño de la partícula es de mucho menor magnitud que la escala de longitud de los grandes remolinos que contienen la energía turbulenta.
- (b) La partícula es mucho más grande que las moléculas del fluido, es decir, el tiempo de respuesta de las partículas a las fluctuaciones de velocidad es mucho mayor que el tiempo medio de colisión molecular.
- (c) El efecto del movimiento Browniano (de las moléculas de fluido) sobre las partículas, es despreciable en comparación con el efecto que tienen los remolinos turbulentos en la dispersión de las partículas.
- (d) Las partículas en su trayectoria, no varían en tamaño y forma.
- (e) Los efectos (que actúan directamente como fuerzas que se oponen al movimiento de la partícula) de masa virtual, gradiente de presión del flujo, Saffman y la fuerza de Basset, se consideran despreciables.
- (f) La densidad de la partícula ρ_p , es mucho mayor que la densidad del fluido ρ ($\sim \rho_p/\rho > 100$).

Tomando en cuenta lo anterior, la ecuación de movimiento de Basset-Boussinesq-Oseen se reduce a la siguiente forma (Maxey and Riley, 1983), (Morsi and Alexander, 1972) (Crowe et al., 1977):

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{u - u_p}{\tau_p} \quad (4.7)$$

$$\frac{dv_p}{dt} = \frac{v - v_p}{\tau_p} - g \left(1 - \frac{\rho}{\rho_p}\right) \quad (4.8)$$

$$\frac{dw_p}{dt} = \frac{w - w_p}{\tau_p} \quad (4.9)$$

donde

$$\tau_p = \frac{m_p}{3\pi\mu f d_p} \quad (4.10)$$

es el tiempo característico de respuesta dinámica de la partícula, m_p , y d_p , son: la masa y diámetro de la partícula respectivamente. El coeficiente de arrastre no lineal f , se calcula mediante la siguiente expresión (Rowe, 1961):

$$f = 1 + 0.15 Re_p^{0.687} \quad (4.11)$$

donde el número de Reynolds de la partícula es:

$$Re_p = \frac{\rho d_p U_{rel}}{\mu} \quad (4.12)$$

El coeficiente empírico f , calculado a partir de la ec. (4.11), es válido para $Re_p < 1000$.

La velocidad relativa U_{rel} (partícula-fluido) se calcula a partir de:

$$U_{rel} = [(u - u_p)^2 + (v - v_p)^2 + (w - w_p)^2]^{1/2} \quad (4.13)$$

En las ecuaciones anteriores, ecs. (4.7-4.13), las velocidades u , v y w , representan la velocidad instantánea del remolino turbulento que acompaña a cada partícula, es decir:

$$u = \bar{u} + u' \quad (4.14)$$

$$v = \bar{v} + v' \quad (4.15)$$

$$w = \bar{w} + w' \quad (4.16)$$

donde \bar{u} , \bar{v} y \bar{w} , son las velocidades medias que resultan de resolver las ecuaciones de cantidad de movimiento. Las velocidades u' , v' y w' , representan las fluctuaciones de velocidad, las cuales se generan como números aleatorios con distribución de probabilidad normal, con desviación estándar $(\overline{u_i'^2})^{1/2}$, $(\overline{u_2'^2})^{1/2}$ y $(\overline{u_3'^2})^{1/2}$ respectivamente ².

La varianza de las fluctuaciones de velocidad $\overline{u_i'^2}$, se obtienen mediante el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds, el cual se explicó en detalle en el capítulo 3. Utilizar un modelo algebraico de esfuerzos para conocer la varianza de las fluctuaciones de velocidad en cada dirección, permite analizar flujos con turbulencia no isótropa, ésto último constituye una modificación importante al modelo original de Milojevic. En el modelo original, se supone que la turbulencia es isótropa $\overline{u_1'^2} = \overline{u_2'^2} = \overline{u_3'^2}$, por tanto, las fluctuaciones de velocidad u_i' , se calculan como números aleatorios con distribución de probabilidad normal, con desviación estándar:

$$\text{urms}_f = (\overline{u_1'^2})^{1/2} = \left(\frac{2}{3}\kappa\right)^{1/2} \quad (4.17)$$

Al integrar las ecuaciones de movimiento ecs. (4.7-4.9), se obtiene la velocidad instantánea de cada partícula que se encuentra presente en el flujo. Si el tiempo de integración δt (Lagrangiano) es pequeño, y las fuerzas (flotación, arrastre y gravedad) que actúan sobre la partícula se mantienen constantes (durante el intervalo δt), la solución de las ecuaciones Lagrangianas ecs. (4.7-4.9) es la siguiente (Crowe et al., 1977):

$$u_p = u - (u - u_{p0}) \exp\left(-\frac{\delta t}{\tau_p}\right) \quad (4.18)$$

²En este trabajo, se utiliza también la notación en la que el subíndice i , adquiere los valores: $i=1,2,3$, los cuales, representan la dirección de los ejes cartesianos x , y , z , respectivamente.

$$v_p = v - (v - v_{p0}) \exp\left(-\frac{\delta t}{\tau_p}\right) - g\left(1 - \frac{\rho}{\rho_p}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{\delta t}{\tau_p}\right)\right] \tau_p \quad (4.19)$$

$$w_p = w - (w - w_{p0}) \exp\left(-\frac{\delta t}{\tau_p}\right) \quad (4.20)$$

donde: u_{p0} , v_{p0} y w_{p0} , representan la velocidad instantánea de la partícula al inicio del intervalo δt .

La posición de cada partícula a lo largo de su trayectoria, se calcula a partir de las siguientes expresiones:

$$x_p = x_{p0} + \frac{\delta t}{2} (u_p + u_{p0}) \quad (4.21)$$

$$y_p = y_{p0} + \frac{\delta t}{2} (v_p + v_{p0}) \quad (4.22)$$

$$z_p = z_{p0} + \frac{\delta t}{2} (w_p + w_{p0}) \quad (4.23)$$

donde: x_{p0} , y_{p0} y z_{p0} , representan la posición de la partícula al inicio del intervalo δt .

Para resolver las ecuaciones Lagrangianas de movimiento ecs. (4.7-4.9), es necesario definir las condiciones iniciales de las partículas (velocidad media y posición). Debido a que el modelo computacional que se presenta en este trabajo, pretende ser utilizado para simular la dispersión de partículas tóxicas, que se liberan debido a una explosión química (detonación de TNT o de explosivos de alta energía), el modelo incorpora dos métodos para inicializar el tamaño y la forma de la nube explosiva.

En el primer método, se supone que la liberación de partículas tiene forma esférica. En este caso, la posición inicial (x_{p0} , y_{p0} , z_{p0}) de cada partícula, se obtiene mediante la generación tridimensional de números aleatorios con distribución de probabilidad Gaussiana y desviación estándar $\sigma_s = a$, donde a , es el radio de la nube inicial. La forma esférica de la nube, se obtiene al no tomar en cuenta los números aleatorios (se "trunca" la distribución de probabilidad) cuya magnitud es mayor que el radio a . En el segundo método, el tamaño y la forma de la nube explosiva, se obtiene a partir de una relación empírica que se ajusta a datos experimentales, que se obtuvieron durante la detonación controlada de explosivos de alta energía. Los datos se obtuvieron, durante las 22 explosiones controladas que se realizaron en el proyecto Roller Coaster, en el estado de Nevada E. U. A. en 1963 (Church, 1969). La relación empírica que presenta Baskett y Cederwall (Baskett and Cederwall, 1991b), reproduce la forma geométrica de "hongo", característica de una nube que se estabiliza en los instantes posteriores (después de 2 a 3 min) a una detonación a nivel de piso, en condiciones de atmósfera estable. La altura H_t de la nube, después de dos minutos de que ocurrió la detonación, se calcula como (Baskett and Cederwall, 1991b):

$$H_t = 92.6 (M_{TNT})^{1/4} \quad (4.24)$$

donde la altura H_t se obtiene en metros, y M_{TNT} es la masa equivalente de TNT, de la carga explosiva en kg.

La masa equivalente de TNT, de la carga explosiva, se calcula a partir de la siguiente expresión:

$$M_{TNT} = \frac{M_E H_{cE}}{H_{cTNT}} \quad (4.25)$$

donde: M_E es la masa de la carga explosiva [g], H_{cE} es el calor de combustión de la carga explosiva [J/g] y H_{cTNT} es el calor de combustión de la dinamita (TNT)= 5.52×10^3 [J/g].

Una vez que se conoce la altura de la nube explosiva, la forma geométrica tridimensional del "hongo", se obtiene a partir de generar la posición de las partículas, mediante números aleatorios con distribución de probabilidad Gaussiana. En la dirección vertical, se tienen dos curvas Gaussianas, cuyo valor medio se localiza en la posición $y_m = 0.76 H_T$. La distribución Gaussiana que representa la parte superior de la nube, se "trunca" por debajo, en la posición y_m , mientras el límite superior de esta curva se localiza en H_t . La distribución de probabilidad Gaussiana que representa el vástago del "hongo" (parte inferior), se "trunca" por arriba en su valor medio, es decir en la posición y_m , mientras que por debajo se "trunca" en la altura $y = 10$ m. La desviación estándar de éstas dos distribuciones de probabilidad (superior e inferior) son: $\sigma_{yT} = 0.08 H_t - 1$ y $\sigma_{yB} = 0.25 H_t - 3$, respectivamente. La posición de las partículas en los planos horizontales (x, z), se genera mediante números aleatorios con distribución de probabilidad Gaussiana, que tienen la misma desviación estándar tanto en la dirección x como en la dirección z . La desviación estándar de las curvas Gaussianas, también es la misma tanto en la parte superior como en la parte inferior de la nube, es decir:

$$\sigma_{xT} = \sigma_{xB} = \sigma_{zT} = \sigma_{zB} = 0.07 H_T \quad (4.26)$$

Las curvas Gaussianas en las direcciones horizontales x y z , se "truncan" (para formar el radio de la nube) tanto en la parte superior como en la inferior, en la posición:

$$x_{rT} = x_{rB} = z_{rT} = z_{rB} = 0.2 H_T \quad (4.27)$$

Una vez que varios miles de partículas se introducen en el flujo, el modelo calcula de manera individual la trayectoria de cada una de ellas. Sin embargo, debido a que la región en estudio tiene dimensiones finitas, las partículas en su trayectoria, pueden abandonarla. Si una partícula, abandona el campo de flujo a través de cualquiera de las cuatro fronteras laterales o través de la frontera superior (en coordenadas cartesianas, el dominio en estudio se representa por un prisma rectangular), se considera que la partícula se pierde y ya no se calcula más su trayectoria, por otro lado, si la partícula, impacta la superficie inferior (o una frontera sólida), el modelo está en posibilidad de seleccionar cualquiera de las tres condiciones siguientes:

- (a) La partícula es capturada por la superficie sólida. En este caso, se considera que la partícula abandona el campo de flujo.
- (b) La partícula rebota elásticamente al impactar la superficie sólida. En este caso

se considera que la partícula regresa hacia el flujo sin perder energía. El ángulo con respecto a la superficie, y la velocidad que tenía la partícula antes del impacto (al inicio del δt correspondiente), se conservan en magnitud, sin embargo, la velocidad vertical cambia de signo (cuando la superficie de impacto es paralela al plano x, z).

(c) La probabilidad que la partícula se deposite sobre la superficie, es la misma probabilidad que tiene de no permanecer en el flujo. Boughton et al. (Boughton et al., 1987) y Boughton y DeLaurentis (Boughton and DeLaurentis, 1992), presentan un procedimiento estadístico para decidir si la partícula se queda en el flujo, o se deposita en la superficie durante el intervalo de tiempo δt . Por arriba de cierta altura H , la probabilidad que la partícula interaccione con la superficie es despreciable, sin embargo, a una altura $y_{po} < H$, la probabilidad que la partícula se deposite sobre la superficie durante el intervalo δt , se calcula a partir de la densidad de probabilidad que desarrolló Monin (Monin, 1959):

$$P(y_{po}, \delta t) = \frac{v_d}{v_d - v_{po}} \exp\left(\frac{v_{po} y_{po}}{\nu_t}\right) \phi\left[-\left(\frac{y_{po} + v_{po} \delta t}{\sqrt{2\nu_t \delta t}}\right)\right] + \quad (4.28)$$

$$+ \phi\left[-\left(\frac{y_{po} - v_{po} \delta t}{\sqrt{2\nu_t \delta t}}\right)\right] - \frac{2v_d - v_{po}}{v_d - v_{po}} \exp\left[\frac{v_d y_{po}}{\nu_t} + \frac{v_d (v_d - v_{po}) \delta t}{\nu_t}\right] \times$$

$$\times \phi\left[-\left(\frac{y_{po} + (2v_d - v_{po}) \delta t}{\sqrt{2\nu_t \delta t}}\right)\right]$$

donde: v_d es la velocidad de deposición de las partículas (los diversos mecanismos responsables de la remoción de partículas se incluyen en este parámetro), ϕ es la función de distribución normal acumulativa (cumulative normal distribution function), la cual adquiere valores $\phi(-\infty)=0$, $\phi(0)=0.5$ y $\phi(+\infty)=1$. En la ec. (4.28), se considera que la difusividad turbulenta de cantidad de movimiento ν_t , es igual al coeficiente vertical de difusión de masa D_t (originalmente utilizado por Monin (Monin, 1959)), es decir, el número de Schmidt turbulento es igual a la unidad. El algoritmo numérico que toma en cuenta esta condición de frontera es el siguiente: si la posición vertical de la partícula y_{po} , al inicio del intervalo de integración δt es menor que H , se calcula su nueva posición (resolviendo las ecuaciones de movimiento) suponiendo que no existe la frontera sólida. Después de calcular la nueva posición, se evalúa la posibilidad de absorción a partir de la ec. (4.28). Si el valor de $P(y_{po}, \delta t)$ es mayor que un número aleatorio N_a , que se genera con distribución de probabilidad uniforme entre [0-1], la partícula se deposita y se considera que abandona el flujo. Si ocurre lo contrario, es decir, $P(y_{po}, \delta t) < N_a$ la partícula permanece en el flujo y se supone que rebota elásticamente sobre la superficie (se refleja su velocidad y ángulo de incidencia). En el modelo que se presenta en esta tesis, se supone que la altura H , es igual a dos veces el valor de y_p en donde se calcula la ley logarítmica de la pared, ver ecs. (3.76-3.78). Boughton y DeLaurentis (Boughton and DeLaurentis, 1992), escriben la ec. (4.28) como función de una probabilidad de supervivencia $P_s(y)$:

$$P_s(y) = P_s(y) (P_A, P_I) \quad (4.29)$$

donde

$$P_A(y, \delta t; y_{po}) = \beta \sqrt{\frac{\pi \delta t}{\nu_t}} \exp \left[\frac{(y + y_{po} + \beta \delta t)^2}{4\nu_t \delta t} \right] \phi \left[- \left(\frac{y + y_{po} + \beta \delta t}{\sqrt{2\nu_t \delta t}} \right) \right] \quad (4.30)$$

$$P_I(y, \delta t; y_{po}) = \exp \left[- \frac{y y_{po}}{\nu_t \delta t} \right] \quad (4.31)$$

donde $\beta = 2v_d - v_{po}$.

Utilizando la probabilidad de supervivencia $P_s(y)$, ec. (4.29), la condición de frontera se simula mediante el siguiente algoritmo: la partícula se encuentra en la posición $y_{po} < H$ al inicio del intervalo de tiempo δt , al integrar las ecuaciones Lagrangianas de movimiento considerando que no existe la superficie, la partícula se localiza en su nueva posición y . Si $y \geq 0$, la probabilidad de supervivencia se calcula a partir de la siguiente expresión:

$$P_s(y) = 1 - P_I(y, \delta t; y_{po}) P_A(y, \delta t; y_{po}) \quad (4.32)$$

Si la posición de la partícula $y < 0$, la probabilidad de supervivencia es:

$$P_s(y) = \exp \left(- \frac{v_p |y|}{\nu_t} \right) [1 - P_A(|y|, \delta t; y_{po})] \quad (4.33)$$

Si un número aleatorio N_a , generado con una distribución de probabilidad uniforme entre [0-1], es menor que $P_s(y)$, la partícula sobrevive y se considera un rebote elástico. Si $N_a > P_s(y)$, la partícula abandona el flujo.

Boughton y DeLaurentis (Boughton and DeLaurentis, 1992), mencionan que aplicar las reglas de probabilidad condicional ecs. (4.32 y 4.33), es equivalente a utilizar la función de probabilidad de Monin, ec. (4.28). El algoritmo propuesto por Boughton y DeLaurentis, es el que se incluye en el modelo numérico de esta tesis.

4.3 Escala de tiempo y escala de longitud de los remolinos turbulentos

Las escalas características de los remolinos que acompañan a las partículas, se pueden determinar una vez que se conoce: el campo de velocidades y la energía turbulenta del flujo. En el modelo LSD, se supone, que la escala de tiempo de los remolinos τ_L , es proporcional a la escala integral de tiempo Euleriana T_{mE} , es decir:

$$\tau_L = C_T T_{mE} \quad (4.34)$$

donde la escala de tiempo T_{mE} , se obtiene a partir de la intensidad de turbulencia κ y de la disipación de energía ϵ , es decir:

$$T_{mE} = \frac{\kappa}{\epsilon} \quad (4.35)$$

El valor de C_T , como se mencionó anteriormente (ver la página 54), adquiere valores entre 0.3 y 0.6. Avila (Avila, 1994), utilizó el valor optimizado de $C_T = 0.3$ para

reproducir los datos experimentales de Snyder y Lumley (Snyder and Lumley, 1971), relacionados con la dispersión de partículas de vidrio hueco, vidrio sólido, polen de maíz y cobre, en un flujo turbulento cuya energía decae con la longitud.

En el modelo original de Milojevic, la escala Lagrangiana de longitud λ_L de los remolinos turbulentos, se obtiene a partir de:

$$\lambda_L = u_{rms} \tau_L \quad (4.36)$$

donde $u_{rms} = u_{rms_f}$ y se determina mediante la ec. (4.17).

Para flujos con turbulencia no homogénea, anisótropa y no estacionaria, se propone utilizar (como primera aproximación), la siguiente definición de la escala de longitud λ_L :

$$\lambda_L = (\kappa)^{1/2} \tau_L \quad (4.37)$$

El autor de esta tesis, propone que se lleve a cabo trabajo de investigación, tomando en cuenta las siguientes definiciones para las escalas tiempo y longitud de los remolinos turbulentos que interaccionan con las partículas.

$$T_{ii}^f = C_T \frac{L_f}{\sigma_{ii}} \quad (4.38)$$

donde L_f , es la escala integral de longitud Euleriana:

$$L_f = c_\mu \frac{\kappa^{3/2}}{\epsilon} \quad (4.39)$$

y σ_{ii} es la desviación estándar de los esfuerzos normales de Reynolds, es decir:

$$\sigma_{ii} = (\overline{u_i^2})^{1/2} \quad (4.40)$$

De igual manera que se tienen tres escalas Lagrangianas de tiempo para los remolinos, se tendrán tres escalas de longitud determinadas a partir de:

$$L_{ii}^f = (\kappa)^{1/2} T_{ii}^f \quad (4.41)$$

El doble subíndice en las ecuaciones (4.38, 4.40 y 4.41), no indica sumatoria.

4.4 Fracción volumétrica promedio y velocidades medias de la fase dispersa

El modelo numérico que se presenta en este trabajo, resuelven las ecuaciones del fluido en movimiento, en tres dimensiones y en estado transitorio. El campo de flujo se conoce entonces de manera discreta tanto en el espacio como en el tiempo. Cuando el tiempo avanza, la solución espacial se conoce con intervalos de tiempo Δt_i ³. Para

³El subíndice i , se refiere a la i ésima iteración temporal. El tiempo total de la simulación numérica es entonces: $T_T = \sum_{i=1}^{i=N} \Delta t_i$, donde N es el número de incrementos en tiempo.

un determinado Δt_i , las ecuaciones de movimiento de cada partícula se resuelven con pequeños intervalos de tiempo δt_j , de tal manera que la partícula viaja en total, el tiempo Δt_i , es decir:

$$\Delta t_i = \sum_{j=1}^{j=n} \delta t_j \quad (4.42)$$

donde n es el número de pasos de integración que necesita la partícula para viajar el tiempo Δt_i .

Debido a que el flujo transporta a las partículas y la fuerza de gravedad las atrae hacia la superficie terrestre, las partículas a lo largo de su trayectoria cambian continuamente de volumen de control Euleriano (el conjunto de volúmenes de control o celdas numéricas constituye el dominio en estudio). Si la partícula cambia de volumen de control, el procedimiento numérico actualiza las características del remolino que la acompaña (escalas de tiempo y longitud, varianza de las fluctuaciones), de acuerdo a las condiciones locales.

4.4.1 Número de partículas en el interior de un volumen de control

El número de partículas que se encuentran dentro de una celda numérica durante el intervalo de tiempo Δt_i , se calcula a partir de:

$$\left[n_p^{it} \right]_{ijk} = \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} \dot{N}_{isl,kps}^p \delta tin \quad (4.43)$$

donde: ijk identifica a la celda en el dominio tridimensional, it es número de iteración, nsl es el número de puntos en donde se liberan las partículas (number of starting locations), nps es el número de diferentes tamaños de partícula (number of particle size) que se liberan en la posición de "arranque" isl correspondiente, y $(t_2 - t_1) \leq \Delta t$ es el tiempo de residencia de la partícula en el interior del volumen de control.

En la sección anterior se mencionó, que la fuente de las partículas puede tener diferente forma. La fuente se simula mediante varios miles de puntos discretos nsl (generados mediante números aleatorios), en donde se liberan las partículas. Cada punto de la fuente puede liberar a su vez partículas de diferente tamaño nps . Al igual que cada posición de "arranque" se determina a partir de números aleatorios, el diámetro y la densidad de cada partícula, se determinan a partir de números aleatorios con distribución de probabilidad Gaussiana con valor medio (\bar{d}_p) y $(\bar{\rho}_p)$ respectivamente. Estos valores deben de proporcionarse al modelo al igual que las desviaciones estándar σ_{dp} (para el diámetro) y $\sigma_{\rho p}$ (para la densidad).

La expresión $\dot{N}_{isl,kps}^p$ de la ec. (4.48), es muy importante en el modelo ya que establece el número de partículas por unidad de tiempo de tamaño kps , que se liberan en el punto de "arranque" isl .

El valor de $\dot{N}_{isl,kps}^p$, se calcula como función de la masa total M_p , que se libera en forma de partículas. La masa total de la fuentes es:

$$M_p =: \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} f_{isl} g_{isl,kps} M_p \quad (4.44)$$

donde f_{isl} es la fracción de masa (con respecto a la masa total M_p) que se libera en la posición de "arranque" isl , es decir:

$$f_{isl} = \frac{(mass)_{isl}}{M_p} \quad (4.45)$$

y $g_{isl,kps}$, es la fracción de masa (con respecto a la masa $(mass)_{isl}$) que se libera por cada tamaño de partícula:

$$g_{isl,kps} = \frac{(mass)_{isl,kps}}{(mass)_{isl}} \quad (4.46)$$

El término

$$(mass)_{isl,kps} = f_{isl} g_{isl,kps} M_p \quad (4.47)$$

representa la masa que se libera en la posición isl , con el tamaño de partícula kps .

Si la ecuación (4.47) se divide entre la masa $m_p (isl, kps)$ (masa de la partícula que se libera en la posición isl , con el tamaño kps), se obtiene el número de partículas que transportan la masa $(mass)_{isl,kps}$, es decir:

$$N_{isl,kps}^p = \frac{(mass)_{isl,kps}}{m_p (isl, kps)} \quad (4.48)$$

Se mencionó con anterioridad, que es posible calcular tanto fuentes instantáneas como fuentes continuas. Si la fuente es instantánea, la posición de cada partícula en la nube inicial se genera una sola vez, mientras que si la liberación es continua pero finita, el número de nubes iniciales generadas (puffs generation), corresponde al número de pasos de integración Δt_i que dura la liberación.

En el modelo numérico que se presenta en este trabajo, la conservación de masa de la fase dispersa, se satisface a partir de mantener constante el número de partículas que se introducen en el flujo (a menos que abandonen el flujo a través de cualquiera de las fronteras del dominio). Esto significa que después de cada intervalo de tiempo Δt_i , el número de partículas que se encuentran en el flujo debe ser igual al número de partículas liberadas por la fuente. De manera general, puede decirse entonces, que durante el transcurso de la simulación, el número de partículas presentes al final del intervalo Δt_i debe ser igual al número de partículas que se tienen al término del intervalo de tiempo anterior, Δt_{i-1} .

Si se define el flujo de partículas que se libera en la posición isl, kps como:

$$\dot{N}_{isl,kps}^p = \frac{N_{isl,kps}^p}{\Delta t_i} \quad (4.49)$$

el número total de partículas que transporta la masa total de la fuente, puede obtenerse a partir de:

$$N_p^o = N_p^{it} = \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{t=0}^{t=\Delta t_i} \dot{N}_{isl,kps}^p \delta t_i \quad (4.50)$$

donde el superíndice o , significa en la posición inicial (nube inicial).

Si la ec. (4.49) se sustituye en la ec. (4.50) y teniendo en cuenta que, $\sum_{t=0}^{t=\Delta t_i} \delta t_i = \Delta t_i$, se tiene:

$$N_p^o = N_p^{it} = \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} N_{isl,kps}^p \Delta t_i \quad (4.51)$$

Las definiciones anteriores permiten calcular los valores medios de la fase dispersa, representados en un marco de referencia Euleriano (en cada volumen de control).

La fracción volumétrica que ocupan las partículas en la celda numérica durante el intervalo Δt_i , se representa mediante:

$$[\alpha_p^{it}]_{ijk} = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} \frac{m_p(isl, kps)}{\rho_p(isl, kps)} \dot{N}_{isl,kps}^p \delta tin \quad (4.52)$$

donde: $\Delta x \Delta y \Delta z$ es el volumen de la celda numérica y $\rho_p(isl, kps)$ es la densidad de la partícula que se libera en la posición isl y con tamaño kps .

La velocidad media que tienen las partículas en el interior del volumen de control durante el intervalo Δt_i , se obtienen a partir de las siguientes expresiones:

En la dirección x:

$$[U_p^{it}]_{ijk} = \frac{1}{[n_p^{it}]_{ijk}} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} u_p(isl, kps) \dot{N}_{isl,kps}^p \delta tin \quad (4.53)$$

En la dirección y:

$$[V_p^{it}]_{ijk} = \frac{1}{[n_p^{it}]_{ijk}} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} v_p(isl, kps) \dot{N}_{isl,kps}^p \delta tin \quad (4.54)$$

En la dirección z:

$$[W_p^{it}]_{ijk} = \frac{1}{[n_p^{it}]_{ijk}} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} w_p(isl, kps) \dot{N}_{isl,kps}^p \delta tin \quad (4.55)$$

4.5 Energía cinética turbulenta de la fase dispersa

La intensidad de turbulencia de la fase dispersa, se define como:

$$\kappa_p = \frac{1}{2} [\overline{u_p' u_p'} + \overline{v_p' v_p'} + \overline{w_p' w_p'}] = \frac{1}{2} [\overline{u_p' u_p' + v_p' v_p' + w_p' w_p'}] \quad (4.56)$$

donde los términos dentro del paréntesis cuadrado, representan las varianzas de las fluctuaciones de velocidad de las partículas.

La descomposición de Reynolds para las velocidades de las partículas es:

$$u'_{ip} = u_{ip} - U_{ip} \quad (4.57)$$

donde u'_{ip} es la fluctuación de velocidad en la dirección i . Sustituyendo la ec. (4.57) en la ec. (4.56) y realizando un promedio en el tiempo, se obtiene:

$$\kappa_p = \frac{1}{2} \overline{[u_p u_p + v_p v_p + w_p w_p]} - \frac{1}{2} [U_p^2 + V_p^2 + W_p^2] \quad (4.58)$$

El primer término del lado derecho de la ec. (4.58), es el valor promedio de la suma del cuadrado de las velocidades instantáneas de las partículas. Esta cantidad se puede evaluar en el interior de cada celda numérica, utilizando el siguiente promedio estadístico de grupo (ensemble average):

$$\overline{[u_p u_p + v_p v_p + w_p w_p]}_{ijk}^{it} = \frac{1}{[n_p^{it}]_{ijk}} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} (u_p^2(isl, kps) + v_p^2(isl, kps) + w_p^2(isl, kps)) \dot{N}_{isl, kps}^p \delta_{tin} \quad (4.59)$$

Sustituyendo la ec. (4.59) y las ecs. (4.53-4.55) en la ec. (4.58), se obtiene la energía cinética turbulenta de la fase dispersa en el interior de un volumen de control, es decir:

$$\begin{aligned} [\kappa_p^{it}]_{ijk} &= \frac{1}{2} \frac{1}{[n_p^{it}]_{ijk}} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} \\ & \left[(u_p^2(isl, kps) + v_p^2(isl, kps) + w_p^2(isl, kps)) \dot{N}_{isl, kps}^p \delta_{tin} \right] - \\ & - \frac{1}{2} \left[[U_p^{it}]_{ijk}^2 + [V_p^{it}]_{ijk}^2 + [W_p^{it}]_{ijk}^2 \right] \end{aligned} \quad (4.60)$$

4.6 Términos fuente de interacción entre la fase continua y la fase dispersa

4.6.1 Términos fuente de cantidad de movimiento

En el interior de un volumen de control, regularmente existe una velocidad relativa entre el fluido y la partícula (debido a los efectos de inercia y efectos de trayectoria cruzada), si la concentración de partículas es grande o si la velocidad relativa no es despreciable, las partículas que se desplazan en el interior de una celda numérica, pueden alterar las características medias y turbulentas de la fase continua (acoplamiento en dos sentidos). En un proceso de difusión atmosférica convencional, la influencia de las partículas sobre el flujo es despreciable. Sin embargo, si la liberación de materia es muy grande o si la energía cinética de las partículas también es grande (por ejemplo, liberación de ceniza

volcánica), en la vecindad de la fuente lo más seguro es que las partículas modifiquen sustancialmente las propiedades del flujo. En estos casos, es conveniente tomar en cuenta las fuerzas de interacción entre las fases. Si se considera únicamente la fuerza de arrastre debido a la presencia de velocidades relativas, la fase continua recibe la influencia de las partículas a partir de términos fuente promedio que se incluyen en las ecuaciones de cantidad de movimiento del fluido (ver ecs. (2.3-2.5)).

La fuerza de arrastre (fricción), que se presenta debido a la diferencia de velocidades entre una partícula y el volumen de fluido que la rodea, se parametriza mediante la siguiente relación:

$$F_{if} = 3\pi\mu d_p f(u_{ip} - u_i) \quad (4.61)$$

Si se lleva a cabo un promedio estadístico de grupo, tomando en cuenta a las partículas que se encuentran en el interior de un volumen de control, en el intervalo Δt , la fuerza promedio por unidad de volumen que representa la influencia de la fase dispersa sobre la fase continua, se calcula mediante las siguientes relaciones:

$$[\overline{S_{pz}^{it}}]_{ijk} = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} 3\pi\mu d_p f(u_p(isl, kps) - u) \dot{N}_{isl, kps}^p \delta_{tin} \quad (4.62)$$

$$[\overline{S_{py}^{it}}]_{ijk} = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} 3\pi\mu d_p f(v_p(isl, kps) - v) \dot{N}_{isl, kps}^p \delta_{tin} \quad (4.63)$$

$$[\overline{S_{pz}^{it}}]_{ijk} = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} 3\pi\mu d_p f(w_p(isl, kps) - w) \dot{N}_{isl, kps}^p \delta_{tin} \quad (4.64)$$

Los valores de u , v y w de las ecuaciones (4.62-4.64) pueden escribirse como $u(isl, kps)$, $v(isl, kps)$, $w(isl, kps)$ respectivamente, y representan las velocidades instantáneas de los elementos de fluido, que interactúan con las partículas a lo largo de su trayectoria.

4.6.2 Término fuente de intensidad de turbulencia

Al incluir en las ecuaciones de cantidad de movimiento de la fase continua (ecs. (2.3-2.5)) los términos fuente promedio de interacción viscosa entre las fases $\overline{S_{pi}}$ (ecs. (4.62-4.64)), la ecuación de la energía cinética turbulenta (la cual se obtiene a partir de las ecuaciones de cantidad de movimiento), necesariamente debe de incluir un término que promueve (o disminuye) la intensidad turbulenta debido a las fuerzas de fricción.

Si el término fuente de interacción viscosa se descompone como (descomposición de Reynolds):

$$S_{pi} = \overline{S_{pi}} + S'_{pi} \quad (4.65)$$

donde: S_{pi} es el término fuente instantáneo (debido a las velocidades instantáneas relativas), S'_{pi} es la fluctuación del término fuente (debido a las fluctuaciones de velocidad

relativas) y \bar{S}_{pi} es el término fuente promedio (debido a las velocidades medias relativas, ecs. (4.62-4.64).

Si se sustituye la ec. (4.65) en las ecuaciones de Navier-Stokes, y se realiza el procedimiento para obtener la ecuación de la energía cinética turbulenta, se obtiene el término:

$$\bar{S}_{p\kappa} = \overline{u'S'_{px}} + \overline{v'S'_{py}} + \overline{w'S'_{pz}} = \overline{u'_i S'_{pi}} \quad (4.66)$$

Utilizando la descomposición de Reynolds para las velocidades del fluido u_i y para los términos fuente S_{pi} , la ec. (4.66) se escribe como:

$$\bar{S}_{p\kappa} = \overline{u'_i S'_{pi}} = \overline{(u_i - \bar{u}_i) (S_{pi} - \bar{S}_{pi})} = \overline{u_i S_{pi}} - \bar{u}_i \bar{S}_{pi} \quad (4.67)$$

El segundo término del lado derecho de la ec. (4.67), se conoce completamente ya que \bar{u}_i , son las velocidades medias del fluido dentro del volumen de control y \bar{S}_{pi} son los términos fuente de interacción viscosa, los cuales se calculan a partir de las ecs. (4.62-4.64). El término $\overline{u_i S_{pi}}$, representa el promedio del producto de la velocidad instantánea del fluido, por la fuerza de fricción instantánea (por unidad de volumen). Si se obtiene el promedio de grupo en el interior de cada celda numérica, éste término tiene la siguiente forma (para cada dirección):

$$\left[\overline{u S_{pz}^{it}} \right]_{ijk} = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} 3\pi\mu d_p f (u_p(isl, kps) - u) u \dot{N}_{isl, kps}^p \delta_{tin} \quad (4.68)$$

$$\left[\overline{v S_{py}^{it}} \right]_{ijk} = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} 3\pi\mu d_p f (v_p(isl, kps) - v) v \dot{N}_{isl, kps}^p \delta_{tin} \quad (4.69)$$

$$\left[\overline{w S_{pz}^{it}} \right]_{ijk} = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \sum_{isl=1}^{isl=nsl} \sum_{kps=1}^{kps=nps} \sum_{tin=t_1}^{tin=t_2} 3\pi\mu d_p f (w_p(isl, kps) - w) w \dot{N}_{isl, kps}^p \delta_{tin} \quad (4.70)$$

El término fuente promedio para la energía cinética turbulenta en cada celda numérica $\left[\bar{S}_{p\kappa}^{it} \right]_{ijk}$, se obtiene al sustituir las ecs. (4.62-4.64) y ecs. (4.68-4.70) en la ecuación (4.67).

4.6.3 Término fuente de disipación de energía turbulenta

Las ecuaciones de transporte de ϵ ecs. (2.50 y 2.52), incluyen el término fuente de interacción entre las fases $\bar{S}_{p\epsilon}$. Para definir este término, es conveniente hacer notar que en el modelo de turbulencia κ - ϵ , el término de producción de disipación, se parametriza mediante expresiones de la forma (ver ecs. (2.50 y 2.52):

$$P_\epsilon = C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{\kappa} P_\kappa \quad (4.71)$$

donde P_κ es el término de producción de energía turbulenta debido al cortante medio. De manera análoga, Milojevic (Milojevic, 1985) define el término fuente de interacción entre las fases $\overline{S}_{p\epsilon}$ a partir de la siguiente expresión:

$$\overline{S}_{p\epsilon} = C_3 \frac{\epsilon}{\kappa} \overline{S}_{p\kappa} \quad (4.72)$$

donde $C_3=0.7$.

Utilizando la nomenclatura que representa el promedio en conjunto, la ec. (4.72), se escribe:

$$[\overline{S}_{p\epsilon}^{it}]_{ijk} = C_3 \left[\frac{\epsilon}{\kappa} \right]_{ijk}^{it} [\overline{S}_{p\kappa}^{it}]_{ijk} \quad (4.73)$$

En este capítulo, se han presentado las características generales del modelo LSD (modificado), el cual puede ser utilizado para simular la dispersión de partículas sólidas en la atmósfera.

Se mencionó en párrafos anteriores (ver página (51)), que el modelo LSD original, ha sido previamente utilizado por el autor de manera satisfactoria, para simular flujos con partículas en suspensión a escala laboratorio.

El modelo numérico desarrollado durante el presente trabajo, tiene características que lo hacen único en relación a la múltiple variedad de programas de cómputo que existen en la actualidad, los cuales la mayoría de las veces se limitan, ya sea a determinar la difusión turbulenta de un gas pasivo a partir de leyes Gaussianas, o a simular la difusión turbulenta de elementos de fluido a partir de procesos de Monte Carlo o de modelos Markovianos de primer orden.

Si el tiempo de respuesta aerodinámico de las partículas ec. (4.10), se hace infinitamente pequeño $\tau_p \rightarrow 0$ (efecto de inercia despreciable) y si las partículas no están sujetas a la aceleración de la gravedad (efecto de trayectorias cruzadas despreciable), el modelo de dispersión LSD se comporta como un modelo Markoviano de orden cero (método de Monte Carlo).

Con la discusión que se presenta en este capítulo, es fácil identificar algunas áreas de investigación que el autor sugiere se lleven a cabo en un futuro cercano. Esta investigación puede realizarse sin dificultad tomando como base el modelo híbrido Euleriano-Lagrangiano **ATFLOW-LSD**, que se presenta en esta tesis. Algunos de los temas que se sugiere desarrollar son los siguientes:

.-En el modelo LSD, se generan las fluctuaciones de velocidad de los remolinos turbulentos, como números aleatorios independientes, se propone que se incorpore un modelo de cadenas de Markov para que las fluctuaciones de velocidad que se generan, tengan al menos un paso de "memoria".

.-En el modelo LSD, el coeficiente de correlación Lagrangiana del remolino que se encuentra en contacto con la partícula, tiene forma cuadrada es decir:

$$R_{ii}^f(\tau) = 1, \quad \tau \leq T_L \quad (4.74)$$

y

$$R_{ii}^f(\tau) = 0, \quad \tau > T_L \quad (4.75)$$

Se propone que se incorporen en el modelo, diferentes formas del coeficiente de correlación Lagrangiana, como son las formas: "triangular", "Gaussiana" y "exponencial" (Pasquill, 1974) y estudiar la influencia de éstos coeficientes sobre las características turbulentas de la fase dispersa.

.-En el modelo LSD, únicamente se obtienen promedios estadísticos de grupo, los cuales se llevan a cabo en un volumen de control. Esto conduce a obtener propiedades promedio de la fase dispersa desde un punto de vista Euleriano. Se propone realizar promedios estadísticos a lo largo de la trayectoria de las partículas, de tal manera que se logre recuperar información estadística que sirva para determinar, tanto el coeficiente de correlación Lagrangiano de las partículas, como el coeficiente de correlación Lagrangiano de los elementos de fluido que interaccionan con la fase dispersa. Este último punto es de mucha importancia, ya que a partir de un procedimiento numérico, es posible verificar las diversas propuestas que se han hecho en la literatura para determinar el coeficiente de correlación Lagrangiano de las partículas desde un punto teórico (Yudine, 1959), (Csanady, 1963), (Wang and Stock, 1993), (Reeks, 1977), (Pismen and Nir, 1978).

Capítulo 5

Método de solución de las ecuaciones de la fase continua

5.1 Forma general de las ecuaciones

Las ecuaciones que rigen el comportamiento del aire de la atmósfera ecs. (2.2, 2.3-2.5, 2.41, 2.47 ó 2.49 y 2.50 ó 2.52), se resuelven mediante el método numérico de los volúmenes de control descrito en detalle por Patankar (Patankar, 1975), (Patankar, 1980), Careto et al. (Careto et al., 1972), Gosman e Ideriah (Gosman and Ideriah, 1976), Wittig et al. (Wittig et al., 1983) y Spalding (Spalding, 1977). Si la variable dependiente de cada una de las ecuaciones se define por la variable ϕ , es posible escribir la siguiente ecuación general:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_I + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \phi)}_{II} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right)}_{III} + \underbrace{S_\phi}_{IV} \quad (5.1)$$

donde ϕ representa las variables dependientes: \bar{u} , \bar{v} , \bar{w} , $\bar{\theta}$, κ y ϵ . En la ecuación (5.1), es fácil identificar los términos temporal (*I*), advectivo (*II*), difusivo (*III*) y el término fuente (*IV*). Si $\phi=1$ y el término difusivo y el término fuente son cero, la ec. (5.1), representa a la ecuación de continuidad.

5.2 Integración de las ecuaciones en los volúmenes de control

El método numérico de los volúmenes de control, divide la región de estudio, en volúmenes finitos que no se traslapan entre sí y que contienen en su interior un sólo punto de la malla utilizada para discretizar el dominio. Las ecuaciones diferenciales se integran en cada volumen de control, de tal manera que el principio de conservación de la variable ϕ se satisface de manera discreta, es decir:

$$\int_w^e \int_s^n \int_b^t \int_\tau^{\tau+\Delta\tau} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) d\tau dz dy dx + \int_\tau^{\tau+\Delta\tau} \int_w^e \int_s^n \int_b^t \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \phi) dz dy dx d\tau = \quad (5.2)$$

$$= \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \int_w^e \int_s^n \int_b^t \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dz dy dx d\tau + \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \int_w^e \int_s^n \int_b^t S_{\phi} dz dy dx d\tau$$

donde los límites de integración corresponden a las fronteras del volumen de control en las direcciones x , y , z . El intervalo de tiempo $\Delta\tau$ que aparece en las integrales de la ec. (5.2), es equivalente al incremento Euleriano Δt mencionado en los capítulos anteriores.

Si el principio de conservación de la variable ϕ se satisface en cada volumen de control (ec. (5.2)), se garantiza que se satisface el criterio de conservación de manera integral en toda la región de estudio. El método numérico de los volúmenes finitos de control, genera un sistema de ecuaciones algebraicas lineales (ecuaciones discretas), que satisface el principio de conservación en todo el dominio, sin importar el número de volúmenes que representan el campo de flujo.

5.3 Función de variación de la variable general ϕ

Las ecuaciones diferenciales de cada volumen de control, se integran una vez que se define la función de variación de ϕ entre puntos vecinos de la malla numérica. El término difusivo (*III*), se integra tomando en cuenta que la variable ϕ varía linealmente. En el programa de cómputo **ATFLOW** se considera lo siguiente: (a) el coeficiente de difusión Γ_{ϕ} , varía linealmente entre puntos vecinos, (b) la frontera de cada volumen, se localiza a la mitad de la distancia entre dos puntos vecinos. Estas dos condiciones implican que el coeficiente de difusión Γ_{ϕ} , en la frontera del volumen, es la media aritmética de los coeficientes Γ_{ϕ} de los dos nodos vecinos.

Si las ecuaciones del fluido, se expresan en la forma de la ecuación general ec. (5.1), resultan términos que no pueden ser incluidos en los términos temporal, advectivo y difusivo. Estos términos se incorporan en el término fuente, el cual se formula por la siguiente expresión lineal (Patankar, 1980):

$$S_{\phi} = S_c + S_P \phi_P \quad (5.3)$$

La integral del término fuente se lleva a cabo suponiendo que la variable ϕ_P de la ec. (5.3), permanece constante en todo el volumen de control, es decir la variación de ϕ entre volúmenes de control vecinos, tiene forma de "escalón" ("step wise profile").

5.4 Método implícito para integrar el término temporal y método híbrido para integrar el término advectivo

Las ecuaciones de conservación se integran en el tiempo (desde τ hasta $\tau + \Delta\tau$), utilizando un procedimiento implícito ("fully implicit scheme"). En el esquema implícito la variable ϕ en el tiempo τ , es decir: $\phi(\tau)$, cambia de manera súbita al valor de $\phi(\tau + \Delta\tau)$, y permanece con este valor durante todo el intervalo $\Delta\tau$.

El término advectivo de la ecuación general (5.1), se integra utilizando un esquema híbrido el cual define la variación de ϕ entre nodos vecinos. En el esquema híbrido, la variable dependiente ϕ en la frontera de cada volumen de control, se define como función del número de Peclet (evaluado sobre la frontera):

$$(Pe)_{bound} = \frac{(\rho \bar{u}_i)_{bound} \Delta x_i}{(\Gamma_\phi)_{bound}} \quad (5.4)$$

donde el subíndice *bound* significa que las cantidades se evalúan en las fronteras del volumen, Δx_i representa la distancia entre nodos vecinos en cualquiera de las direcciones $i=1, 2, 3$. Si el número de Peclet se encuentra en el rango $-2 \leq Pe \leq 2$, **ATFLOW** utiliza un esquema de diferencias finitas centradas (la variación de ϕ entre nodos vecinos es lineal). Si el número de Peclet está fuera de este intervalo, se utiliza el esquema "upwind", el cual considera que la variable ϕ en la frontera del volumen, adquiere el valor correspondiente al nodo que se encuentra en la posición "corriente arriba".

5.5 Método iterativo para coeficientes y términos fuente no lineales

En las ecuaciones del fluido en movimiento, el coeficiente del términos difusivo Γ_ϕ y el coeficiente del término advectivo ρu_i , por lo regular dependen de la variable ϕ , y además, por lo general el término fuente S_ϕ es una función no lineal. Esta condición de no linealidad se resuelve mediante un proceso iterativo. En el caso particular de la ecuación de la energía térmica (si el campo de velocidades está definido), el proceso iterativo involucra los siguientes pasos: (a) Se proponen valores estimados de las temperaturas para cada punto de la malla, (b) se integran las ecuaciones (5.2) para cada volumen de control, con el objeto de generar el sistema de ecuaciones algebraicas lineales, (c) se resuelve el sistema $Ax = b$, y se obtienen los nuevos valores del campo de temperaturas, (d) con éstos valores de temperatura, considerados como una mejor estimación de los valores propuestos, se reinicia el paso (b) y se repite el proceso hasta que en las siguientes iteraciones, el valor de las temperaturas no cambia significativamente.

5.6 Mallas numéricas escalonadas (staggered grids)

En **ATFLOW** se utilizan cuatro mallas numéricas escalonadas (staggered grids), tres mallas diferentes para las velocidades \bar{u} , \bar{v} y \bar{w} , y una malla adicional (malla principal) para las variables escalares: presión p , temperatura potencial $\bar{\theta}$ energía cinética turbulenta κ y disipación de energía ϵ . La razón de utilizar mallas diferentes para cada variable dependiente ϕ se explica en detalle en la referencia (Patankar, 1980). Si las ecuaciones de cantidad de movimiento, ecs. (2.3-2.5), se formulan de acuerdo a la ecuación general ec. (5.1), es claro observar que el gradiente de la presión debe incluirse en el término fuente. Uno de los beneficios de utilizar mallas escalonadas, es que la diferencia de presiones entre dos puntos de la malla numérica, es la fuerza que motiva la velocidad del fluido en un punto localizado entre los dos nodos. Si se conocen

las presiones de los nodos de la malla, el gradiente de presiones puede formularse como un término independiente del término fuente.

5.7 Algoritmo SIMPLE

El campo de presiones, en el modelo matemático de esta tesis, no puede evaluarse de manera directa, ya que no se incluye una ecuación que sirva para tal propósito. Las presiones se calculan indirectamente, a través de la ecuación de continuidad tomando en cuenta el siguiente criterio:

Si el campo de presiones que se incorpora en la solución de las ecuaciones de cantidad de movimiento es el "correcto"; el campo de velocidades resultante satisface la ecuación de continuidad.

El procedimiento iterativo mencionado en la sección (5.5), también se utiliza en la solución de las ecuaciones de cantidad de movimiento, sin embargo, para dar inicio al proceso de solución, es necesario contar; ya sea con el campo de presiones "correcto" p o proponer un campo cualquiera p^* . Si el campo de presiones no es el llamado "correcto", las velocidades u_i^* que resultan de integrar las ecuaciones de cantidad de movimiento, no satisfacen la ecuación de continuidad. Para obtener durante el proceso iterativo la solución correcta del campo de velocidades u_i y de presiones p , en **ATFLOW** se ha incorporado el algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations), descrito en detalle por Patankar (Patankar, 1980) y Careto et al. (Careto et al., 1972).

Utilizando el algoritmo SIMPLE, la presión "correcta" p , se obtiene como la suma del campo de presiones propuesto p^* más una corrección de presión p' . Si la presión se altera por la corrección p' , las velocidades u_i^* , deben responder a este cambio de presión, y modificarse por la cantidad u_i' , es decir las velocidades que satisfacen la ecuación de continuidad son: $u_i = u_i^* + u_i'$ ¹.

En el método SIMPLE, las correcciones de velocidad u_i' dependen de las correcciones de presión p' de los nodos vecinos² y son independientes de las correcciones de velocidad de las celdas vecinas (esta es la razón del nombre Semi-Implicit). Las correcciones de velocidad u_i' se calculan como:

$$u'_{ip} = F(p'_{p-1} - p'_p) \quad (5.5)$$

donde los subíndices p y $p - 1$, representan los nodos vecinos. La forma de la función F , puede consultarse en Patankar (Patankar, 1980) y Careto et al. (Careto et al., 1972).

Al utilizar el algoritmo SIMPLE, la ecuación de continuidad se transforma en una ecuación cuya variable dependiente es la corrección de presión p' . Cuando se resuelve

¹En la definición de las correcciones de velocidad y presión, se ha utilizado la nomenclatura de Patankar (Patankar, 1980), no se debe confundir con las fluctuaciones turbulentas de velocidad y presión.

²La presión se calcula en la malla principal, y las velocidades se evalúan en la frontera de los volúmenes de control de las presiones, es decir, cada velocidad u_i tiene dos nodos vecinos en donde se conoce la presión (mallas escalonadas).

esta ecuación, se obtienen las presiones que corrigen la presión propuesta p^* . Durante el proceso iterativo, las presiones corregidas se utilizan para dar inicio a otra iteración.

Los pasos importantes del algoritmo SIMPLE, que se incluye en el modelo **ATFLOW-LSD**, son los siguientes:

- 1.-Se supone que se conoce un campo de presiones p^* .
- 2.-Se resuelven las ecuaciones de cantidad de movimiento para obtener u^* , v^* , w^* . Si el número de intervalos de tiempo que han transcurrido en la simulación $n\Delta t$, es menor que un valor previamente determinado, las ecuaciones se resuelven aproximando las correlaciones de velocidad $\overline{u'_i u'_j}$ con un modelo de turbulencia de dos ecuaciones $\kappa - \epsilon$. Si el número de intervalo de tiempo es mayor que el valor previamente establecido, se utilizan las correlaciones de velocidad calculadas con el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds.
- 3.-Se resuelve la ecuación de continuidad con la variable dependiente p' .
- 4.-Se corrige la presión a partir de la relación: $p = p^* + p'$.
- 5.-Se corrigen las velocidades u , v , w , a partir de la relación: $u_i = u_i^* + F(p'_{p-1} - p'_p)$.
- 6.-Se calculan las variables escalares $\bar{\theta}$, κ , ϵ .
- 7.-Se calculan los esfuerzos de Reynolds y las correlaciones $\overline{u'_i \theta'}$.
- 8.-Si el número de iteraciones corresponde a un parámetro definido previamente, antes de alcanzar convergencia en la solución de las ecuaciones, se calcula la trayectoria de las partículas y los términos fuente de interacción entre las fases.
- 9.-La presión corregida p , se toma como la presión propuesta p^* , se regresa al paso 2, y se repite el procedimiento hasta alcanzar convergencia.
- 10.-Una vez que se alcanza convergencia, se calcula la trayectoria final de las partículas, los términos fuente de interacción, los esfuerzos de Reynolds y las correlaciones $\overline{u'_i \theta'}$.
- 11.-Se incrementa el intervalo de tiempo $(n + 1) \Delta t$.
- 12.-La presión p , se toma como la presión propuesta para el intervalo de tiempo $(n + 1) \Delta t$, se regresa al paso 2 y el procedimiento numérico continúa hasta calcular el número total de intervalos de tiempo $N\Delta t$, que se requieren en la simulación.

5.8 Solución de las ecuaciones algebraicas lineales

El sistema de ecuaciones algebraicas lineales, que resulta de integrar las ecuaciones en volúmenes discretos, se resuelve con el proceso iterativo conocido como: "método de línea por línea" (line by line method), descrito en detalle por Patankar (Patankar, 1980) y Gosman e Ideriah (Gosman and Ideriah, 1976). El método de línea por línea (LBL); es una combinación del método directo para problemas unidimensionales TDMA (TriDiagonal-Matrix Algorithm) o algoritmo de Thomas y el método iterativo de Gauss-Seidel.

En un problema tridimensional, el método LBL, calcula cada variable dependiente ϕ_{new} que se encuentra a lo largo de la línea $N-S$ (eje y) de la malla numérica, a partir de los valores previos ϕ_{old} , de los nodos vecinos localizados a lo largo de la línea $E-W$, eje x y de la línea $T-B$, eje z .

El sistema de ecuaciones a lo largo de la línea $N-S$ se reduce a un sistema tridiagonal, en donde las incógnitas ϕ_N , ϕ_P , y ϕ_S , se obtienen mediante el algoritmo TDMA. Este

procedimiento se lleva a cabo en todas las líneas $N-S$, de la malla numérica, de tal manera que en todos los nodos se actualiza su valor.

El método LBL, transmite la información desde la frontera de la línea, hasta el interior del dominio, sin importar el número de nodos en la línea. En el programa **ATFLOW**, el algoritmo LBL, se aplica únicamente a lo largo de las líneas $N-S$, sin embargo, la malla tridimensional es "barrida" (swept) varias veces, antes de considerar que se tiene una solución satisfactoria de los valores de ϕ .

Debido a que el algoritmo LBL, es convencional y se puede consultar en la literatura, no se presentan las expresiones que conducen a la obtención de los valores de ϕ .

Capítulo 6

Presentación de resultados obtenidos con el modelo ATFLOW-LSD

En los capítulos anteriores, se presentaron los fundamentos teóricos del modelo matemático-computacional de pronóstico **ATFLOW-LSD**, el cual es capaz de predecir la dispersión de partículas sólidas en flujos atmosféricos. Como se mencionó en el capítulo de introducción, los modelos de pronóstico acoplados con un modelo de dispersión de partículas, representan sistemas de cómputo tan complicados que requieren, para su uso, de la participación directa de la persona que los ha desarrollado.

Para tener la seguridad de que un modelo tan complejo ofrece resultados satisfactorios; es necesario verificar cada una de sus componentes. Durante el desarrollo del modelo computacional que se presenta en este trabajo, se han realizado diversos trabajos de investigación, a partir de los cuales se ha podido comprobar que se cuenta, no sólo con un modelo de cómputo que permite resolver las ecuaciones que se formularon en los capítulos anteriores, sino que también, se cuenta con un modelo que es la base de futuros desarrollos teóricos.

La simulación numérica de la difusión de calor que se presenta en un depósito de desechos radioactivos, permitió verificar el comportamiento del modelo computacional, en lo que respecta a los términos temporal y difusivo de la ecuación de la energía ec. (2.41). La solución numérica tridimensional y en estado transitorio se comparó con la solución analítica del problema no lineal, uni-dimensional, que obtuvo Estrada-Gasca (Estrada-Gasca, 1986). Los resultados que se obtienen con el modelo, y su comparación con la solución analítica, se reportan en las siguientes referencias: (Avila et al., 1994) y (Avila et al., 1997).

La formulación del término convectivo y del término temporal de las ecuaciones de cantidad de movimiento y de la ecuación de la energía; se verificó al estudiar la convección natural de un fluido que se encuentra en el interior de una cavidad rectangular. La solución en estado transitorio, se obtuvo en dos dimensiones, tomando en cuenta que una de las caras laterales de la cavidad, se calienta con un flujo de calor que permanece constante en el tiempo. Los campos de velocidad y de temperatura que se obtuvieron en la simulación, se compararon; cuantitativamente con los resultados de un

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

programa de cómputo comercial y cualitativamente con observaciones experimentales. Los resultados del modelo los reporta Paulo (Paulo, 1995).

El estudio de la dispersión tridimensional en estado transitorio, de una nube de gas que se libera a través de una chimenea, fue de gran utilidad para verificar la simetría de los campos de velocidad y temperatura del aire atmosférico, y de la concentración de la nube de gas liberada ¹. Este caso de estudio, sirvió también para comprobar la capacidad del modelo para simular geometrías en donde la superficie terrestre no es homogénea. En este caso, la chimenea se ubica en la parte superior de un edificio. Ambas geometrías se modelaron mediante la técnica del "bloqueo de celdas", descrita en detalle por Patankar (Patankar, 1980). La concentración de la nube de gas liberada a través de la chimenea, se comparó, para tres condiciones diferentes, con curvas experimentales que aparecen publicadas en la literatura. Las tres condiciones que se analizaron son: $T_g > T_a$, $T_g = T_a$, $T_g < T_a$, donde: T_g es la temperatura del gas a la salida de la chimenea y T_a es la temperatura del aire atmosférico. Los resultados de este trabajo se reportan en la referencia (Avila et al., 1996).

El modelo que se presenta en este trabajo, ha sido utilizado también para calcular la dispersión turbulenta de burbujas de aire, que se introducen en una corriente de agua. En este caso, el líquido (al igual que las burbujas), se encuentra sujeto a la aceleración de la gravedad, ya que el canal que lo contiene, se encuentra inclinado. En el análisis de la dispersión turbulenta del flujo bifásico, es de interés determinar el tiempo de residencia de las burbujas de aire una vez que se introducen en la corriente de agua. El propósito de este estudio, es el de establecer los fundamentos teóricos de la dispersión de burbujas en flujos con superficie libre. Estudios de este tipo, pueden ser utilizados para determinar el número de aereadores necesarios en el vertedor de una presa hidráulica. El análisis del flujo de agua con burbujas de aire, fue abordado desde un punto de vista Euleriano-Lagrangiano por Rocendo (Rocendo, 1997), y en un marco de referencia puramente Euleriano por García (García, 1997).

La estructura general del programa de cómputo **ATFLOW** fue utilizada por Becerra (Becerra, 1996), quien de una manera muy particular y sobre todo inteligente, resolvió las ecuaciones de la dinámica de los fluidos en coordenadas generalizadas.

El algoritmo que resuelve el sistema de ecuaciones algebraicas lineales, ha sido verificado por Carmona (Carmona, 1997). En este análisis numérico, se compara el rendimiento del algoritmo "línea por línea" (programado en **ATFLOW** para resolver el sistema de ecuaciones algebraicas lineales), con dos algoritmos que se encuentran instalados en la computadora CRAY-YMP de la UNAM.

A continuación se presenta la discusión de cinco casos, en los que se muestra la capacidad del modelo para resolver las ecuaciones que se presentaron en los capítulos anteriores.

En el primer caso, se presenta la solución numérica del flujo laminar de agua en el interior de un canal rectangular. Los resultados de la simulación tridimensional, se comparan de manera satisfactoria con la solución analítica.

En el segundo caso, se presenta la simulación del flujo de aire sobre una placa plana con transferencia de calor. El propósito de presentar este caso, es mostrar la capaci-

¹Las condiciones de frontera, la velocidad media del flujo de aire y la liberación de gas a través de la chimenea exigieron que la solución fuera simétrica

dad del modelo para predecir flujos turbulentos sobre superficies lisas. Las varianzas de las fluctuaciones de velocidad y el esfuerzo cortante $\overline{u'v'}$, que se obtienen con el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds, se comparan satisfactoriamente con datos experimentales.

En el tercer caso, se presenta la simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras y estables (Avila and Cervantes, 1997d), (Avila and Cervantes, 1997a). En el análisis de este caso, se utiliza tanto el modelo de dos ecuaciones κ - ϵ estándar como el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds que se presentó en el capítulo 3. Los resultados del modelo se comparan con datos experimentales y con soluciones numéricas previamente publicadas.

En el cuarto caso, se presenta el transporte y la dispersión turbulenta de partículas que se liberan en el interior de un flujo que tiene turbulencia homogénea, isotrópica y estacionaria. En este caso, se analizan dos condiciones diferentes de liberación de partículas. En la primer condición, las partículas se liberan de manera continua, mientras que en la segunda, las partículas se liberan de manera instantánea. Ambas soluciones se comparan con las soluciones: analítica y numérica (previamente publicadas), de la ecuación de difusión-advención de concentración de especies (Avila and Cervantes, 1997b).

En el quinto y último caso, se simula la dispersión de partículas sólidas en una región montañosa (Avila and Cervantes, 1997c). El dominio en estudio corresponde a la región de los Geysers localizada aproximadamente a 120 km al norte de San Francisco en el estado de California en los Estados Unidos de Norteamérica. Además de simular el flujo de aire, se determina la trayectoria de una nube de partículas que se libera de manera continua durante una hora. Los resultados numéricos se comparan con resultados experimentales tomados durante la noche del 19 de septiembre de 1980, por el grupo de laboratorios nacionales norteamericanos que participaron en el programa ASCOT (Atmospheric Studies in Complex Terrain).

6.1 Flujo de Poiseuille en un ducto con sección transversal cuadrada

El campo de velocidades del flujo laminar, completamente desarrollado, en el interior de un ducto recto, con sección transversal constante, se dirige en la dirección axial y depende únicamente de las coordenadas laterales, es decir: $v=w=0$ y $u=u(y, z)$. El modelo matemático mediante el cual es posible simular el comportamiento de estos flujos, tiene solución analítica para diferentes tipos de sección transversal. Si la sección transversal es cuadrada, las velocidades longitudinales se calculan a partir de (White, 1991):

$$u(y, z) = \frac{16a^2}{\mu\pi^3} \left(-\frac{dp}{dx} \right) \sum_{i=1,3,5,\dots}^{\infty} (-1)^{(i-1)/2} \left[1 - \frac{\cosh(i\pi z/2a)}{\cosh(i\pi b/2a)} \right] \times \frac{\cos(i\pi y/2a)}{i^3} \quad (6.1)$$

El flujo volumétrico en el interior del ducto, se determina mediante la siguiente expresión (White, 1991):

$$Q = \frac{4ba^3}{3\mu} \left(-\frac{dp}{dx} \right) \left[1 - \frac{192a}{\pi^5 b} \sum_{1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{\tanh(i\pi b/2a)}{i^5} \right] \quad (6.2)$$

donde la sección cuadrada está definida por: $-a \leq y \leq a$, $-a \leq z \leq a$.

La solución analítica representada por las ecs. (6.1 y 6.2), se compara con la solución numérica del programa **ATFLOW**, el cual resuelve las ecuaciones de la dinámica del fluido en condiciones de estado transitorio. Para garantizar que el flujo se encuentra en el régimen laminar (número de Reynolds pequeño), las dimensiones del canal, la velocidad del flujo y las propiedades del fluido, se fijaron a los siguientes valores: densidad y viscosidad dinámica del fluido (agua a temperatura ambiente) $\rho=1000 \text{ kg/m}^3$ y $\mu=0.0008 \text{ kg/m-s}$ respectivamente, velocidad del fluido (uniforme a la entrada del canal) $u(y,z)=0.001 \text{ m/s}$, longitud de las caras laterales que forman la sección transversal $L=2a=0.01 \text{ m}$. Tomando en cuenta estos valores, el número de Reynolds basado en el diámetro hidráulico ($D_h=4 \text{ Área/Perímetro}$) es:

$$Re_{D_h} = \frac{\rho D_h u}{\mu} = 12.5 \quad (6.3)$$

Este valor de Re_{D_h} , garantiza que el flujo se encuentra en el régimen laminar ya que la transición a la turbulencia ocurre cuando $Re_{D_h} \approx 2000$.

La longitud a partir de la cual los efectos de entrada desaparecen, se correlaciona con Re_{D_h} a partir de la siguiente expresión (White, 1991):

$$\frac{L_e}{D_h} = 0.5 + 0.05 Re_{D_h} \quad (6.4)$$

Sustituyendo el valor de $Re_{D_h}=12.5$ en la ec. (6.4), se obtiene el valor de la longitud de entrada $L_e=0.01125 \text{ m}$.

Con el propósito de comparar los resultados numéricos con la solución analítica (la cual corresponde a un estado estacionario), fue necesario integrar en el espacio y en el tiempo la ecuación de continuidad y las tres ecuaciones de cantidad de movimiento.

Para asegurar la convergencia del modelo, se llevaron a cabo diversas simulaciones con mallas numéricas de distinto tamaño, los resultados que se presentan a continuación corresponden a la malla más fina utilizada. La malla es uniforme y tiene 50 nodos en la dirección longitudinal x , 39 nodos en la dirección transversal y , y 39 nodos en la dirección transversal z . La integración temporal de las ecuaciones del fluido, se llevó a cabo utilizando un intervalo de tiempo fijo: $\Delta t=1\text{s}$. La sección transversal que se seleccionó para comparar los resultados numéricos con la solución analítica, se localiza en la región en donde los efectos de entrada son despreciables ($x=0.4 \text{ m}$). En la simulación, la longitud total del ducto es de $L_T=0.5 \text{ m}$.

En las figuras 6.1 y 6.2, se muestran las velocidades que se obtienen, a partir de la solución analítica y a partir de la simulación numérica respectivamente. En estas figuras, el origen del sistema de coordenadas se localiza en el centro de la sección transversal. El gradiente de la presión que aparece en la ec. (6.1), se obtiene de la ec. (6.2), ya que se conoce el gasto volumétrico Q a la entrada del canal. Al sustituir el valor de $Q=uA=1 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$, en la ec. (6.2), se obtiene el valor teórico de la variación

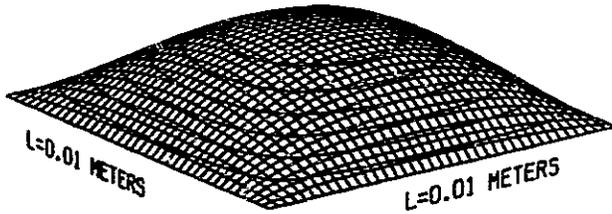


Figura 6.1: Velocidad longitudinal en el plano y - z , obtenida a partir de la solución analítica ec. (6.1). Flujo de Poiseuille $Re_{D_h}=12.5$, $u_{max}=0.00209$ m/s.

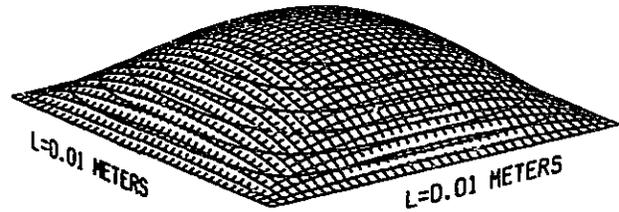


Figura 6.2: Velocidad longitudinal en el plano y - z , obtenida a partir de la solución numérica. Flujo de Poiseuille $Re_{D_h}=12.5$, $u_{max}=0.00208$ m/s.

de la presión a lo largo del ducto: $dp/dx=0.227$ N/m³. En la solución numérica, el valor del gradiente de la presión es: $dp/dx=0.23$ N/m³.

En la figura 6.3, se muestra la distribución de la velocidad longitudinal en el centro del canal, es decir a lo largo del eje z , y en la posición $y=0$. En la misma figura se muestra el error que se comete en la solución numérica. El porcentaje de error se calcula con la siguiente relación:

$$error(y, z) = \left| \frac{u_{anal}(y, z) - u_{num}(y, z)}{u_{anal}(y, z)} \right| \quad (6.5)$$

En la figura 6.3, se observa, que la solución numérica, al igual que la solución analítica es simétrica con respecto al eje y . Es conveniente mencionar, que la velocidad que se obtiene mediante la simulación numérica, permanece por debajo de la solución analítica. La razón de que el flujo volumétrico calculado numéricamente es menor que el valor teórico, se debe a que en el proceso de discretización del dominio, existe un espacio cerca de las paredes el cual no es considerado como área de flujo. El flujo volumétrico exacto, como ya se ha mencionado, es: $Q=1 \times 10^{-7}$ m³/s, mientras que el flujo volumétrico en la solución numérica, considerando una malla de 39×39 nodos en la sección transversal, es de: $Q_{num}=0.94 \times 10^{-7}$ m³/s. En la figura 6.3, se observa que el error es de mayor magnitud en la región cercana a las paredes del ducto. Esto se debe fundamentalmente al tamaño de la malla utilizada en la simulación. Si la malla se hace más fina sucede lo siguiente: (a) $Q_{num} \rightarrow Q$ y (b) la velocidad del nodo que se encuentra en la vecindad de la pared (condición de frontera desde el punto de vista numérico) se calcula con menor margen de error. Como se mencionó en el capítulo 3, la condición de frontera de la solución numérica no la constituye la frontera sólida del dominio, sino que está

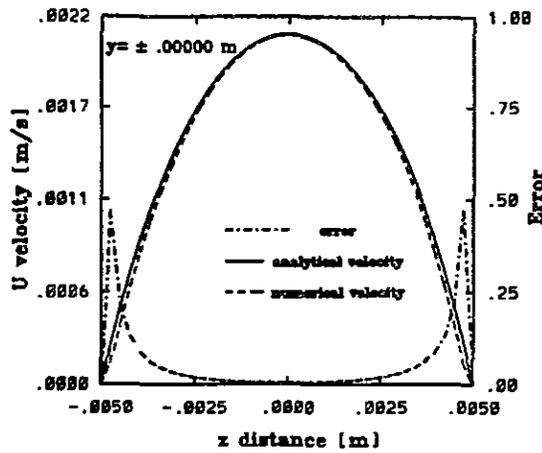


Figura 6.3: Distribución de velocidades analítica y numérica, y distribución de errores ec. (6.5), a lo largo del eje z ($y=0$). Flujo de Poiseuille $Re_{D_h}=12.5$

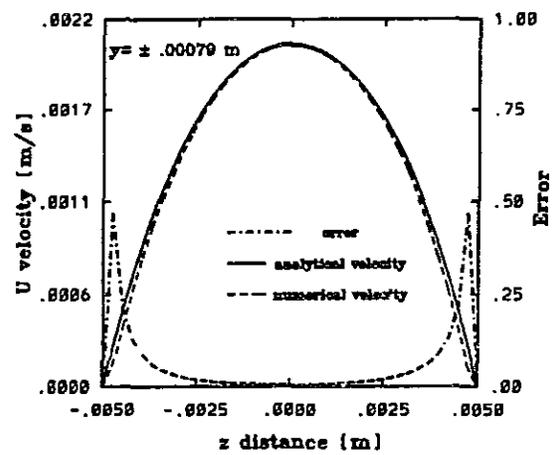


Figura 6.4: Distribución de velocidades analítica y numérica, y distribución de errores ec. (6.5), a lo largo de ejes paralelos al eje z , $y=\pm 0.00079$ m.

ubicada en el nodo que se localiza en la vecindad de la pared. En el caso de las ecuaciones de cantidad de movimiento, la velocidad del nodo vecino a la frontera, se calcula como función del esfuerzo cortante τ_{xy} (para las paredes superior e inferior del ducto localizadas en $y = \pm a$) y del esfuerzo τ_{xz} (para las paredes laterales del ducto localizadas en $z = \pm a$). Para calcular el esfuerzo cortante cerca de la pared, se utiliza una variación lineal del campo de velocidades, por lo que el esfuerzo es:

$$\tau_{xy} = \mu \frac{u_p}{y_p} \quad (6.6)$$

donde el subíndice p , se refiere al nodo vecino a la frontera.

El error que se comete al evaluar la velocidad u_p a partir de una distribución lineal, puede disminuirse si se hace más fina la malla numérica. Otra forma de disminuir el error cerca de la pared, es a partir de utilizar una función parabólica para representar el campo de velocidades.

En las figuras 6.4 y 6.5, se muestra la distribución de velocidades a lo largo de ejes paralelos al eje z , en cuatro posiciones a lo largo del eje y ($y = \pm 0.00079$ m y $y = \pm 0.00237$ m). En estas figuras se observa que la solución numérica también es simétrica con respecto al eje z . Se observa nuevamente que el error es de mayor magnitud, en la región cercana a las paredes.

En la figura 6.6, se muestra una perspectiva del error en toda la sección transversal. En la figura se observa que el error disminuye lejos de las paredes, y que adquiere el

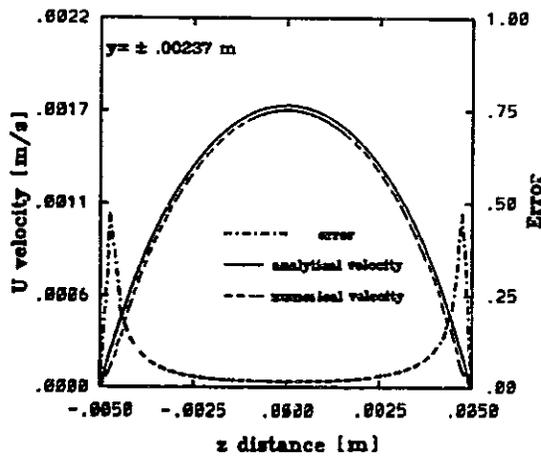


Figura 6.5: Distribución de velocidades analítica y numérica, y distribución de errores ec. (6.5). a lo largo de ejes paralelos al eje z , $y = \pm 0.00237$ m.

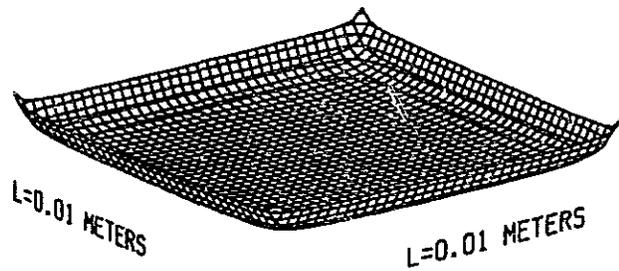


Figura 6.6: Distribución de errores en la sección transversal. Flujo de Poiseuille $Re_{D_h} = 12.5$, el error máximo ocurre en las esquinas $error_{max} = 0.6$

máximo valor en las esquinas del canal.

En la simulación del flujo de Poiseuille, únicamente se utilizó una malla numérica uniforme en la sección transversal y no se realizaron intentos por mejorar la formulación para evaluar el esfuerzo cortante cerca de la pared. Mostrar los resultados de este caso, es sin duda muy ilustrativo ya que es posible observar que el modelo numérico reproduce satisfactoriamente las características generales del flujo: variación de la presión a lo largo del ducto, simetría de la solución y velocidad máxima ².

6.2 Flujo turbulento sobre una placa plana con superficie lisa

En esta sección, se presenta la simulación numérica del flujo de aire sobre una placa plana con superficie lisa. Predecir apropiadamente las características medias y turbulentas del flujo de aire en la región cercana a la superficie (capa límite), constituye una prueba importante para cualquier modelo, ya que existe información experimental suficiente para verificar los resultados computacionales.

Los resultados del modelo numérico, se comparan con los datos experimentales de

²En el transcurso de esta investigación se realizaron simulaciones con malla numéricas más finas, sin embargo el tiempo de cómputo necesario para una malla con $40 \times 69 \times 69$ nodos, es del orden de 2hrs Cray-YMP por cada 3000 iteraciones.

Klebanoff (Klebanoff, 1955), los cuales se tomaron en una posición (a lo largo de la placa) en donde el número de Reynolds basado en el espesor de la capa límite (δ), es $Re_\delta = \rho\delta U_e/\mu \approx 7.5 \times 10^4$ (Hinze, 1975), donde; U_e , es la velocidad del aire fuera de la capa límite.

En la simulación, se considera que la superficie sólida tiene una temperatura constante en el tiempo, y es uniforme en el espacio. La temperatura de la superficie es diferente a la temperatura del aire ($\Delta T = T_{sup} - T_e = 6$ K, donde T_e es la temperatura de la corriente libre del aire), el cual fluye en dirección paralela a la placa. El aire se encuentra a presión atmosférica y tiene las siguientes propiedades: (a) densidad $\rho = 1.177$ kg/m³, (b) viscosidad dinámica $\mu = 1.983 \times 10^{-5}$ kg/m-s, (c) calor específico $c_p = 1.005 \times 10^3$ J/kg K, (d) conductividad térmica $k_T = 0.02624$ W/m K y (e) número de Prandtl $Pr = 0.708$.

Las dimensiones del dominio en estudio son: 5 m en la dirección longitudinal x , 0.2 m en la dirección vertical y y 0.5 m en la dirección transversal z . El aire entra a la región de estudio (en la posición $x = 0$ m), con una velocidad longitudinal paralela a la placa de $U_e = 33$ m/s. La simulación se llevó a cabo utilizando una malla numérica de $20 \times 40 \times 20$ nodos. En las direcciones: longitudinal y transversal, se utilizaron incrementos uniformes de Δx y Δz . En la dirección vertical, los incrementos Δy tienen una distribución logarítmica, en esta dirección, la malla es mucho más fina en la región cercana a la pared.

Para comparar los resultados numéricos con los datos experimentales, se seleccionaron los volúmenes de control que se localizan sobre el eje de simetría de la placa (paralelo al eje x) y en la posición longitudinal en donde el espesor de la capa límite es $\delta \approx 0.035$ m. En esta posición, el número de Reynolds en la simulación es $Re_\delta \approx 7.5 \times 10^4$, por lo que es posible comparar los resultados del modelo con los datos de Klebanoff (Klebanoff, 1955).

El modelo de turbulencia que se utilizó para cerrar las ecuaciones del fluido, es el modelo κ - ϵ estándar. Se le denomina modelo estándar debido a las siguientes razones: (a) las correlaciones $\overline{u_i' u_j'}$ y $\overline{u_i' \theta'}$ que aparecen en las ecuaciones de cantidad de movimiento, energía térmica, κ y ϵ , se modelan de acuerdo a la aproximación de Boussinesq (Launder and Spalding, 1972) (ver ecs. (1.12 y 1.13)), (b) la viscosidad turbulenta se define a partir de la relación:

$$\nu_t = c_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (6.7)$$

(c) las ecuaciones de transporte de la energía turbulenta y de la disipación de energía, están representadas por las ecs. (2.47) y (2.50) respectivamente y (d) las constantes empíricas que aparecen en las ecs. (2.47) y (2.50) son las que propusieron originalmente Launder y Spalding (Launder and Spalding, 1974).

Aunque las constantes de Launder y Spalding no son universales, éstas han sido utilizadas ampliamente para resolver diversos problemas de ingeniería. Las constantes empíricas estándar que se utilizan en la simulación son las siguientes (Launder and Spalding, 1974): $c_\mu = 0.09$, $\sigma_\kappa = 1.$, $C_{1\epsilon} = 1.44$, $C_{2\epsilon} = 1.92$, $\sigma_\epsilon = 1.3$.

Las condiciones de frontera de las ecuaciones de transporte de κ y ϵ , están definidas por las ecuaciones (3.72) y (3.68) respectivamente. En la ecuación (3.68), la función

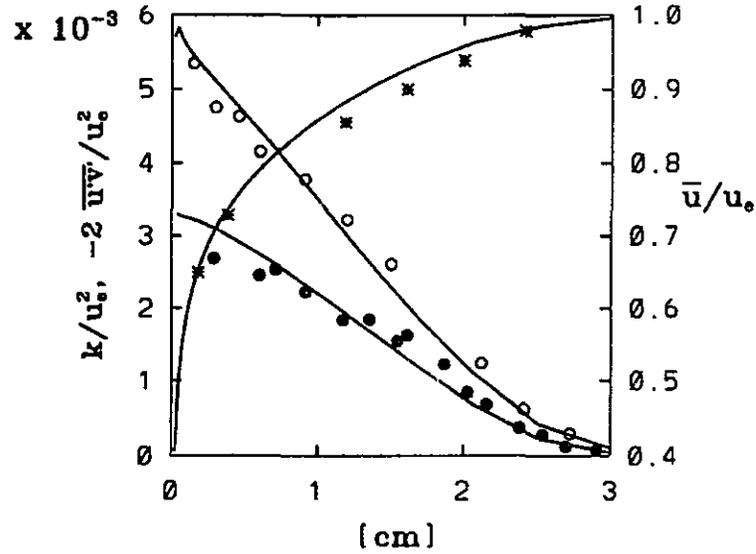


Figura 6.7: Perfiles de velocidad media (*), energía cinética turbulenta (o), y esfuerzo cortante $\overline{u'v'}$ (•). Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_\delta=7.5 \times 10^4$. Los símbolos corresponden a los datos de Klebanoff (Klebanoff, 1955) (tomados de Jones y Launder (Jones and Launder, 1971)), la línea continua corresponde a los resultados de la simulación numérica.

$\phi_m=1$, y el término de flotación no se toma en cuenta.

Debido a que la placa plana tiene superficie lisa, las condiciones de frontera de las ecuaciones de cantidad de movimiento y de la ecuación de la energía, no se determinan a partir de las ecs. (3.76-3.78), las cuales son válidas para superficies rugosas, sino que se definen por las siguientes leyes logarítmicas de pared:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa_0} \ln y^+ + B \quad (6.8)$$

$$w^+ = \frac{1}{\kappa_0} \ln y^+ + B \quad (6.9)$$

$$\overline{T^+} = \frac{Pr_t}{\kappa_0} \ln y^+ + Pr_t B \quad (6.10)$$

donde $u^+ = \overline{u}/u_\tau$, $w^+ = \overline{w}/u_\tau$, $y^+ = u_\tau y_p/\nu$, $B=5.2$ y $Pr_t=1$. La expresión de la temperatura adimensional T^+ es:

$$T^+ = \frac{\rho c_p (\overline{T} - \overline{T}_s) u_\tau}{-q_s} \quad (6.11)$$

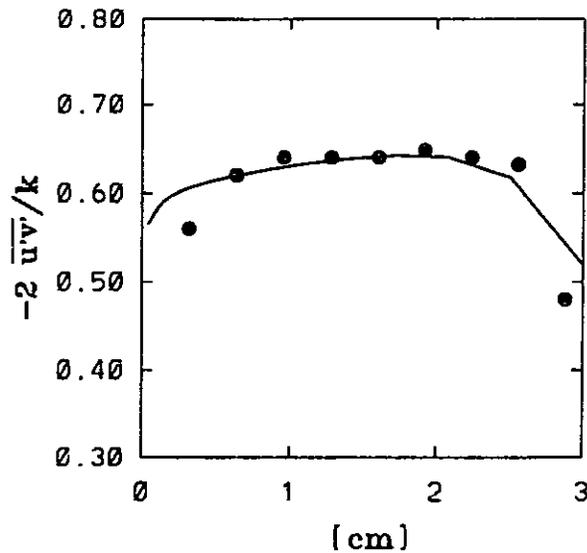


Figura 6.8: Relación entre el esfuerzo cortante turbulento $\overline{u'v'}$ y la energía cinética turbulenta κ . Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_\delta=7.5 \times 10^4$. El símbolo (•) corresponde a los datos de Klebanoff (Klebanoff, 1955) (tomados de Hinze (Hinze, 1975)), la línea continua corresponde a los resultados de la simulación numérica.

donde $\overline{T_s}$ y q_s son: la temperatura y el flujo de calor en la superficie respectivamente.

En la figura 6.7, se comparan los resultados de la velocidad media $\overline{u}(y)$, intensidad turbulenta κ y esfuerzo cortante $\overline{u'v'}$, con los datos de Klebanoff (Klebanoff, 1955), en la forma que los reporta Jones y Launder (Jones and Launder, 1971). En el experimento de Klebanoff, la velocidad de la corriente libre del aire y el espesor de la capa límite en la posición en donde se tomaron las mediciones son: $U_e=15.24$ m/s y $\delta=7.6$ cm. En la figura 6.7, se observa que cerca de la superficie, el valor del esfuerzo cortante adimensional medido por Klebanoff es: $-2\overline{u'v'}/U_e^2 \approx 0.0027$. Utilizando la condición $-\overline{u'v'} = u_\tau^2$, es posible obtener el valor experimental de la relación $u_\tau/U_e=0.037$. En la misma figura se observa que cerca de la superficie, el valor del esfuerzo cortante (adimensional) calculado a partir de la relación de Boussinesq (ver ec. (1.12)):

$$\overline{u'v'} = \nu_t \frac{\partial \overline{u}}{\partial y} \quad (6.12)$$

es aproximadamente 0.003. En la solución numérica el valor de la velocidad de fricción es $u_\tau=1.29$ m/s por lo que la relación de velocidades es $u_\tau/U_e=0.039$. La solución numérica satisface satisfactoriamente la condición que prevalece en la región logarítmica $-\overline{u'v'} = u_\tau^2$, ya que el esfuerzo cortante calculado con la ec. (6.12), es: $\overline{u'v'}=1.66$.

En la figura 6.7, se observa que los perfiles de κ y $\overline{u'v'}$ en la parte exterior de la capa límite se comparan satisfactoriamente con los datos experimentales. Sin embargo, cerca de la pared, los valores de la energía turbulenta y del esfuerzo cortante son mayores a los

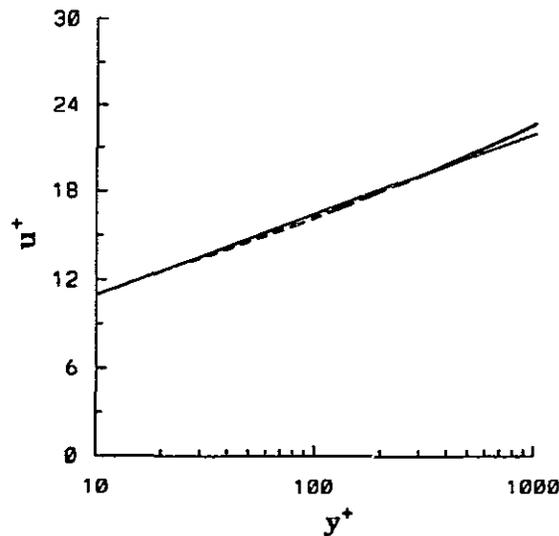


Figura 6.9: Distribución de la velocidad media \bar{u} en la capa límite, utilizando las coordenadas y^+ y u^+ . Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_\delta = 7.5 \times 10^4$. La línea continua corresponde a los resultados de la ley logarítmica de la pared ec. (6.8), la línea discontinua corresponde a la simulación numérica.

datos experimentales, este comportamiento se debe probablemente a la discretización logarítmica que se utilizó en la dirección vertical. El autor recomienda la utilización de mallas uniformes, sin embargo en este caso en particular, fue necesario utilizar una malla logarítmica (malla muy fina cerca de la pared) para poder determinar el comportamiento de la capa límite.

A pesar de lo anterior, se puede decir que el modelo predice satisfactoriamente el comportamiento de κ , $\overline{u'v'}$ y de la velocidad media \bar{u} .

En la figura 6.8, se presenta la distribución de la relación $-2\overline{u'v'}/\kappa$. Los resultados del modelo se comparan con los datos de Klebanoff en la forma que los presenta Hinze (Hinze, 1975). En esta figura, se observa que en la región no muy cercana a la pared, la distribución del esfuerzo cortante turbulento es semejante a la distribución de la energía cinética turbulenta, es decir, la relación entre ambas cantidades es aproximadamente constante en gran parte de la capa límite. En la figura 6.8 se observa que el modelo reproduce la disminución de la relación $-2\overline{u'v'}/\kappa$ en la parte exterior de la capa límite.

En la figura 6.9, se presenta el perfil de velocidades en la capa límite utilizando las coordenadas y^+ y u^+ . En esta figura se observa que la solución numérica, se ajusta en la región $35 \leq y^+ \leq 350$, al perfil logarítmico definido por la ec. (6.8). En la región exterior de la capa límite $y^+ > 350$, se observa que el perfil de velocidades es mayor que la distribución logarítmica, lo cual coincide con lo reportado en la literatura (White, 1991).

Se mencionó en párrafos anteriores, que la placa se encuentra a diferente temperatura que el flujo, por lo que existe transferencia de calor entre la placa y el fluido. En

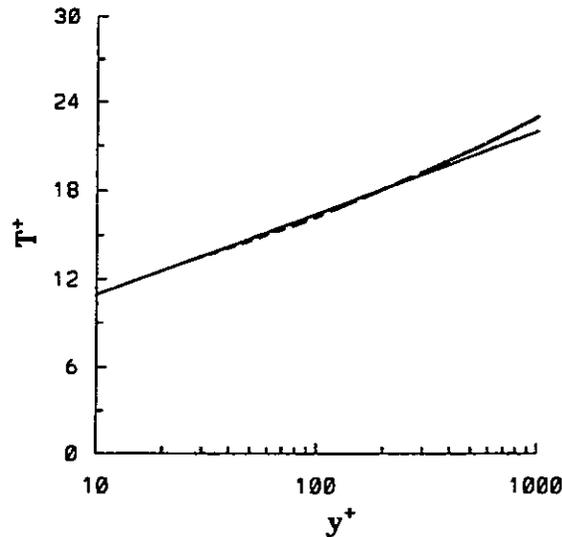


Figura 6.10: Distribución de la temperatura media \bar{T} en la capa límite, utilizando las coordenadas y^+ y T^+ . Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_x=7.5 \times 10^4$. La línea continua corresponde a los resultados de la ley logarítmica de la pared ec. (6.10), la línea discontinua corresponde a la simulación numérica.

este caso, debido a que se tiene un fluido incompresible y los efectos de flotación son despreciables, el campo de velocidades no depende de la distribución de temperaturas, de tal manera que las velocidades se evalúan de manera independiente.

En la figura 6.10, se presenta la distribución de temperaturas en el interior de la capa límite, utilizando las variables y^+ y T^+ . Puede observarse, que la distribución de la temperatura adimensional T^+ , se compara satisfactoriamente con el perfil logarítmico definido por la ec. (6.10). Es interesante observar que la distribución de T^+ es muy semejante a la distribución de la velocidad adimensional u^+ (ver figura 6.9). Esto es de esperarse, ya que en la simulación, el número de Prandtl turbulento es unitario y en la ec. (6.10) se utilizó la misma constante B , que aparece en la relación (6.8).

En la figura 6.11, se presenta la variación del coeficiente de fricción local C_f , como función del número de Reynolds:

$$Re_x = \frac{\rho x U_e}{\mu} \quad (6.13)$$

donde x es la distancia que ha recorrido el flujo a lo largo de la placa. En esta figura, se compara la solución numérica con la relación "exacta" propuesta por White (White, 1991):

$$C_f = \frac{0.455}{\ln^2(0.06 Re_x)} \quad (6.14)$$

El coeficiente de fricción local en la simulación se obtuvo a partir de la siguiente relación:

$$C_f = \frac{2\tau_w}{\rho U_e^2} \quad (6.15)$$

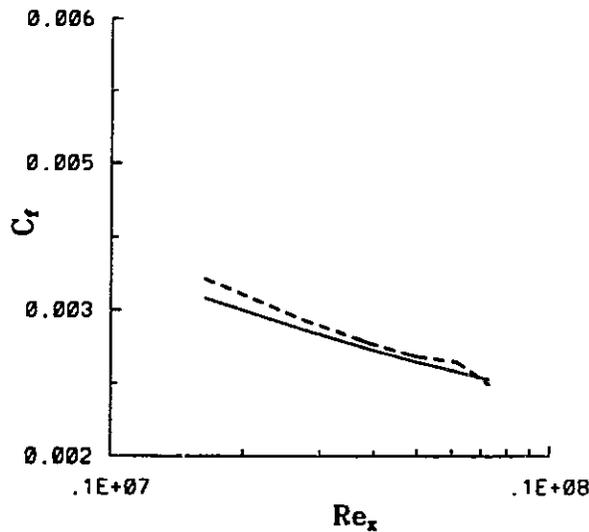


Figura 6.11: Variación del coeficiente de fricción local C_f con respecto al número de Reynolds Re_x . Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_\delta = 7.5 \times 10^4$. La línea continua corresponde a los resultados de la ec. (6.14), la línea discontinua corresponde a la simulación numérica.

donde el esfuerzo cortante sobre la superficie τ_w , se obtiene a partir de la expresión:

$$\tau_w = -\rho \overline{u'v'} = \rho u_\tau^2 = \rho \kappa c_\mu^{1/2} \quad (6.16)$$

Puede observarse en la figura 6.11, que el valor de C_f que se obtiene en la simulación, es mayor que la solución analítica cuando $Re_x < 3 \times 10^6$. La razón principal por la cual no coinciden las dos soluciones en este rango del Re_x , es debido a que en el desarrollo de la ec. (6.14), se utilizó una distribución logarítmica de la velocidad media en el intervalo $30 < y^+ < 250$, es decir, el coeficiente C_f se obtiene suponiendo que el perfil de velocidades siempre es logarítmico. Sin embargo, el perfil de velocidades en la región en donde inicia el desarrollo de la capa límite ($x \approx 0.0$), no necesariamente satisface la ley logarítmica de la pared.

Es conveniente recordar que la ley logarítmica se obtiene al suponer que: (a) la presión no varía en la dirección longitudinal, (b) la velocidad vertical \bar{v} es cero, (c) la velocidad \bar{u} no cambia en la dirección longitudinal, (d) no existe difusión de la energía cinética turbulenta en la dirección vertical $\partial \kappa / \partial y = 0$, y (e) el flujo se encuentra en la condición de equilibrio local (producción de energía cinética turbulenta = disipación de energía). Si se toman en cuenta las condiciones anteriores, la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección x , se reduce a una expresión que establece que el esfuerzo cortante debido a la viscosidad molecular y al movimiento turbulento, es constante en la dirección normal a la superficie.

Jones y Launder (Jones and Launder, 1971), reportaron que para Re_x pequeños; existe discrepancia entre sus predicciones de C_f y los valores obtenidos a partir de una

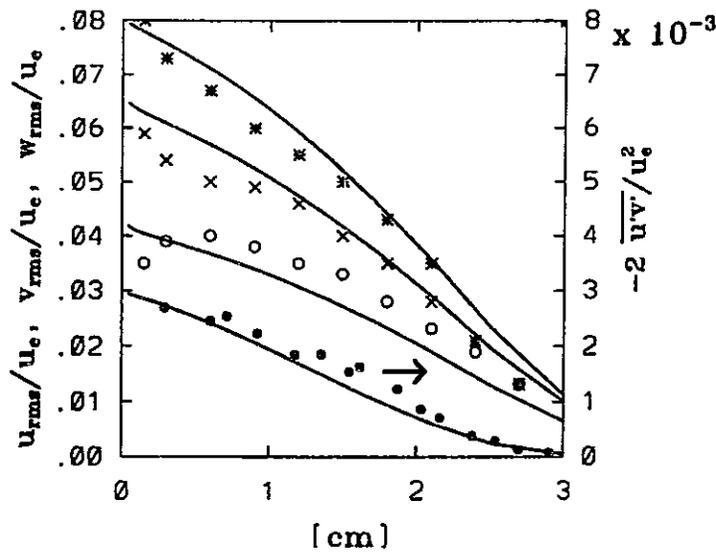


Figura 6.12: Intensidad relativa de los tres esfuerzos normales, u_{rms}/U_e (*), v_{rms}/U_e (o), w_{rms}/U_e (x), y esfuerzo cortante $\overline{u'v'}$ (●). Flujo sobre una placa plana con superficie lisa, $Re_\delta=7.5 \times 10^4$. Los símbolos corresponden a los datos de Klebanoff (Klebanoff, 1955), la línea continua corresponde a los resultados de la simulación numérica.

correlación empírica que incluye una distribución logarítmica de la velocidad media.

Jones y Launder observaron que el perfil de velocidades (calculado a partir de un método numérico), graficado en el sistema de coordenadas y^+ y u^+ , depende fuertemente del Re_x , de tal manera que al disminuir el valor del Re_x , el perfil de velocidades se aleja de la solución logarítmica ec. (6.8).

Una situación semejante se presenta al estudiar la transferencia de calor entre una superficie y un flujo, en este caso es común suponer que la forma universal de la temperatura adimensional es logarítmica (ver ec. (6.10), sin embargo, experimentalmente se ha observado (Johnk and Hanratty, 1962), que el flujo en el interior de un ducto circular, no presenta un perfil de temperaturas logarítmico en la región de entrada térmica. La distribución universal de la temperatura adimensional T^+ , únicamente se logra cuando el flujo alcanza la condición de completo desarrollo.

En la figura 6.11, se observa que en la región $3 \times 10^6 < Re_x < 5 \times 10^6$, los resultados numéricos del coeficiente de fricción son alentadores. Sin embargo, en la zona en donde el $Re_x > 5 \times 10^6$, el C_f tiene un extraño comportamiento, esto es debido a que en la simulación, la placa tiene longitud finita, por lo que la influencia de la condición de frontera que se especifica en la posición $x = L$, donde L es la longitud total de la placa, se transmite corriente arriba. Para disminuir este efecto es necesario refinar más la malla en la dirección longitudinal, de tal manera que el efecto de la condición de salida del flujo, no perturbe de manera directa a los volúmenes de control localizados lejos de la frontera $x = L$.

En la figura 6.12, se muestra: la intensidad ($\text{rms} = (\overline{u_i^2})^{1/2}$) de los tres esfuerzos de Reynolds normales, relativa a la velocidad de la corriente libre del aire U_e , y el esfuerzo cortante $\overline{u'v'}$. En la figura, se comparan los resultados de la simulación con los datos del experimento de Klebanoff (Klebanoff, 1955). En la simulación, los esfuerzos turbulentos $\overline{u_i^2}$ y $\overline{u'v'}$ se obtuvieron utilizando el modelo algebraico de los esfuerzos Reynolds, el cual se presentó en detalle en el capítulo 3. Debido a que en el procedimiento de cálculo se utilizó el modelo de turbulencia estándar, los esfuerzos de Reynolds no se tomaron en cuenta en la solución de las ecuaciones de conservación. En la simulación, el módulo computacional que calcula los esfuerzos de Reynolds, es llamado por el programa de cómputo, una vez que se logra la convergencia de resultados en cada intervalo de tiempo Δt . En el procedimiento numérico, los términos de flotación se consideran despreciables, por lo que el flujo tiene características neutras y el valor de la función f , que se incorpora en las ecuaciones (3.23 y 3.24), es unitario. En la figura 6.12, es interesante observar que el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds (cuando se utilizan las constantes estándar y las ecuaciones estándar de κ y ϵ ecs. ((2.47) y (2.50) respectivamente), reproduce satisfactoriamente las características generales de los resultados experimentales de Klebanoff. En la figura, se observa que los tres esfuerzos normales son diferentes entre sí en gran parte de la capa límite. Es posible observar, que en la región cercana a la pared se presenta un incremento de la anisotropía de la turbulencia, mientras que en el borde exterior de la capa límite, la turbulencia tiende a ser isotrópica. Las mediciones (representadas en la figura por símbolos), al igual que los resultados del modelo (representados por la línea continua), indican que la mayor parte de la energía turbulenta, está contenida en las fluctuaciones de velocidad en la dirección longitudinal, mientras que las fluctuaciones de velocidad en la dirección vertical, tienen la menor intensidad.

En la figura 6.12, se observa la influencia que tiene la superficie sobre las fluctuaciones de presión (si el flujo se encuentra aproximadamente en equilibrio local, es decir: producción=disipación, los términos de transporte de las ecuaciones de Reynolds son despreciables, por tanto las únicas correlaciones que juegan un papel importante en las ecuaciones de $\overline{u_i^2}$, son las que contienen las fluctuaciones de presión, ver ec. (3.27)). El modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds, calcula satisfactoriamente la redistribución de energía turbulenta en la capa límite, es decir, las fluctuaciones de velocidad en la dirección vertical $\overline{u_2^2}$, se amortiguan por la presencia de la superficie y la energía se distribuye en las direcciones longitudinal y transversal. En la figura se observa que el valor máximo de los esfuerzos normales se calcula apropiadamente. En el interior de la capa límite, se observa que el modelo predice resultados que siguen la tendencia de los datos experimentales, lo que resulta muy alentador.

En relación al esfuerzo cortante $\overline{u'v'}$, se observa que los resultados se comparan satisfactoriamente con los experimentos en la mayor parte de la capa límite, el valor máximo del esfuerzo cortante, el cual ocurre cerca de la superficie se predice adecuadamente.

Los resultados que se presentan en la figura 6.12, se obtuvieron con el modelo de turbulencia κ - ϵ estándar y las constantes propuestas por Launder y Spalding (Launder and Spalding, 1974), y no se realizaron intentos por mejorar los resultados numéricos ya sea a partir de modificar las constantes o las ecuaciones del modelo. Debido a que

los esfuerzos de Reynolds no se incorporan en las ecuaciones de transporte, éstos dependen únicamente de los campos de velocidad media y características turbulentas que se obtienen con el modelo estándar. Lo que se sugiere, es utilizar el valor calculado de las correlaciones $\overline{u_i'^2}$ e incorporarlas en las ecuaciones de transporte con el propósito de que exista una interacción (esfuerzos de Reynolds-ecuaciones de transporte) en los dos sentidos.

En el problema que se analiza en la siguiente sección, los perfiles de velocidad, temperatura, esfuerzos de Reynolds y correlaciones $\overline{u_i'\theta'}$ que se obtienen con el modelo numérico, se comparan satisfactoriamente con los datos experimentales tomados en la capa límite atmosférica. Los resultados numéricos, se obtuvieron después de modificar la forma de la ecuación de disipación ϵ y el valor de algunas de las constantes del modelo.

De acuerdo a los resultados presentados en esta sección, puede decirse que el modelo se comporta de manera satisfactoria. Si se toma en cuenta, que no es trivial la incorporación de un modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds en un modelo computacional tridimensional (no sólo por las complicaciones algebraicas presentes, sino también por la cantidad de tiempo de cómputo requerido en la solución), puede decirse entonces, que los resultados que se obtienen con el modelo desarrollado en este trabajo, son realmente alentadores.

6.3 Simulación de la capa límite atmosférica, utilizando un modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds

En esta sección, se presenta la simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras y estables, a partir de utilizar un modelo de turbulencia híbrido. Se mencionó en el capítulo de introducción que los modelos algebraicos de esfuerzos de Reynolds constituyen una forma eficiente de cerrar las ecuaciones, cuando el propósito es simular flujos atmosféricos a escala intermedia, ver la página (8).

El problema que se plantea en esta sección, y sobre todo la forma en que se obtiene la solución del mismo, constituye la continuación del trabajo de Detering y Etling (DyE) (Detering and Etling, 1985). DyE propusieron modificar el modelo de turbulencia κ - ϵ estándar (el cual se presentó en la sección anterior), una vez que comprobaron que el modelo no reproduce satisfactoriamente los datos experimentales tomados sobre la ciudad de Leipzig Alemania, en condiciones de atmósfera neutra (Lettau, 1962), (Pasquill, 1974). El modelo κ - ϵ modificado, fue utilizado por DyE para cerrar las ecuaciones de cantidad de movimiento que modelan el flujo turbulento, horizontalmente homogéneo, que está sujeto a la aceleración de Coriolis y que se encuentra en condiciones neutras. Este modelo matemático ha sido utilizado por algunos autores para representar la capa límite atmosférica, pero sobre todo para verificar el comportamiento del modelo de turbulencia utilizado (Lettau, 1962), (Andrén, 1990), (Shir, 1973), (Mellor and Yamada, 1982), (Monin and Yaglom, 1971).

La contribución adicional al trabajo original de DyE, es que en el presente estudio

se utiliza el modelo κ - ϵ modificado, para simular flujos estratificados, esta condición no fue estudiada por los autores mencionados.

El modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds, el cual se presentó en el capítulo 3, es utilizado en esta sección, en conjunto con dos versiones del modelo κ - ϵ modificado: (a) Versión "sin esfuerzos de Reynolds" (seR), en esta versión (al igual que el modelo utilizado en la sección anterior), las correlaciones $\overline{u'_i u'_j}$ y $\overline{u'_i \theta'}$ que se obtienen con el modelo algebraico, no se sustituyen en las ecuaciones de transporte.

(b) Versión "con esfuerzos de Reynolds" (ceR), en donde los valores de $\overline{u'_i u'_j}$ y $\overline{u'_i \theta'}$ que se obtienen con el modelo algebraico, se introducen (en el transcurso del proceso iterativo) en las ecuaciones de transporte de κ y ϵ , ver las ecs. (2.49) y (2.52).

Vale la pena mencionar que en sentido estricto, los esfuerzos de Reynolds $\overline{u'_i u'_j}$ y los flujos turbulentos de calor $\overline{u'_i \theta'}$, que se obtienen con el modelo algebraico, deben ser sustituidos (durante el proceso iterativo) también en las ecuaciones de cantidad de movimiento y en la ecuación de la energía. Sin embargo, el autor decidió utilizar en estas ecuaciones la aproximación de Boussinesq y el concepto de la viscosidad turbulenta, ver las ecs. (1.12 y 1.13). Se tomó esta decisión ya que la viscosidad turbulenta contiene de manera indirecta la información de las correlaciones $\overline{u'_i u'_j}$ y $\overline{u'_i \theta'}$. Es decir, durante el procedimiento de cómputo, las correlaciones turbulentas calculadas con el modelo algebraico se sustituyen en las ecuaciones de κ y ϵ , ecuaciones (2.49) y (2.52) respectivamente, por lo que la viscosidad turbulenta resultante calculada a partir de la ec. (6.7) contiene la información de las características turbulentas. Es conveniente decir que en el transcurso de la presente investigación se realizaron experimentos computacionales en los cuales los esfuerzos de Reynolds y los flujos turbulentos de calor, se sustituyeron directamente en las ecuaciones de cantidad de movimiento y de energía térmica, sin embargo, la solución numérica presentó serias dificultades de convergencia y estabilidad sobre todo al inicio del proceso de cómputo (durante las primeras iteraciones del primer incremento de tiempo Δt). Este comportamiento de la solución numérica probablemente se debe a que en las ecuaciones de cantidad de movimiento, los esfuerzos turbulentos (calculados a partir de un campo de velocidades que no satisface la ecuación de continuidad y con campos de κ y ϵ muy cercanos a los propuestos inicialmente), son tratados en función de su derivada con respecto a las variables espaciales. En las iteraciones iniciales, la variación espacial de los esfuerzos turbulentos es grande por lo que vuelve inestable la solución. El autor sugiere continuar con esta línea de investigación, con el propósito de identificar las causas del comportamiento anómalo de la solución numérica.

6.3.1 Modelo matemático

En el análisis se considera que la capa límite de la atmósfera es horizontalmente homogénea, y se desarrolla sobre una superficie plana con rugosidad uniforme. Debido a que la capa límite es pequeña en comparación con la altura total de la atmósfera, las variaciones verticales de la densidad del aire pueden considerarse despreciables ($\rho = \text{cte}$). Si se toma en cuenta lo anterior, las ecuaciones se reducen a lo siguiente (ver capítulo 2):

Ecuación de cantidad de movimiento en x

$$\frac{\partial(\rho\bar{u})}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial(\rho\overline{u'v'})}{\partial y} - 2\rho\bar{w}\omega \sin(\phi) \quad (6.17)$$

Ecuación de cantidad de movimiento en z

$$\frac{\partial(\rho\bar{w})}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\partial(\rho\overline{w'v'})}{\partial y} + 2\rho\bar{u}\omega \sin(\phi) \quad (6.18)$$

Ecuación de la energía térmica

$$\frac{\partial(\rho\bar{\theta})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y}(-\rho\overline{v'\theta'}) \quad (6.19)$$

donde

$$\overline{u'v'} = -\nu_t \frac{\partial\bar{u}}{\partial y} \quad (6.20)$$

$$\overline{w'v'} = -\nu_t \frac{\partial\bar{w}}{\partial y} \quad (6.21)$$

$$\overline{v'\theta'} = -\frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial\bar{\theta}}{\partial y} \quad (6.22)$$

donde $Pr_t=0.86$. Si se supone que fuera de la capa límite; los esfuerzos cortantes turbulentos son despreciables y la velocidad de la corriente libre (velocidad geostrófica) es invariante en el tiempo y en el espacio, existe equilibrio entre el gradiente de presión y la aceleración de Coriolis, el cual se representa como:

$$-\frac{\partial p}{\partial x} = \rho\omega_g f_c \quad (6.23)$$

y

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \rho u_g f_c \quad (6.24)$$

donde: $f_c = 2\omega \sin(\phi)$ es el parámetro de Coriolis y u_g y w_g son las velocidades del aire fuera de la capa límite atmosférica en las direcciones x y z respectivamente.

Si se sustituyen las expresiones (6.23) y (6.24) en las ecuaciones de cantidad de movimiento (6.17) y (6.18), se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial\rho\bar{u}}{\partial t} = -\rho f_c (\bar{w} - w_g) - \frac{\partial(\rho\overline{u'v'})}{\partial y} \quad (6.25)$$

$$\frac{\partial\rho\bar{w}}{\partial t} = \rho f_c (\bar{u} - u_g) - \frac{\partial(\rho\overline{w'v'})}{\partial y} \quad (6.26)$$

Ecuación de la energía cinética turbulenta

Versión "sin esfuerzos de Reynolds" (seR):

La ecuación de κ que se utiliza en el modelo estándar y en el modelo modificado de DyE es la siguiente ³:

$$\frac{\partial \rho \kappa}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho \nu_t}{\sigma_\kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial y} \right) + \rho \nu_t \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right)^2 \right] - \rho \epsilon - \rho \beta g \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y} \quad (6.27)$$

Versión "con esfuerzos de Reynolds" (ceR):

La ecuación de la energía cinética turbulenta que se utiliza en el modelo modificado, acoplado con el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds es:

$$\frac{\partial \rho \kappa}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left(C_\mu \rho \frac{\kappa}{\epsilon} \overline{v'v'} \frac{\partial \kappa}{\partial y} \right) - \overline{u'v'} \frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial y} - \overline{w'v'} \frac{\partial \rho \bar{w}}{\partial y} - \rho \epsilon + \rho \beta g \overline{v'\theta'} \quad (6.28)$$

Ecuación de la disipación de energía turbulenta

Versión "sin esfuerzos de Reynolds" (scR):

La ecuación de ϵ que se utiliza en el modelo estándar y en el modelo modificado de DyE es:

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho \nu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial y} \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{\kappa} \rho \nu_t \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right)^2 \right] - \rho C_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{\kappa} \quad (6.29)$$

Versión "con esfuerzos de Reynolds" (ceR):

La ecuación de ϵ que se utiliza en el modelo modificado, acoplado con el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds es:

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left(C_\epsilon \rho \frac{\kappa}{\epsilon} \overline{v'v'} \frac{\partial \epsilon}{\partial y} \right) - C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{\kappa} \overline{u'v'} \frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial y} - C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{\kappa} \overline{w'v'} \frac{\partial \rho \bar{w}}{\partial y} - \rho C_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{\kappa} \quad (6.30)$$

Constantes del modelo de turbulencia y condiciones de frontera

El valor de cada una de las constantes que aparecen en el modelo de turbulencia de dos ecuaciones, no es universal. Algunas de las constantes se han obtenido de manera experimental y otras se han encontrado a partir de un proceso de "optimización computacional", de tal manera que la simulación numérica reproduzca apropiadamente los datos experimentales. El valor de la constante c_μ , se obtiene a partir de la condición

³En el modelo de turbulencia κ - ϵ modificado por DyE, las modificaciones únicamente se realizaron en el término de producción de disipación turbulenta de la ecuación de ϵ , por lo que la ecuación de κ es la misma que el modelo estándar. Es conveniente recordar que en el modelo modificado por DyE, no se incluyó el término de producción de energía turbulenta debido a los efectos de flotación

que prevalece en la capa logarítmica y que al mismo tiempo, constituye la condición de frontera de la energía cinética turbulenta en el modelo computacional, ver ec. (3.72):

$$c_{\mu} = \left(\frac{u_{\tau}^2}{\kappa} \right)^2 = \left(\frac{-\overline{u'v'}}{\kappa} \right)^2 \quad (6.31)$$

La constante $c_{\mu}=0.09$, se obtiene a partir de mediciones llevadas a cabo en canales, ductos y flujos en capa límite a escala laboratorio, este valor se ha utilizado ampliamente para resolver problemas de la ingeniería mecánica. Mediciones tomadas en la capa superficial de la atmósfera, indican que: $c_{\mu}=0.0256$ (Detering and Etling, 1985). Sin embargo, en la literatura se reporta también, que mediciones en la capa superficial revelan valores de c_{μ} en el rango 0.032-0.067 (Andrén, 1990).

En la ecuación de la energía turbulenta del modelo estándar ec. (6.27), se requiere especificar únicamente la constante σ_{κ} , esta constante representa un tipo especial de número de Prandtl. Para seleccionar el valor de σ_{κ} , se supone que las difusividades de la energía térmica y de la energía turbulenta, son aproximadamente semejantes, el valor que se utiliza regularmente es $\sigma_{\kappa}=0.74$.

Mediciones llevadas a cabo en turbulencia de malla (grid turbulence) indican que para números de Reynolds grande, la energía turbulenta varía inversamente con la distancia a la malla. Experimentalmente se ha observado que el valor de la constante $C_{2\epsilon}$ se encuentra en el intervalo 1.8-2. El valor seleccionado en el modelo estándar es $C_{2\epsilon}=1.9$.

En la región cercana a la superficie (región logarítmica), la convección de ϵ es despreciable y existen condiciones de equilibrio (producción=disipación). Si estas condiciones se sustituyen en la ecuación de ϵ ec. (6.29), se llega a la siguiente expresión que establece la relación entre las constantes $C_{1\epsilon}$ y σ_{ϵ} :

$$C_{1\epsilon} = C_{2\epsilon} - \frac{\kappa_o^2}{\sigma_{\epsilon} c_{\mu}^{1/2}} \quad (6.32)$$

En la ec. (6.32), el valor de las constantes $C_{1\epsilon}$ y σ_{ϵ} se determina a partir de un proceso de "optimización por computadora". El valor de estas constantes en el modelo estándar es: $C_{1\epsilon}=1.13$ y $\sigma_{\epsilon}=1.29$.

El conjunto de constantes del modelo estándar utilizado en el presente trabajo (y por DyE) para simular la capa límite atmosférica, es el siguiente:

$$c_{\mu} = 0.0256, \quad C_{1\epsilon} = 1.13, \quad C_{2\epsilon} = 1.9, \quad \sigma_{\kappa} = 0.74, \quad \sigma_{\epsilon} = 1.29 \quad (6.33)$$

Las condiciones de frontera en la corriente libre (fuera de la capa límite) son: $\bar{u}(y \rightarrow \infty) = u_g, \bar{w}(y \rightarrow \infty) = w_g = \kappa(y \rightarrow \infty) = \epsilon(y \rightarrow \infty) = 0$.

Las condiciones de frontera de las ecuaciones de cantidad de movimiento, energía térmica, κ y ϵ se establecieron en el capítulo 3. Se mencionó que la frontera del dominio en estudio se localiza en la capa superficial (entre 10 m y 50 m de altura), donde el perfil de velocidades y temperaturas es logarítmico y se satisface la condición de esfuerzo cortante y flujo de calor constante.

Las leyes que rigen el comportamiento del flujo en la capa superficial son (aunque el lector puede consultar el capítulo 3, aquí se presentan las condiciones de frontera de manera resumida):

$$\bar{u}(y_p) = \frac{u_{\tau z}}{\kappa_o} \left(\ln \left(\frac{y_p}{y_o} \right) - \Psi_m(\xi) \right) \quad (6.34)$$

$$\bar{w}(y_p) = \frac{u_{\tau z}}{\kappa_o} \left(\ln \left(\frac{y_p}{y_o} \right) - \Psi_m(\xi) \right) \quad (6.35)$$

$$\bar{\theta}(y_p) - \bar{\theta}_s = \frac{\theta_{\tau}}{\kappa_o} \left(\ln \left(\frac{y_p}{y_o} \right) - \Psi_h(\xi) \right) \quad (6.36)$$

$$\kappa(y_p) = \frac{u_{\tau}^2}{c_{\mu}^{1/2}} \quad (6.37)$$

$$\epsilon(y_p) = \frac{u_{\tau}^3 \phi_m}{\kappa_o y_p} + \beta g \frac{q}{\rho c_p} \quad (6.38)$$

donde: y_p es un punto localizado en la capa superficial (frontera del dominio en estudio desde el punto de vista computacional) y y_o es la rugosidad de la superficie. La forma de las funciones universales $\phi_{m,h}$ y $\Psi_{m,h}$ puede consultarse en el apéndice C.

Para comparar los resultados del modelo que se presenta en este trabajo con los resultados de DyE, y con los datos experimentales tomados sobre la ciudad de Leipzig en condiciones de atmósfera neutra (Lettau, 1962), (Pasquill, 1974), se requiere especificar el valor de la velocidad geostrófica, el parámetro de rugosidad y_o y la latitud ϕ en donde se localiza la región de estudio. De acuerdo a Lettau (Lettau, 1962), la velocidad del viento fuera de la capa límite es: $u_g=17.5$ m/s, $w_g=0$ m/s y la latitud de la ciudad de Leipzig es: $\phi=51.4^\circ$. El parámetro de rugosidad que se utiliza en este trabajo es el mismo que utilizaron DyE, es decir: $y_o=0.3$ m. En la simulación, el aire tiene las siguientes propiedades: (a) densidad $\rho=1.177$ kg/m³, (b) viscosidad dinámica $\mu=1.983 \times 10^{-5}$ kg/m-s, (c) calor específico $c_p=1.005 \times 10^3$ J/kg K, (d) conductividad térmica $k_T=0.02624$ W/m K y (e) número de Prandtl $Pr=0.708$.

6.3.2 Simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras, utilizando el modelo κ - ϵ estándar

Uno de los objetivos principales del trabajo de DyE, fue investigar si el modelo κ - ϵ estándar, utilizado ampliamente en la simulación de flujos turbulentos en ingeniería, podía ser aplicado en la capa límite atmosférica. DyE mostraron que al utilizar las constantes estándar ec. (6.33); el modelo κ - ϵ proporciona resultados que no coinciden con los experimentos cuando la atmósfera se encuentra en condiciones neutras. En la figura 6.13 se presenta la solución de las ecuaciones de cantidad de movimiento ecs. (6.25 y 6.26), para una atmósfera neutra y en condiciones de estado estacionario. En esta condición, en cualquier punto de la capa límite, existe equilibrio entre las fuerzas de fricción ocasionadas por la presencia de la superficie terrestre, la fuerza de Coriolis causada por la rotación de la tierra y la fuerza que surge debido al gradiente de la presión en la dirección transversal (el gradiente de la presión en la dirección longitudinal x es cero, ya que la velocidad geostrófica $w_g=0$, ver ec. (6.23)).

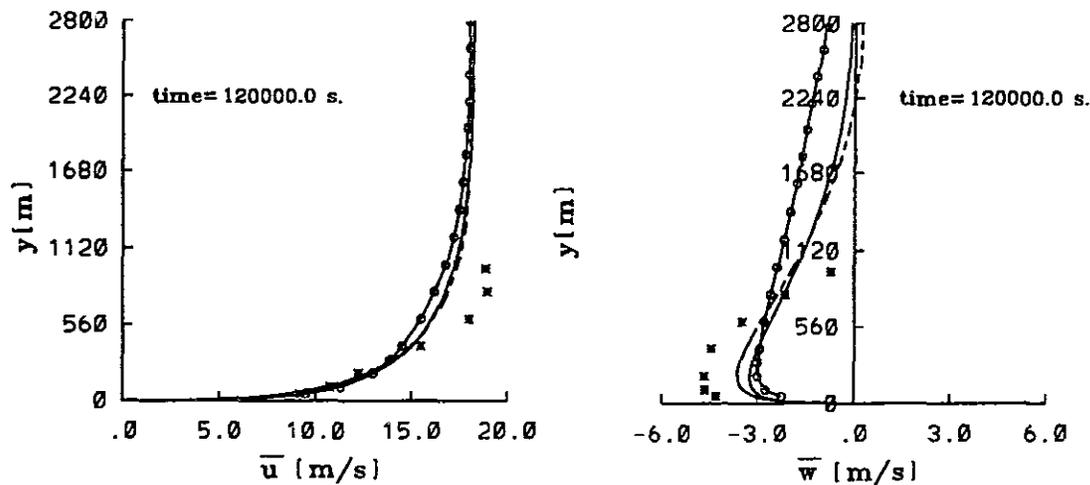


Figura 6.13: Variación de las velocidades medias \bar{u} y \bar{w} con respecto a la altura, y su comparación con las mediciones sobre la ciudad de Leipzig (*) (Lettau, 1962) y resultados numéricos de DyE (o) (Detering and Etling, 1985). Modelo κ - ϵ standard. La línea continua representa los resultados con la versión seR, la línea discontinua representa los resultados con la versión ceR.

En la figura 6.13 se muestran las velocidades medias \bar{u} y \bar{w} en el interior de la capa límite. En esta figura se presentan: (a) las mediciones sobre la ciudad de Leipzig (Lettau, 1962), (Pasquill, 1974), (b) los resultados de DyE obtenidos con el modelo estándar y con las constantes definidas por la ec. (6.33) y (c) los resultados del presente estudio obtenidos a partir del uso de las dos versiones del modelo κ - ϵ : "sin esfuerzos de Reynolds" (seR), ecuaciones (6.27 y 6.29) y "con esfuerzos de Reynolds" (ceR), ecuaciones (6.28 y 6.30). En la figura se observa que en los datos de la ciudad de Leipzig, el efecto de la aceleración de Coriolis (entre 300 m y 1000 m de altura) es más grande que el efecto de los esfuerzos turbulentos $\overline{u'v'}$, ya que la velocidad \bar{u} es mayor que la velocidad geostrofica u_g . Los tres modelos (DyE, seR y ceR), indican que la velocidad \bar{u} se incrementa con la altura, desde cero en la superficie hasta un valor que se aproxima a la velocidad geostrofica u_g a una altura de 2,800 m, es decir, en las simulaciones, el espesor de la capa límite es muy grande. La razón de este comportamiento se debe a que en los tres modelos, los esfuerzos cortantes $\overline{u'v'}$ son de mucho mayor magnitud que la fuerza de Coriolis, lo que trae como consecuencia, que la influencia de la superficie terrestre se transmita hasta las capas superiores de la atmósfera. El comportamiento del campo de velocidades y su relación con las características turbulentas del flujo, se comprenderá con más detalle cuando se presenten los resultados de la energía cinética turbulenta y la viscosidad turbulenta. En la figura 6.13, es posible observar que existe diferencia entre los valores de DyE y los valores obtenidos con las dos versiones del modelo propuesto en este trabajo. La diferencia en los resultados numéricos, se debe probablemente al tipo de malla utilizada para discretizar el dominio y al tiempo que

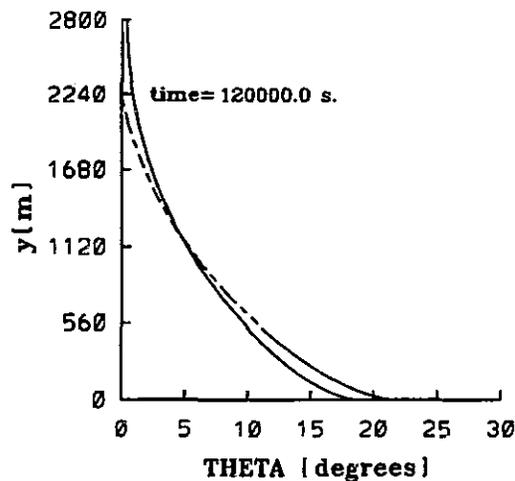


Figura 6.14: Variación del ángulo θ formado por las velocidades horizontales \bar{u} y \bar{w} . Modelo κ - ϵ standard. Línea continua versión seR, línea discontinua versión ceR.

dura la simulación. En cuanto a la discretización, los resultados que se muestran en la figura 6.13 (y en las siguientes figuras relacionadas con atmósfera en condiciones neutras), se obtuvieron a partir de dividir la región de estudio en una malla que tiene 60 celdas en la dirección vertical (en la dirección vertical, la longitud del dominio es de 3,000 m). La discretización cerca de la superficie, es más fina que en la parte exterior de la capa límite. Los primeros 30 nodos, se encuentran distribuidos de manera uniforme en los primeros 100 m de la capa límite. Los siguientes 20 nodos, distribuidos también de manera uniforme, representan el intervalo entre los 100 m y 500 m de altura, y los 10 nodos restantes (con distribución uniforme), cubren el intervalo entre los 500 m y los 3,000 m de altura. En la simulación, el fluido se encuentra en reposo (condición inicial) antes de ser sometido a la aceleración de Coriolis, al gradiente de presiones y a los esfuerzos cortantes. Durante el proceso de cómputo se utilizó un incremento de tiempo $\Delta t=10$ s, y se llevaron a cabo 12,000 intervalos de tiempo, de tal manera que el tiempo de simulación total fue de: $t = 120,000$ s. El tiempo de cómputo necesario para simular la capa límite con la versión seR es aproximadamente de 3 hrs de CPU en una computadora Silicon Graphics con procesador R 10,000. El tiempo de cómputo requerido para simular la capa límite con la versión ceR, es aproximadamente 10 hrs de CPU. Los resultados de la versión ceR que aparecen en la figura 6.13, se obtuvieron utilizando el valor de la constante (que aparece en el término difusivo de la ecuación (6.30)) $C_\epsilon=0.18$.

En la figura 6.13, se muestra también la distribución de velocidades en la dirección transversal \bar{w} . Es posible observar que las velocidades transversales de DyE cerca de la superficie, son muy pequeñas en relación a los datos observados. Esto significa que los esfuerzos cortantes $w'v'$ son grandes en relación a la acción combinada del gradiente de presión y la aceleración de Coriolis. DyE mencionan que en su simulación, la velocidad

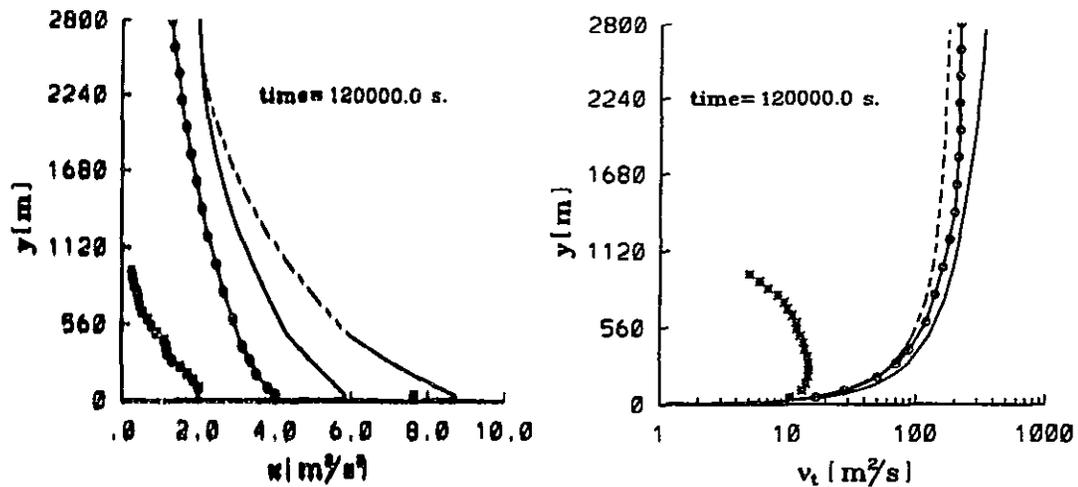


Figura 6.15: Variación de la energía cinética turbulenta κ y de la viscosidad turbulenta ν_t con respecto a la altura. Descripción de las curvas como en la figura 6.13.

\bar{w} , adquiere la velocidad geostrofica $w_g=0$, cerca de los 12 km de altura. En la dirección transversal, el efecto de la fuerza de Coriolis en conjunto con el gradiente de presión, disminuye conforme la velocidad $\bar{u} \rightarrow u_g$ ver ec. (6.26), si DyE obtienen velocidades transversales a una altura de 12 km, significa que: (a) los esfuerzos cortantes $\overline{u'v'}$ son de gran magnitud y (b) el espesor de la capa límite es muy grande. Esto trae como consecuencia, que la velocidad \bar{u} nunca sea igual a u_g , por lo que el primer término del lado derecho de la ecuación (6.26), es de mucho mayor magnitud que el segundo término de la misma ecuación, el cual involucra los esfuerzos cortantes $\overline{w'v'}$. En la figura 6.13 el modelo seR, predice velocidades transversales $\bar{w} \rightarrow 0$ en la parte exterior de la capa límite. Con la versión ceR, la velocidad transversal \bar{w} alcanza la velocidad $w_g=0$ aproximadamente a los 2,240 m de altura. En la región inferior de la capa límite, la versión ceR calcula que la máxima velocidad transversal se localiza alrededor de los 250 m de altura. Con el modelo ceR, se obtiene la mayor velocidad transversal cerca de la superficie, por lo que se supone que el esfuerzo cortante $\overline{w'v'}$, es menor al evaluado por los otros dos modelos. Es conveniente mencionar, que la diferencia entre los resultados de DyE y las versiones ceR y seR, no debe ser causa de preocupación, ya que la solución del sistema de ecuaciones es fuertemente dependiente de las condiciones iniciales y del tiempo de simulación. El autor encontró que la solución numérica obtenida con las dos versiones del modelo, oscila grandemente antes de alcanzar su estado estacionario. Para tiempos menores a lo 120,000 s, la solución adquiere en múltiples ocasiones el perfil de velocidades transversales \bar{w} mostrado por DyE. Desafortunadamente, DyE no presentan detalles del tipo de malla que utilizaron, de las condiciones iniciales y del tiempo de cómputo requerido en su simulación. Es posible que la solución de DyE no represente la condición de estado estacionario.

En la figura 6.14, se muestra el ángulo θ formado por las dos componentes hori-

zontales de la velocidad. El valor experimental del ángulo θ cerca de la superficie es de 26.1° (Lettau, 1962), (Pasquill, 1974). DyE reportan un valor de θ en la capa superficial de 14.2° (menor velocidad transversal \bar{w} , ver figura 6.13). Con la versión ceR se obtiene que, $\theta \approx 21.0^\circ$, mientras que con la versión seR, $\theta \approx 17.5^\circ$, lo cual coincide con lo observado en la figura 6.13 ya que la versión ceR, predice mayor velocidad transversal \bar{w} cerca de la superficie.

En la figura 6.15, se muestra la energía cinética turbulenta κ y la viscosidad turbulenta ν_t en el interior de la capa límite. En la figura se presentan los datos de la ciudad de Leipzig, los resultados de DyE y la simulación con las dos versiones seR y ceR. Los datos "experimentales" de κ que aparecen en la figura 6.15, se obtuvieron a partir de: (a) los valores experimentales de ν_t que presentan DyE (los cuales coinciden con los reportados por Pasquill (Pasquill, 1974)), y (b) una longitud de mezcla l_m "experimental" que reporta DyE (desafortunadamente DyE no mencionan la forma en que obtuvieron los valores de l_m). Si se conocen los valores experimentales de ν_t y l_m , es posible obtener la distribución de la energía turbulenta en el interior de la capa límite, a partir de la hipótesis de Prandtl-Kolmogorov:

$$\kappa = \left(\frac{\nu_t}{c_o l_m} \right)^2 \quad (6.39)$$

donde c_o es una constante, evaluada a partir de:

$$c_o = c_\mu^{1/4} = 0.0256^{1/4} = 0.4 \quad (6.40)$$

En la figura 6.15, el valor "experimental" de κ a los 50 m de altura (capa superficial) es: $\kappa=7.6 \text{ m}^2/\text{s}^2$ (si $\nu_t=10.5 \text{ m}^2/\text{s}$, $l_m=9.5 \text{ m}$ (Detering and Etling, 1985), y $c_o=0.4$). Si se utiliza el valor de $c_\mu=0.067$ que menciona Andrén (Andrén, 1990), el valor de la energía cinética turbulenta a 50 m de altura es: $\kappa=4.7 \text{ m}^2/\text{s}^2$ (si $c_o=0.508$). DyE no presentan datos experimentales de la distribución de κ por lo que no es posible conocer la energía turbulenta "experimental" con la cual compararon sus resultados. DyE se limitaron a comparar entre sí mismas, las soluciones numéricas obtenida a partir de tres modelos distintos. En la capa superficial, el modelo ceR proporciona valores de $\kappa \approx 8.8 \text{ m}^2/\text{s}^2$, además la variación con respecto a la altura de la energía turbulenta es mucho mayor que la que se obtiene con los modelos DyE y seR. Es posible observar que los resultados de DyE y los resultados de la versión seR, presentan en la mayor parte de la capa límite, la misma variación de κ con respecto a la altura. Sin embargo, cerca de la superficie el modelo seR predice un gradiente mayor. Los tres modelos (DyE, seR y ceR), no disminuyen a cero el valor de la intensidad de turbulencia, tal y como lo indican los valores experimentales. En la figura 6.15, la viscosidad turbulenta ν_t de los tres modelos es mucho mayor que el valor experimental. Los tres modelos presentan un comportamiento lineal de ν_t cerca de la superficie, sin embargo, mientras que el valor experimental adquiere un valor máximo (alrededor de los 250 m de altura), y después disminuye, los resultados numéricos muestran que la viscosidad ν_t sigue aumentando de valor en la región superior de la capa límite. En la figura 6.15 se observa que la energía turbulenta κ que se obtiene con ceR, es de mayor magnitud (en la mayor parte de la capa límite) que la que se obtiene con seR, sin embargo, la viscosidad turbulenta ν_t presenta el comportamiento contrario. La razón de este comportamiento es que la

versión "con esfuerzos de Reynolds", predice mayor disipación de energía ϵ (la gráfica de ϵ no se muestra), por lo que la viscosidad turbulenta se reduce. Si la viscosidad ν_t es grande, los esfuerzos cortantes $\overline{u'v'}$ y $\overline{w'v'}$ son también grandes, por lo que el flujo tiene una gran capacidad de transmitir cantidad de movimiento en la dirección vertical. Esto permite que la velocidad \bar{u} sea igual a u_g a grandes alturas y se presente una capa límite de grandes dimensiones (gran influencia de la superficie), ver figura 6.13. Por otro lado, cerca de la superficie, la viscosidad ν_t es grande por lo que la velocidad transversal es pequeña. La velocidad de fricción u_τ calculada a partir de la ec. (3.62), en el modelo seR es: $u_\tau=0.77$ m/s (donde: $u_{\tau_x}=0.67$ m/s y $u_{\tau_z}=0.38$ m/s), en la versión ceR $u_\tau=0.78$ m/s (donde: $u_{\tau_x}=0.67$ m/s y $u_{\tau_z}=0.41$ m/s). El valor observado de la velocidad de fricción es: $u_\tau=0.65$ m/s, DyE obtienen un valor de $u_\tau=0.8$ m/s.

De acuerdo a lo que se presenta en las figuras 6.13 a 6.15, puede decirse que el modelo κ - ϵ estándar (al utilizar las constantes definidas en la ec. (6.33)), no reproduce adecuadamente los datos experimentales ya que se obtiene lo siguiente: (a) los valores de ν_t y de κ son grandes, (b) la velocidad de fricción u_τ es grande, (c) la velocidad transversal \bar{w} es pequeña, (d) el ángulo de giro θ es pequeño y (e) la capa límite es muy grande.

Es conveniente enfatizar que la versión "con esfuerzos de Reynolds", proporciona resultados muy alentadores, ya que al sustituir los esfuerzos de Reynolds (calculados con un modelo algebraico) directamente en la ecuación de κ ec. (6.28) y en la ecuación de ϵ ec. (6.30), los resultados que se obtienen son muy similares (cualitativa y cuantitativamente) al modelo de DyE y al modelo seR, lo que indica que el modelo se comporta satisfactoriamente.

6.3.3 Simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras, utilizando el modelo κ - ϵ con constantes modificadas

En la sección anterior, se comprobó que el modelo κ - ϵ estándar proporciona valores muy grandes de la viscosidad turbulenta ν_t , si las constantes que se utilizan son las que se muestran en la expresión (6.33). Es claro observar, que el comportamiento de ν_t se debe a que el valor de κ es grande, y el valor de ϵ es pequeño en la mayor parte de la capa límite. Con el propósito de tener mayor disipación de energía, DyE propusieron modificar la constante $C_{1\epsilon}$, la cual representa el coeficiente del término de producción de disipación de las ecuaciones (6.29 y 6.30). En el modelo estándar, la diferencia de las constantes $C_{2\epsilon}$ y $C_{1\epsilon}$ es: $C_{2\epsilon}-C_{1\epsilon}=1.9-1.13=0.77$, por lo que utilizando la relación (6.32), el número de Prandtl de la disipación es: $\sigma_\epsilon=1.29$, ver la expresión (6.33). DyE propusieron utilizar el valor $C_{1\epsilon}=1.83$, por lo que: $C_{2\epsilon}-C_{1\epsilon}=1.9-1.83=0.07$ y $\sigma_\epsilon=14.29$. Es decir, DyE proponen incrementar el valor de la producción de disipación y disminuir la difusión turbulenta de la ecuación (6.29). Es de hacer notar que los términos de producción de disipación de la ecuación (6.30) (la cual es utilizada por la versión ceR), sí se alteran directamente debido al cambio de la constante $C_{1\epsilon}$, sin embargo, el término de difusión turbulenta de la ec. (6.30):

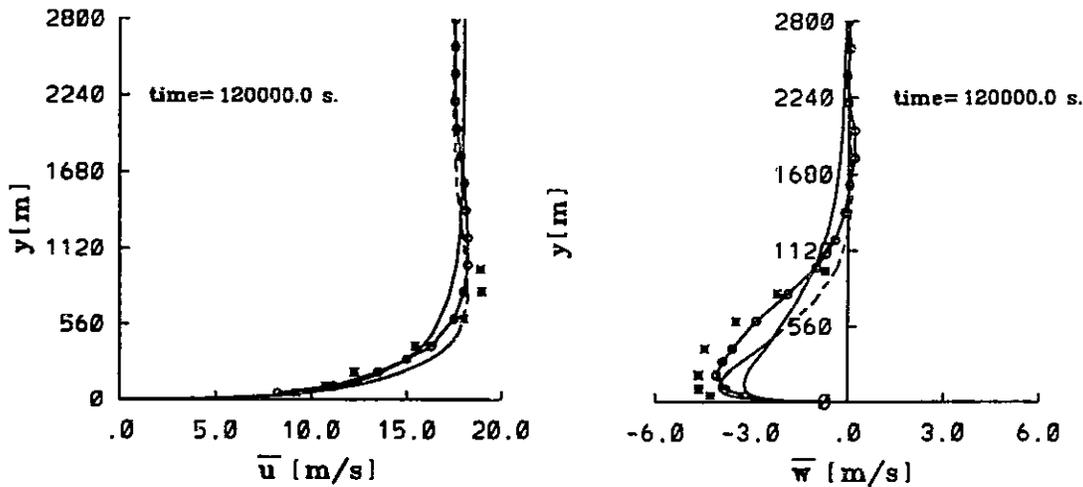


Figura 6.16: Variación de las velocidades medias \bar{u} y \bar{w} con respecto a la altura, y su comparación con las mediciones sobre la ciudad de Leipzig (*) (Lettau, 1962) y resultados numéricos de DyE (o) (Detering and Etling, 1985). Modelo κ - ϵ standard con la constante $C_{1\epsilon}=1.83$. La línea continua representa los resultados con la versión seR ($\sigma_\epsilon=14.29$), la línea discontinua representa los resultados con la versión ceR.

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(C_\epsilon \rho \frac{\kappa}{\epsilon} \overline{v'v'} \frac{\partial \epsilon}{\partial y} \right) \quad (6.41)$$

no se altera y permanece con la misma formulación.

Con el propósito de observar el comportamiento de las versiones seR y ceR cuando cambian las constantes $C_{1\epsilon}$ y σ_ϵ del modelo κ - ϵ , se realizaron simulaciones de la capa límite atmosférica con las mismas condiciones que se indicaron en la sección anterior. Los resultados de los modelos seR y ceR se presentan en las figuras 6.16 a 6.19 junto con los resultados de DyE (con las constantes modificadas) y los valores experimentales.

Para presentar con mayor claridad los resultados que aparecen en las figuras 6.16 a 6.19, se hace referencia en primer lugar a los resultados obtenidos con el modelo seR y posteriormente se discuten los resultados del modelo ceR.

Resultados del modelo seR ("sin esfuerzos de Reynolds"):

En la figura 6.16, se observa que el modelo seR continúa proporcionando un valor grande la capa límite atmosférica (gran esfuerzo cortante), ya que la velocidad \bar{u} es igual a la velocidad geostrofica u_g a una altura aproximadamente de 2,800 m. La velocidad transversal, indica también que existe gran viscosidad turbulenta en la capa límite ya que \bar{w} es pequeña y adquiere la velocidad $w_g=0$, a una altura de 2,800 m aproximadamente. El ángulo de giro θ que se muestra en la figura 6.17, es pequeño en la región cercana a la superficie ($\theta \approx 18.5^\circ$), ya que la velocidad de fricción es $u_\tau=0.66$ m/s (donde $u_{\tau_x}=0.57$ m/s y $u_{\tau_z}=0.33$ m/s). El ángulo de giro y la velocidad de fricción que obtuvieron DyE son: $\theta=22.2^\circ$ y $u_\tau=0.58$ m/s respectivamente. En la figura

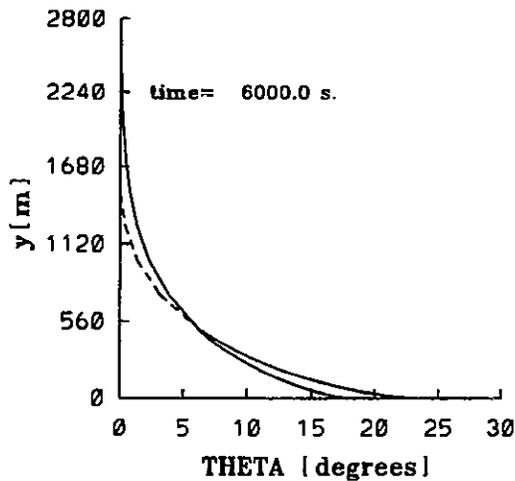


Figura 6.17: Variación del ángulo θ formado por las velocidades horizontales \bar{u} y \bar{w} . Modelo κ - ϵ standard con la constante $C_{1\epsilon}=1.83$. Línea continua versión seR ($\sigma_\epsilon=14.29$), línea discontinua versión ceR.

6.18, se puede observar que la intensidad de turbulencia se mantiene aproximadamente constante entre los 1,120 m y los 2,800 m de altura. En la misma figura, se observa que la viscosidad turbulenta crece en forma lineal (aproximadamente), hasta alcanzar valores del orden de $900 \text{ m}^2/\text{s}$ (los cuales son incluso mayores a los presentados en la sección anterior). El incremento lineal de ν_t , entre los 1,120 m y los 2,800 m de altura, se explica a partir de lo siguiente: si $\kappa \approx \text{cte}$, la disipación de energía está disminuyendo con la altura (ver figura 6.19), lo que indica que la difusión turbulenta de ϵ en la dirección vertical es pequeña (es bien sabido que el término de difusión turbulenta motiva un mezclado del flujo, por lo que la variable dependiente adquiere un valor aproximadamente homogéneo en la mayor parte de la capa límite).

En la figura 6.19, se observa que la $\partial\epsilon/\partial y$ obtenida con el modelo seR es mucho menor que la que se obtiene con el modelo ceR, ya que mientras que ϵ evaluada con seR es cero aproximadamente a los 2800 m, ϵ evaluada con ceR es cero a los 1120 m de altura. Lo anterior es muy importante ya que con el modelo seR, la disipación de energía que se produce en la región cercana a la superficie no se difunde en la dirección vertical por lo que los niveles de energía turbulenta son altos. Por el contrario, con el modelo ceR, el gradiente de ϵ es grande lo que implica que existe gran difusión turbulenta de disipación en la dirección vertical. Esto último trae como consecuencia que se tengan niveles bajos de energía turbulenta, tal como se muestra en la figura 6.18.

Resultados del modelo ceR ("con esfuerzos de Reynolds"):

En la figura 6.16, se muestra que en la parte inferior de la capa límite, el efecto de la aceleración de Coriolis, influye de manera significativa sobre la velocidad longitudinal \bar{u} . Esto se nota, ya que el flujo adquiere mayor velocidad \bar{u} (por arriba del valor experi-

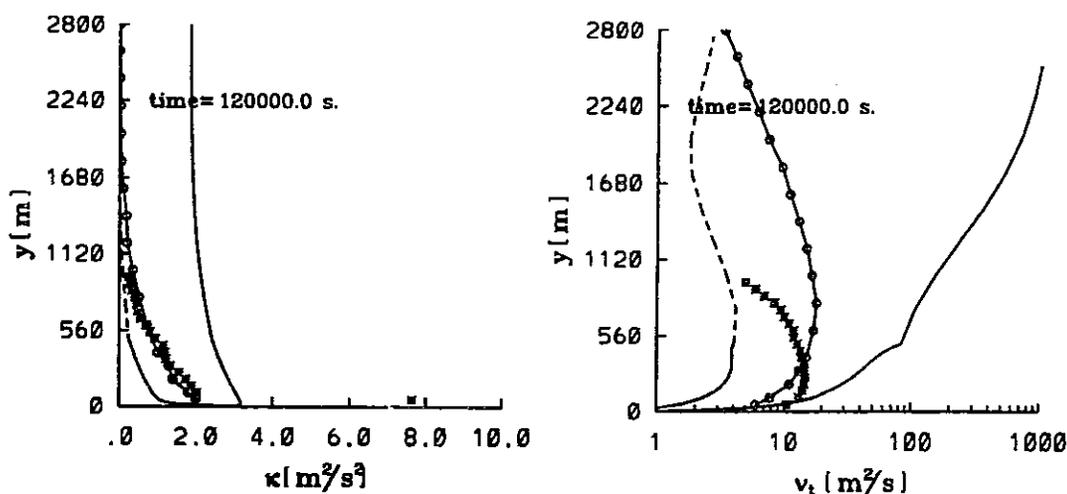


Figura 6.18: Variación de la energía cinética turbulenta κ y de la viscosidad turbulenta ν_t con respecto a la altura. Modelo κ - ϵ standard con la constante $C_{1\epsilon}=1.83$. Descripción de las curvas como en la figura 6.16.

mental y de los resultados de DyE) entre los 100 y 500 m de altura. El flujo también se acelera en la dirección transversal, lo que indica que los niveles del esfuerzo cortante se reducen en relación a la solución del modelo seR. En la figura 6.16 y 6.17, la espiral de Ekman termina aproximadamente a los 1,260 m de altura. El ángulo de giro que se obtiene cerca de la superficie es: $\theta \approx 23^\circ$, la velocidad de fricción es: $u_\tau = 0.58$ m/s (donde: $u_{\tau_x} = 0.48$ m/s y $u_{\tau_z} = 0.33$ m/s). DyE reportan que $\theta = 22.2^\circ$ y $u_\tau = 0.58$ m/s.

En la figura 6.18, la energía cinética turbulenta disminuye rápidamente en la dirección vertical y adquiere valores muy pequeños a los 1,120 m de altura. De acuerdo a lo que se explicó en párrafos anteriores, los niveles bajos de κ se deben a que existe gran difusión turbulenta de ϵ en la dirección vertical. Es decir, el término difusivo de ϵ , el cual se representa en la ecuación (6.41), es de importancia en la región cercana a la superficie. Es conveniente recordar que este término no se modificó al cambiar las constantes del modelo ⁴.

En la figura 6.18, la viscosidad turbulenta ν_t es más pequeña, en la mayor parte de la capa límite, que los valores medidos y los valores de DyE. La forma del coeficiente de difusión ν_t es semejante al que se presenta en la realidad, sin embargo, por arriba de los 1,800 m, ν_t presenta una tendencia a incrementarse. Esto se debe principalmente a que a alturas mayores a los 1,800 m, tanto la energía turbulenta (ver figura 6.18) como la disipación (ver figura 6.19), adquieren valores muy cercanos a cero. Esto indica que

⁴El autor desea mencionar, que se realizaron experimentos numéricos con el modelo "sin esfuerzos de Reynolds" (seR) incluyendo el valor original de la constante $\sigma_\epsilon = 1.29$ y el valor modificado de $C_{1\epsilon} = 1.83$. Con el valor de $\sigma_\epsilon = 1.29$, la difusividad turbulenta de ϵ en la ecuación (6.29), se aumenta a los mismos niveles proporcionados por el modelo "con esfuerzos de Reynolds" (ceR) con la constante $C_{1\epsilon} = 1.83$, por lo que los dos modelos proporcionaron resultados de las variables medias y turbulentas muy semejantes entre sí.

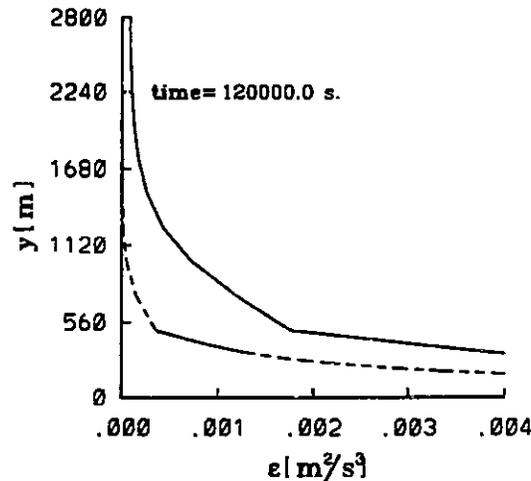


Figura 6.19: Variación de la disipación de energía turbulenta ϵ . Modelo κ - ϵ standard con la constante $C_{1\epsilon}=1.83$. Línea continua versión seR ($\sigma_\epsilon=14.29$), línea discontinua versión ceR.

el espesor de la capa límite planetaria en condiciones neutras es: $H \approx 1800$ m.

Con los resultados que se muestran en esta sección, puede concluirse que aunque el modelo κ - ϵ (con las constantes modificadas), proporciona resultados que se acercan a los datos experimentales, este modelo no es el adecuado para predecir el comportamiento de la capa límite atmosférica.

6.3.4 Simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras, utilizando el modelo κ - ϵ modificado

En la sección anterior, se mostró que al modificar el valor de las constantes del modelo κ - ϵ , los resultados cambian de manera significativa. Además se comprobó que un incremento en la producción de disipación y una disminución de la difusión turbulenta de ϵ , no es suficiente para reproducir los resultados experimentales de la ciudad de Leipzig. Con el propósito de mejorar los resultados obtenidos con su modelo matemático, DyE propusieron incrementar la producción de disipación de la energía turbulenta, en proporción directa al tamaño de los grandes remolinos turbulentos (l_m). Se sabe que en la atmósfera, la escala de longitud (l_m) cerca de la superficie se incrementa linealmente con la altura, y se aproxima a un valor constante en la parte superior de la capa límite (Pasquill, 1974). DyE, incorporaron la escala de longitud de los remolinos turbulentos en la producción de disipación, a partir de definir el coeficiente $C'_{1\epsilon}$, el cual sustituye a $C_{1\epsilon}$ y tiene la forma:

$$C'_{1\epsilon} = \frac{C_{1\epsilon} l_m}{h} \quad (6.42)$$

donde

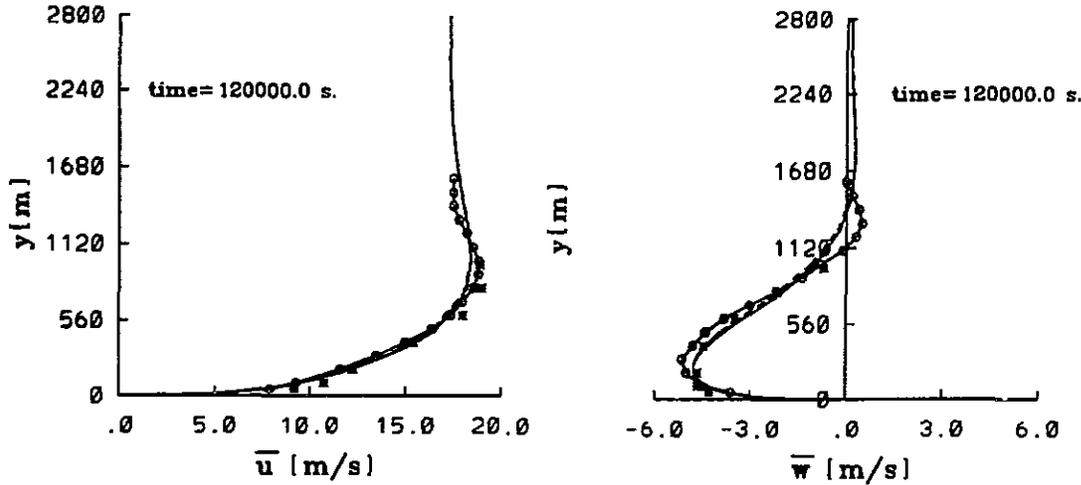


Figura 6.20: Variación de las velocidades medias \bar{u} y \bar{w} con respecto a la altura, y su comparación con las mediciones sobre la ciudad de Leipzig (*) (Lettau, 1962) y resultados numéricos de DyE (o) (Detering and Etling, 1985), $C_{4\epsilon}=0.0015$. Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación. La línea continua representa los resultados con la versión seR, $C_{4\epsilon}=0.0025$, la línea discontinua representa los resultados con la versión ceR, $C_{\epsilon}=0.24$.

$$l_m = C_{3\epsilon} \frac{\kappa^{3/2}}{\epsilon} \quad (6.43)$$

Esta expresión de l_m , es la que se utiliza en el modelo κ - ϵ , para representar la escala de longitud en la definición de la viscosidad turbulenta ν_t ⁵. En la ec. (6.43), la constante $C_{3\epsilon}$ adquiere el valor: $C_{3\epsilon}=c_0^3=0.4^3=0.064$.

En la ec. (6.42), h es una longitud característica de la capa límite, definida por:

$$h = C_{4\epsilon} \frac{u_\tau}{f_c} \quad (6.44)$$

donde $C_{4\epsilon}=0.0015$.

DyE definieron el valor de la constante $C_{4\epsilon}$, después de llevar a cabo un proceso de optimización de sus resultados numéricos. Durante el proceso de optimización, DyE utilizaron las constantes "originales" del modelo estándar, ver expresión (6.33), y ajustaron el valor de $C_{4\epsilon}$, hasta que sus resultados coincidieron con los datos experimentales.

⁵Es conveniente recordar que la viscosidad turbulenta ν_t , se define como el producto de la escala de velocidad y la escala de longitud de los remolinos turbulentos, es decir: $\nu_t = c_0 \kappa^{1/2} l_m$ (hipótesis de Prandtl-Kolmogorov). Si se sustituye la ec. (6.43) en la definición de la viscosidad turbulenta, se obtiene la típica expresión de ν_t del modelo κ - ϵ , $\nu_t = c_\mu \kappa^2 / \epsilon$, donde: $c_\mu = c_0 C_{3\epsilon}$

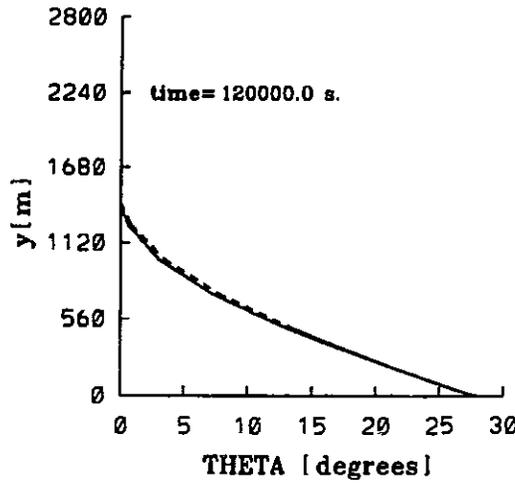


Figura 6.21: Variación del ángulo θ formado por las velocidades horizontales \bar{u} y \bar{w} . Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación. Línea continua versión seR, línea discontinua versión ceR. Descripción de las curvas como en la figura 6.20.

Si se sustituyen las expresiones (6.43) y (6.44) en la ecuación (6.42), el nuevo coeficiente de la producción de disipación tiene la forma:

$$C'_{1\epsilon} = C_{1\epsilon} \frac{C_{3\epsilon} \kappa^{3/2} f_c}{\epsilon C_{4\epsilon} u_\tau} \quad (6.45)$$

En las secciones anteriores, se mostró que los resultados de DyE no coinciden con los resultados de las dos versiones (seR y ceR) del modelo computacional propuesto en este trabajo. A pesar de que la versión seR es en general el mismo modelo que el presentado por DyE, las pequeñas variantes en la formulación de ambos modelos son motivo de diferencia en los resultados (por ejemplo: la velocidad de fricción u_τ se determina como la resultante de las velocidades de fricción en las direcciones x y z ver ec. (3.56). DyE no mencionan como evaluaron esta velocidad de fricción por lo que se supone que únicamente utilizaron la componente de la velocidad de fricción en la dirección de x). En base a lo anterior, en este trabajo se procedió también a optimizar el valor de la constante $C_{4\epsilon}$, y el valor de la constante C_ϵ del modelo ceR ver la ecuación (6.30).

Los resultados que se presentan en las figuras 6.20 a 6.23, se obtuvieron utilizando el coeficiente $C'_{1\epsilon}$ (ver ec. (6.45)) en las ecuaciones de disipación (ec. (6.29) para el modelo seR y ec. (6.30) para el modelo ceR). Los resultados con el modelo modificado se obtuvieron utilizando las constantes "originales" que se presentan en la expresión (6.33) y las constantes "optimizadas", tienen los siguientes valores: $C_{4\epsilon}=0.0025$ y $C_\epsilon=0.24$.

En la figura 6.20, se presentan las velocidades horizontales \bar{u} y \bar{w} en el interior de la capa límite. Se observa que los modelos seR y ceR, proporcionan prácticamente los mismos resultados. En la dirección horizontal, los dos modelos no aceleran lo suficiente

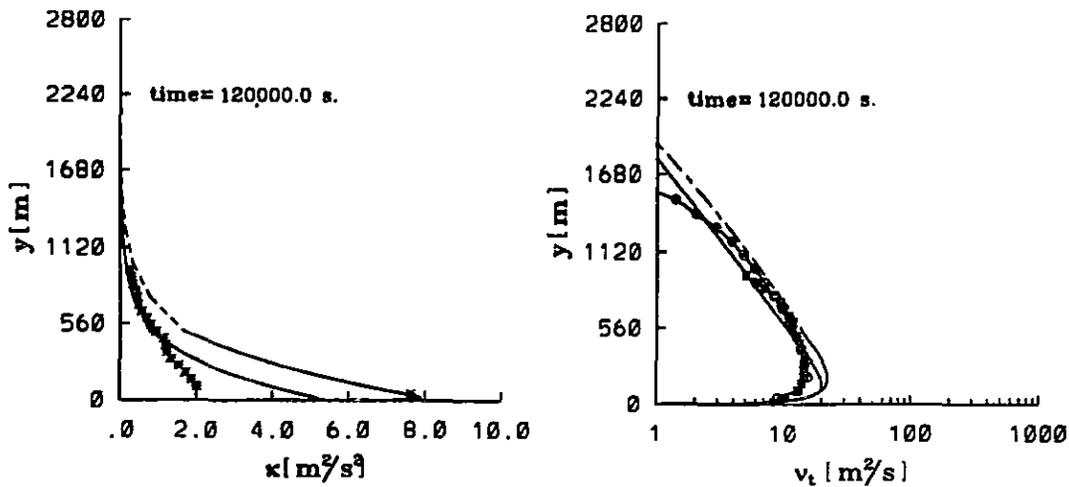


Figura 6.22: Variación de la energía cinética turbulenta κ y de la viscosidad turbulenta ν_t con respecto a la altura. Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación. Descripción de las curvas como en la figura 6.20.

el flujo, de tal manera que las velocidades a una altura de 560 m son menores a los datos experimentales y a los resultados de DyE. En la dirección transversal, los modelos seR y ceR, se comportan adecuadamente ya que reproducen tanto la velocidad máxima del viento como la altura a la que se presenta esta velocidad (aproximadamente a los 250 m). Aunque en la parte inferior de la capa límite, el comportamiento de los modelos seR y ceR es satisfactorio, se observa que en la parte superior (altura mayor a 1450 m), persiste la espiral hasta los 2800 m de altura.

En la figura 6.20, los resultados de DyE en la dirección transversal, son mayores a los datos experimentales, entre los 300 m y los 800 m de altura. En la figura 6.21 se observa que el ángulo de giro que se obtiene con los modelos seR y ceR es prácticamente el mismo en toda la capa límite, lo que confirma el hecho de que con ambos modelos, se obtienen velocidades horizontales muy semejantes. El ángulo de giro en la capa superficial es $\theta \approx 27.5^\circ$, DyE reportan que $\theta=26.6^\circ$. La velocidad de fricción que se obtiene con los modelos seR y ceR es $u_\tau=0.76$ (donde: $u_{\tau_x}=0.62$ y $u_{\tau_z}=0.45$). DyE reportan que la velocidad de fricción es: $u_\tau=0.66$

En la figura 6.22, se presenta la variación de κ y de ν_t con respecto a la altura. Es sorprendente observar que a pesar de que los modelos seR y ceR, predicen valores de las velocidades medias muy semejantes entre sí, los perfiles de la energía turbulenta presentan diferencias significativas. En toda la capa límite, el modelo ceR proporciona valores de κ que son superiores a los que se obtienen con seR. El modelo ceR reproduce el valor "experimental" de la energía turbulenta $\kappa=7.6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, que se presenta en la capa superficial, sin embargo, fuera de esta región, ceR proporciona valores muy grandes de κ . Por otro lado, en la región superior de la capa límite (por arriba de los 400 m), el modelo seR reproduce los valores "experimentales" de κ , sin embargo

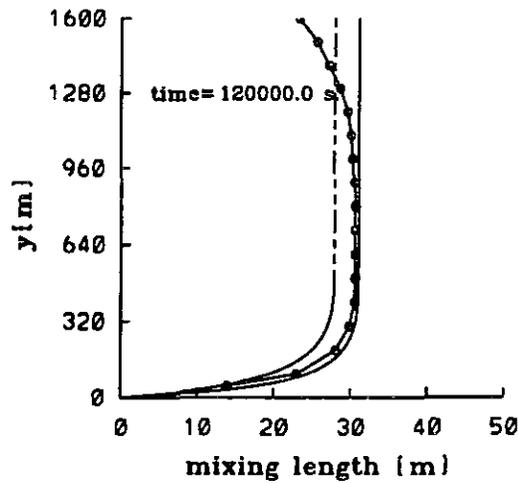


Figura 6.23: Variación de la escala de longitud de la turbulencia $l_m(y)=0.064 \kappa^{3/2}/\epsilon$. Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación. Resultados numéricos de DyE (o) (Detering and Etling, 1985), línea continua versión seR, línea discontinua versión ceR. Descripción de las curvas como en la figura 6.20.

en la región cercana a la superficie los resultados numéricos son distintos a los valores "experimentales". Desafortunadamente DyE no presentan resultados de la distribución de κ , ya que sería interesante saber, si durante su proceso de optimización únicamente se limitaron a obtener resultados satisfactorios de las velocidades medias y de la viscosidad turbulenta, o también incluyeron en la optimización, los resultados de κ . En la figura 6.22, la viscosidad turbulenta de los tres modelos sigue la forma de los valores experimentales. Se observa que cerca de la superficie, los modelos propuestos en este trabajo predicen valores grandes de ν_t . El modelo de DyE tiene la misma tendencia a obtener valores grandes de ν_t alrededor de los 200 m de altura, en la gráfica no se observa con claridad esta tendencia debido a la escala logarítmica del eje de las abscisas. Entre los 250 m y los 1200 m de altura, los tres modelos se comportan de manera semejante, ya que la variación de ν_t , con respecto a la altura es similar.

En la figura 6.23, se presenta la escala de longitud de los remolinos turbulentos l_m evaluada a partir de la ecuación (6.43). Es interesante observar que con el modelo seR y con el modelo de DyE, se obtienen resultados muy semejantes en la mayor parte de la capa límite. Los valores de l_m obtenidos con el modelo ceR, siguen la tendencia de los otros modelos. En las figuras 6.22 y 6.23 se observa que; aunque los valores de κ del modelo ceR son mayores, la escala de longitud de la turbulencia es menor, ésto se debe a que la disipación en el modelo ceR, es de mayor magnitud (la gráfica de ϵ no se muestra). Es alentador observar que los dos modelos propuestos, reproducen satisfactoriamente la escala de longitud de la turbulencia l_m , que se presenta en una atmósfera real. Es decir, cerca de la superficie l_m se incrementa linealmente con la altura, hasta que ocurre un cambio en la pendiente y adquiere un valor aproximadamente constante.

Con los resultados que se presentan en esta sección, se demuestra que el modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación, proporciona resultados que se acercan mucho más a los datos experimentales. Se ha demostrado que las constantes del modelo no son universales, y que deben ser ajustadas para resolver problemas en donde se presenten flujos con rotación, como es el caso de la atmósfera.

El modelo matemático que rige el comportamiento de la capa límite en condiciones de flujo homogéneo, es simple en relación al modelo tridimensional que se formuló en el capítulo 2. Sin embargo, la incorporación de los términos: temporal y de Coriolis y la evaluación de los esfuerzos de Reynolds (y su introducción en las ecuaciones de κ y ϵ), no deja de complicar la solución numérica. A pesar de esta complicación, y de acuerdo a los resultados que se han presentado, todo parece indicar que el modelo computacional desarrollado en este trabajo, se comporta de manera satisfactoria.

Hasta este momento se han comparado los resultados de los modelos seR y ceR, con datos experimentales correspondientes a una atmósfera neutra. La energía cinética turbulenta no se ha verificada adecuadamente, ya que los datos "experimentales" que aparecen en las figuras 6.15, 6.18 y 6.22, se obtuvieron a partir de una longitud de mezcla "experimental", que reporta DyE y a partir del valor de la constante c_0 , ver ecs. (6.39) y (6.40). Adicionalmente, los esfuerzos de Reynolds $\overline{u'_i u'_j}$, que se calculan a partir de un modelo algebraico, tampoco se han comparado con datos experimentales, ya que en las mediciones sobre la ciudad de Leipzig, no se reportan los valores de las varianzas y covarianzas de las fluctuaciones de velocidad.

Con el propósito de establecer la capacidad que tienen los los modelos seR y ceR de evaluar correctamente los esfuerzos normales turbulentos $\overline{u_i^2}$, y las correlaciones $\overline{u'\theta'}$ y $\overline{v'\theta'}$, en la siguiente sección se comparan los resultados de los modelos propuestos, con las mediciones llevadas a cabo tanto en una atmósfera neutra, como en una atmósfera estable.

6.3.5 Simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras y estables, utilizando el modelo κ - ϵ modificado

En esta sección, se presenta la simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras y estables. El modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds (ver capítulo 3), es utilizado para calcular los esfuerzos normales y los flujos turbulentos de calor que se presentan en una atmósfera horizontalmente homogénea.

En la condición de atmósfera neutra, los resultados de las versiones "sin esfuerzos de Reynolds" (seR) y "con esfuerzos de Reynolds" (ceR) se comparan con las mediciones que presentan Brost et al. (Brost et al., 1982) y Grant (Grant, 1986). En el caso estable, los resultados de los modelos propuestos se comparan con los datos experimentales que reportan Caughey et al. (Caughey et al., 1979) y Nieuwstadt (Nieuwstadt, 1984). En ambos casos (atmósfera neutra y estable), los resultados de los modelos seR y ceR, también se comparan con los resultados numéricos de Andrén (Andrén, 1990), quien utilizó un modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds similar al propuesto en este trabajo. Andrén, sin embargo, no resuelve la ecuación de transporte de ϵ , por lo que la escala de longitud de los grandes remolinos turbulentos, la define (al igual que Mellor y Yamada, de aquí en adelante MyY (Mellor and Yamada, 1982)), como una

longitud que se determina a partir de relaciones empíricas. Andrén (Andrén, 1990) y MyY (Mellor and Yamada, 1982) cierran las ecuaciones de los esfuerzos de Reynolds, utilizando la siguiente expresión para la disipación de energía:

$$\epsilon = \frac{2\kappa}{\lambda} \quad (6.46)$$

donde λ es la escala de longitud de la turbulencia.

Los resultados de los modelos seR y ceR pueden compararse directamente con la solución numérica de Andrén, ya que su modelo (al igual que el propuesto en este trabajo), no incluye la humedad del aire ni la transferencia de calor por radiación.

Con el propósito de ubicar (en el marco de referencia de los modelos que aparecen en la literatura), el modelo de turbulencia que aquí se presenta, es conveniente mencionar que MyY clasificaron el modelo de turbulencia de segundo orden, que ellos desarrollaron, de acuerdo al número de ecuaciones de transporte que se resuelven. En su modelo de nivel 4, MyY resuelven las ecuaciones de transporte para las varianzas y covarianzas; $\overline{u'_i u'_j}$, $\overline{u'_i \theta'}$ y $\overline{\theta'^2}$. Como ya se ha mencionado, MyY no resuelven la ecuación de transporte para la disipación de energía turbulenta ϵ . En el modelo de nivel 3, MyY resuelven la ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta (utilizando la variable $q^2=2\kappa$) y la ecuación de transporte de la varianza de las fluctuaciones de temperatura $\overline{\theta'^2}$, las correlaciones $\overline{u'_i u'_j}$ y $\overline{u'_i \theta'}$, las obtienen a partir de expresiones algebraicas. En el modelo de nivel 2.5, MyY suponen (al igual que en este trabajo), que en la ecuación de transporte de $\overline{\theta'^2}$, existe equilibrio entre la producción y disipación de las fluctuaciones de temperatura, por lo que la derivada material y los términos difusivos pueden despreciarse. En el nivel 2.5, MyY proponen resolver la ecuación de transporte de la energía turbulenta ($q^2=2\kappa$) y utilizar expresiones algebraicas para las correlaciones: $\overline{u'_i u'_j}$, $\overline{u'_i \theta'}$ y $\overline{\theta'^2}$. En el modelo de nivel 2, MyY suponen que también existe equilibrio en la producción y disipación de la energía turbulenta, por lo que las correlaciones turbulentas, únicamente se obtienen a partir de expresiones algebraicas. Un modelo de nivel 2, fue el que utilizaron Gibson y Launder (Gibson and Launder, 1978) para estudiar la influencia de una superficie sólida sobre las correlaciones de presión-deformación y las correlaciones de presión-gradiente de temperatura (ver capítulo 3). De acuerdo a la clasificación anterior, puede decirse que el modelo propuesto en este trabajo se ubica en el nivel 2.5, ya que resuelve la ecuación de transporte de κ y se utilizan expresiones algebraicas para calcular las correlaciones $\overline{u'_i u'_j}$, $\overline{u'_i \theta'}$ y $\overline{\theta'^2}$. Sin embargo, dado que en el modelo que aquí se propone, se resuelve adicionalmente la ecuación de transporte de la disipación ϵ , éste podría quedar ubicado en el nivel 3. MyY mencionan que con los modelos de segundo orden (y sus versiones simplificadas), se predicen adecuadamente los campos de velocidad y temperatura media, sin embargo las varianzas y covarianzas: $\overline{u'_i u'_j}$, $\overline{u'_i \theta'}$ y $\overline{\theta'^2}$ se obtienen con una aproximación razonable.

En los dos casos que se analizan (atmósfera neutra y estable), la región de estudio tiene 1,500 m en la dirección vertical. La malla numérica utilizada es más fina en la región cercana a la superficie, y está representada por 250 volúmenes de control. Los primeros 100 volúmenes, se localizan entre la superficie y los primeros 300 m de altura. El intervalo entre 300 m y 500 m de altura, está representado por 50 celdas,

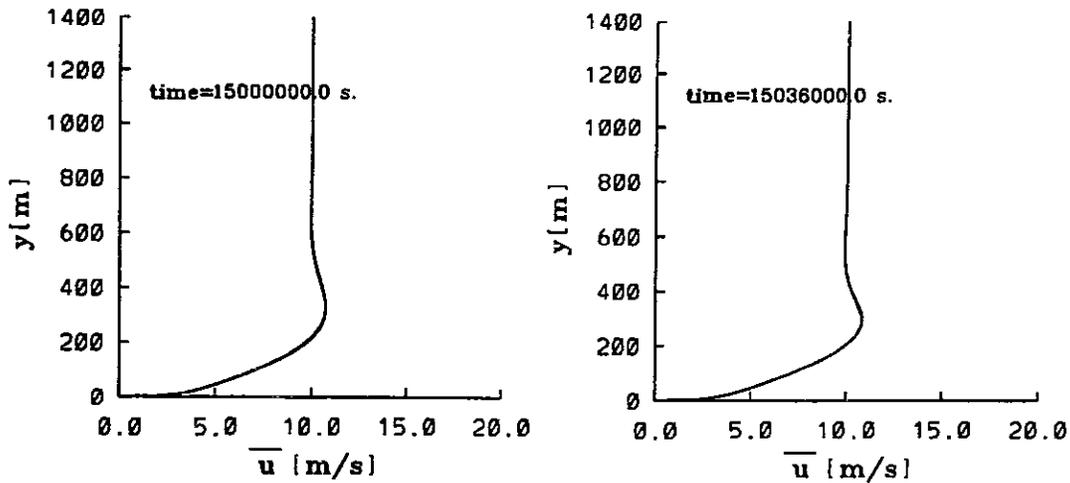


Figura 6.24: Variación de las velocidades longitudinales \bar{u} con respecto a la altura, para una atmósfera neutra (izquierda) y para una atmósfera estable (derecha) ($q_s = -23.6 \text{ W/m}^2$). Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación. La línea continua representa los resultados con la versión seR, la línea discontinua representa los resultados con la versión ceR. $C_h = 0.0025$, $C_\epsilon = 0.24$, $c_\mu = 0.067$ y $C_{1\epsilon} = 1.42$.

los 100 nodos restantes cubren el intervalo entre 500 y 1500 m de altura. En el caso neutro (temperatura potencial $\bar{\theta}$ uniforme), la solución se obtiene desde que el fluido se encuentra en reposo (condiciones iniciales $t=0 \text{ s}$), hasta $t=15 \times 10^6 \text{ s} \equiv 4,166 \text{ h}$, éste intervalo de tiempo es suficiente para lograr la condición de estado estacionario. La simulación se llevó a cabo a partir de utilizar 1,500,000 iteraciones, con un incremento de tiempo constante $\Delta t = 10 \text{ s}$. En ambos casos se considera lo siguiente: (a) el viento geostrófico se orienta en la dirección del eje x, y tiene magnitud $u_g = 10 \text{ m/s}$, (b) el parámetro de rugosidad tiene el valor $y_o = 0.05 \text{ m}$ y (c) la latitud de la región es $\phi = 55.5^\circ \text{ N}$. La solución del caso estable, se generó a partir del estado estacionario del caso neutro. Es decir, después de que se mantuvo la temperatura potencial uniforme durante el tiempo $t = 15 \times 10^6 \text{ s}$, la condición de frontera en la superficie terrestre, se cambió, de tal manera que se presenta un flujo de calor $q_s = \text{cte}$, desde el fluido hacia la frontera sólida. En las simulaciones numéricas (relacionadas con atmósfera estable) que reportan Brost y Wyngaard (Brost and Wyngaard, 1978) y Andrén (Andrén, 1990), se utiliza la siguiente condición de frontera en la superficie:

$$\frac{\partial \bar{\theta}_s}{\partial t} = \text{cte} \quad (6.47)$$

donde $\bar{\theta}_s$ es la temperatura de la superficie. Brost y Wyngaard argumentan que al utilizar la condición de frontera representada por la ec. (6.47), la capa límite se aproxima al estado estacionario después de algunas horas (2 a 8 h) de iniciar el enfriamiento. Andrén disminuyó la temperatura de la superficie $\bar{\theta}_s$, con la siguiente razón de cam-

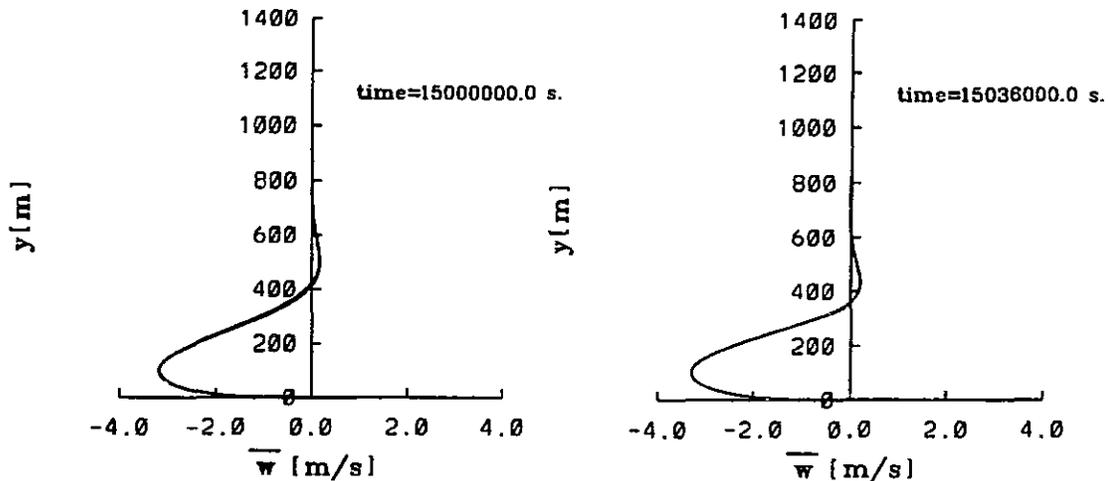


Figura 6.25: Variación de las velocidades transversales \bar{w} con respecto a la altura, para una atmósfera neutra y para una atmósfera estable ($q_s = -23.6 \text{ W/m}^2$). Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación. Definición de las curvas como en la figura 6.24.

bio: 1 K h^{-1} . Brost y Wyngaard realizaron simulaciones tomando en cuenta diversas razones de cambio de $\bar{\theta}_s$ con respecto al tiempo ($0.2, 0.5, 1, 2$ y 4 K h^{-1}).

La simulación del caso estable se llevó a cabo durante $t=36,000 \text{ s} \equiv 10 \text{ h}$, y se utilizaron 3,600 iteraciones con incrementos de tiempo uniformes, $\Delta t = 10 \text{ s}$.

Es conveniente mencionar que en la solución numérica del caso estable, se utilizó la condición de frontera $q_s = \text{cte}$, ya que Brost y Wyngaard (Brost and Wyngaard, 1978) indican, que después de algunas horas de que se inicia el enfriamiento de la superficie, el flujo de calor q_s es aproximadamente constante. Si la temperatura $\bar{\theta}_s$ tiene una razón de enfriamiento correspondiente a 1 K h^{-1} , Brost y Wyngaard encontraron que el flujo de calor cinemático por unidad de superficie se aproxima al valor constante $q_o = -0.02 \text{ K m/s}$ (el flujo de calor se obtiene a partir de la relación $q_s = q_o \rho c_p = -23.6 \text{ W/m}^2$). Datos reportados por Caughey et al. (Caughey et al., 1979), indican que en los experimentos de Minnesota de 1973, el día 10 de septiembre (corrida 2C2 del artículo de Caughey et al.), se midió un valor promedio del flujo de calor cinemático, igual a: $q_o = -0.0217 \text{ K m/s}$.

Con el propósito de comparar los resultados de los modelos seR y ceR con los cálculos de Brost y Wyngaard (Brost and Wyngaard, 1978) y Andrén (Andrén, 1990), y con los datos experimentales de Caughey et al. (Caughey et al., 1979), se escogió el valor constante del flujo de calor en la superficie $q_s = -23.6 \text{ W/m}^2$ (equivalente a $q_o = -0.02 \text{ K m/s}$).

El autor desea anticipar que con la condición de frontera utilizada en los modelos seR y ceR, es decir, $q_s = \text{cte}$, se espera tener menor pérdida de energía que la que obtuvieron Andrén, y Brost y Wyngaard, ya que la condición de flujo de calor constante, $q_s = -23.6 \text{ W/m}^2$, la obtuvieron después de algunas horas de haber iniciado el enfriamiento con

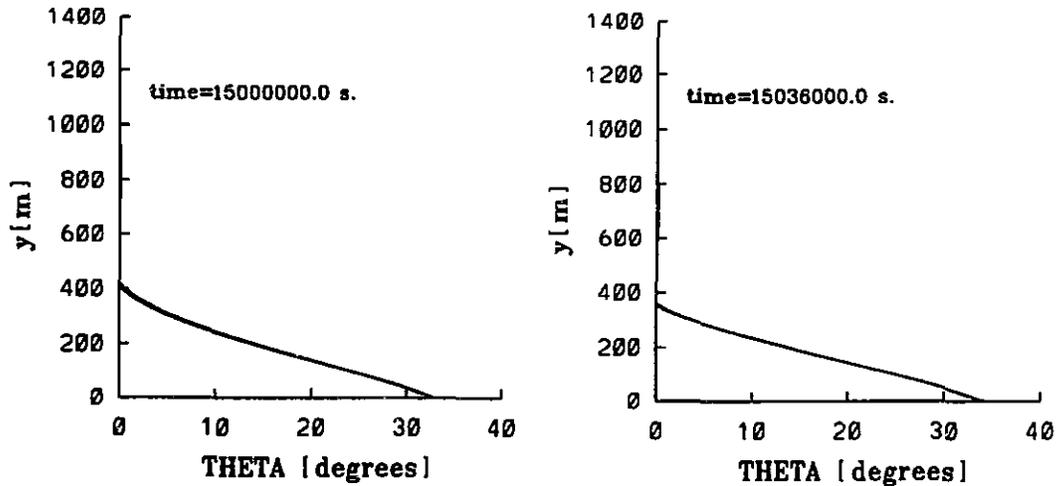


Figura 6.26: Variación del ángulo θ formado por las velocidades horizontales, \bar{u} y \bar{w} . Atmósfera neutra y atmósfera estable ($q_s = -23.6 \text{ W/m}^2$). Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación. Definición de las curvas como en la figura 6.24.

la razón 1 K h^{-1} . La pérdida de calor evaluada con la condición de frontera $q_s = \text{cte}$, es menor, ya que en los instantes inmediatos al inicio del enfriamiento, el flujo de calor adquiere un valor grande, debido a que el gradiente de la temperatura entre el fluido y la superficie también es grande: $(\partial\bar{\theta}/\partial y)_s \rightarrow \infty$. Debido a esta gran pérdida de energía, el término de producción de turbulencia por flotación (ver ecs. (6.27 y 6.28)), comienza a actuar como un sumidero de energía turbulenta, de tal manera que el flujo se vuelve menos turbulento. Si se tiene menor intensidad de turbulencia, se tiene mayor estabilidad, lo cual limita la transferencia de calor. Después de cierto tiempo (en que los términos de producción de κ por cortante y por flotación actúan como sumideros de energía), el flujo de calor tiende a disminuir de magnitud hasta alcanzar el valor constante que reportan Brost y Wyngaard. Por otro lado, se espera que los resultados de los modelos seR y ceR, puedan reproducir adecuadamente los datos del experimento 2C2 que reportan Caughey et al. (Caughey et al., 1979), ya que el flujo de calor en la superficie que reportan, es un valor promedio.

En los casos que se analizan en esta sección, el aire tiene las siguientes propiedades: (a) densidad $\rho = 1.177 \text{ kg/m}^3$, (b) viscosidad dinámica $\mu = 1.983 \times 10^{-5} \text{ kg/m-s}$, (c) calor específico $c_p = 1.005 \times 10^3 \text{ J/kg K}$, (d) conductividad térmica $k_T = 0.02624 \text{ W/m K}$ y (e) número de Prandtl $Pr = 0.708$.

Al utilizar el modelo "sin esfuerzos de Reynolds" (seR), en la simulación de la atmósfera neutra (entre $t=0 \text{ s}$ y $t=15 \times 10^6 \text{ s}$) y posteriormente estable (entre $t=15 \times 10^6 \text{ s}$ y $t=15,036,000 \text{ s}$), la solución se obtiene después de 134 h de CPU, de una computadora IMPACT, de Silicon Graphics (procesador R-10,000 con 175 MHz de velocidad). El modelo "con esfuerzos de Reynolds" (ceR), obtiene la solución de ambos casos después de 212 h de CPU, de la misma computadora IMPACT.

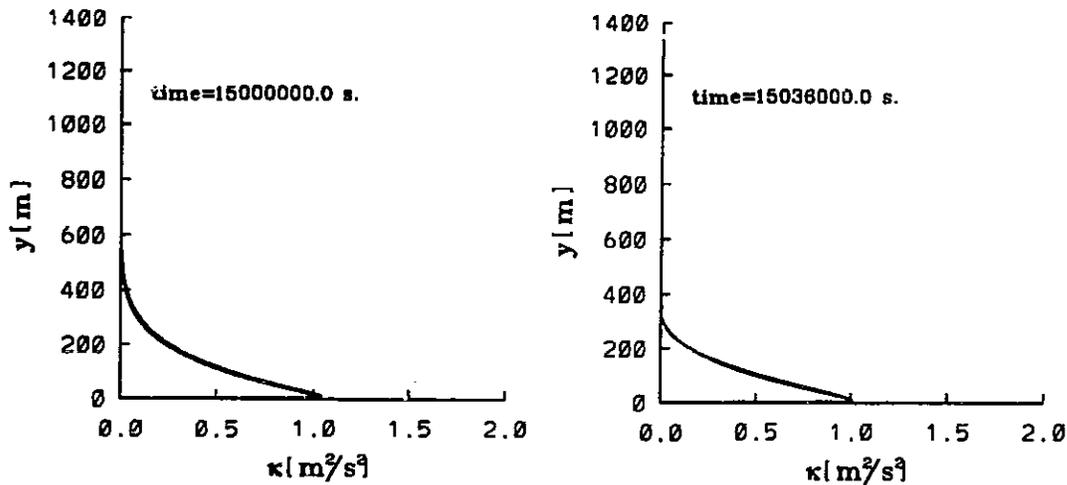


Figura 6.27: Variación de la energía cinética turbulenta κ con respecto a la altura, para una atmósfera neutra y para una atmósfera estable ($q_s = -23.6 \text{ W/m}^2$). Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación. Definición de las curvas como en la figura 6.24.

En las figuras 6.24 a 6.28, se presentan los resultados de los modelos seR y ceR, para los casos neutro y estable. En estas figuras, se muestra la variación con respecto a la altura de: (a) la velocidad longitudinal \bar{u} , figura 6.24, (b) la velocidad transversal \bar{w} , figura 6.25, (c) el ángulo que forman las velocidades horizontales θ , figura 6.26, (d) la energía cinética turbulenta κ , figura 6.27 y (e) la viscosidad turbulenta ν_t , figura 6.28. En las figuras antes mencionadas, no se presentan datos experimentales ni soluciones numéricas de otros autores (con la discusión que se presentó en las dos secciones anteriores se considera que los modelos seR y ceR, predicen satisfactoriamente las variables medias y turbulentas que aparecen en estas figuras). En las figuras 6.24 a 6.28, es posible observar los cambios que se presentan en el flujo al pasar de una condición neutra a una estable.

En la sección anterior, se mencionó que la viscosidad turbulenta ν_t que se obtiene con los modelos seR y ceR, es alta en comparación con los datos experimentales y con la simulación numérica de otros autores (ver figura 6.22). Al concluir la sección anterior, también se mencionó que en este apartado, se verificarían los resultados de κ y los resultados de las varianzas y covarianzas que se obtienen con el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds, que se propone en esta tesis.

Al comparar los esfuerzos de Reynolds que se obtienen con los modelos seR y ceR, con la solución numérica de Andrén (Andrén, 1990) y con los datos experimentales de Brost et al. (Brost et al., 1982), Grant (Grant, 1986), Caughey et al. (Caughey et al., 1979) y Nieuwstadt (Nieuwstadt, 1984), se comprobó que los modelos propuestos (cuando utilizan las constantes que se presentaron en la sección anterior), proporcionan valores grandes de la energía cinética turbulenta, esto trae como consecuencia que la varianza de las fluctuaciones de velocidad, también sea de gran magnitud.

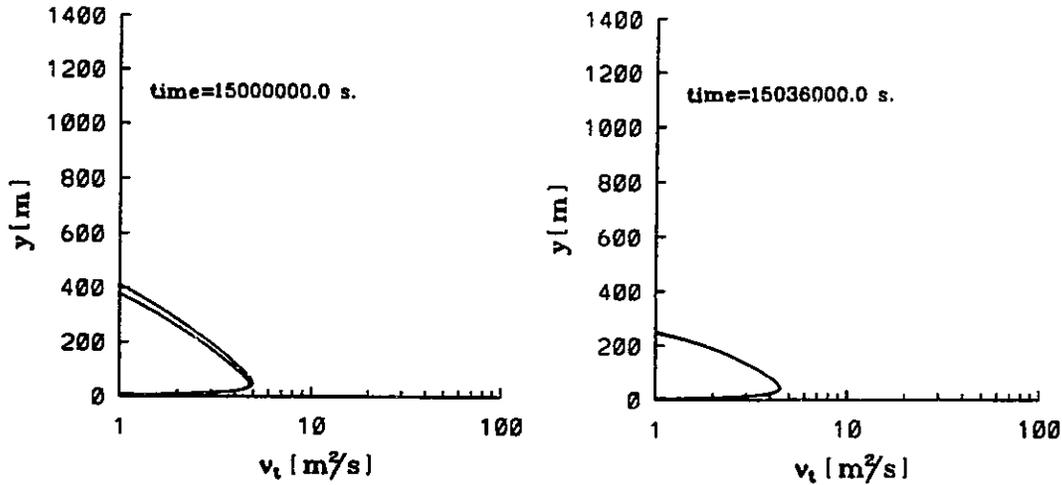


Figura 6.28: Variación de la viscosidad turbulenta ν_t con respecto a la altura, para una atmósfera neutra y para una atmósfera estable ($q_s = -23.6 \text{ W/m}^2$). Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación. Definición de las curvas como en la figura 6.24.

En las secciones anteriores se utilizó la constante $c_\mu = 0.0256$, este valor también fue usado por Detering y Etling (Detering and Etling, 1985), para predecir la capa límite de la atmósfera en condiciones neutras. La constante c_μ , es de mucha importancia ya que establece la condición de frontera de la energía cinética turbulenta, ver ec. (6.37). Andrén (Andrén, 1990), menciona que mediciones realizadas en la capa superficial de la atmósfera, indican que c_μ se encuentra en el rango 0.032-0.067 (en la nomenclatura de Andrén $-\overline{u'w'}/q^2$ se encuentra en el rango 0.09-0.13). Con el propósito de disminuir la intensidad de turbulencia en la capa superficial, se decidió modificar el valor de la constante c_μ y adoptar el valor que es utilizado por Andrén, es decir: $c_\mu = 0.067$. De acuerdo a la relación entre constantes ec. (6.32), si la constante c_μ , se modifica, es necesario alterar el valor de al menos una de las constantes restantes.

En la definición de la nueva constante, se tomó la decisión de conservar las constantes "originales" del modelo estándar (con excepción de c_μ y $C_{1\epsilon}$). Es decir, en los modelos seR y ceR, las constantes son ahora las siguientes: $C_{2\epsilon} = 1.9$, $\sigma_\kappa = 0.74$, $\sigma_\epsilon = 1.29$ y $c_\mu = 0.067$. Al sustituir las constantes anteriores en la ec. (6.32), se obtiene el nuevo valor de la constante del término de producción de disipación, $C_{1\epsilon} = 1.42$. Con este valor de $C_{1\epsilon}$ (el cual es mayor que el valor "original" del modelo estándar $C_{1\epsilon} = 1.13$), se espera que exista mayor producción de disipación, lo que permitirá tener menor intensidad turbulenta. Es conveniente mencionar que al modificar la constante c_μ , se modifica también el valor de la constante c_o , es decir:

$$c_o = c_\mu^{1/4} = 0.067^{1/4} = 0.508 \quad (6.48)$$

por lo que entonces el valor de la constante $C_{3\epsilon}$ que aparece en la definición de la escala de longitud de los grandes remolinos, ver ec. (6.43), es ahora; $C_{3\epsilon} = c_o^3 = 0.508^3 = 0.131$.

En las figuras 6.24 a 6.28, se observa que los modelos seR y ceR, proporcionan resultados muy semejantes entre sí. En estas figuras, se observan los efectos acoplados de la aceleración de Coriolis y de los esfuerzos cortantes turbulentos. En relación al caso neutro, los resultados indican que la máxima velocidad longitudinal $\bar{u}_{max}=10.75$ m/s, se localiza a una altura de 331 m (ver figura 6.24). En el caso estable, la máxima velocidad $\bar{u}_{max}=10.79$ m/s, se localiza a 294 m de la superficie. De acuerdo a los resultados anteriores, puede decirse que el caso estable presenta menor intensidad de turbulencia, ya que el flujo tiene mayor velocidad (mayor efecto de Coriolis) y el máximo de la velocidad se localiza a menor altura (la influencia de la superficie desaparece a menor altura, indicando menor viscosidad turbulenta). En la figura 6.25, se observa con más claridad que el efecto de la aceleración de Coriolis es mayor en la condición estable. En el caso neutro, la máxima velocidad transversal es $\bar{w}_{max}=-3.16$ m/s, y se localiza a 100 m de altura. La velocidad transversal máxima del caso estable, se localiza también a 100 m de la superficie, pero tiene una magnitud de $\bar{w}_{max}=-3.3$ m/s. En la figura se observa, que en la condición estable, la velocidad \bar{w} desaparece por debajo de los 400 m, sin embargo en el caso neutro, la velocidad transversal es nula aproximadamente a los 400 m de altura. Este comportamiento se debe también a que el nivel de la viscosidad turbulenta, es mayor en el caso neutro, por lo que la superficie influye a mayor altura. En la figura 6.26, se observa que el ángulo de giro en la capa superficial, es mayor en el caso estable ($\theta=34^\circ$). El ángulo que se obtiene con la condición de atmósfera neutra es: $\theta=32.6^\circ$. La velocidad de fricción para los casos neutro y estable es $u_\tau=0.39$ m/s y $u_\tau=0.38$ m/s respectivamente. Andrén (Andrén, 1990), obtuvo para el caso neutro, un ángulo de giro en la capa superficial, $\theta=17.3^\circ$ y una velocidad de fricción de $u_\tau=0.4$ m/s. No deja de sorprender al autor el valor tan pequeño del ángulo de giro que reporta Andrén, sobre todo si se toma en cuenta que la velocidad de fricción es muy similar a la que se obtiene con los modelos seR y ceR ⁶. En los datos experimentales tomados sobre el Océano Pacífico, que reporta Brost et al. (Brost et al., 1982), se indica que durante el día 13 de junio de 1976, en condiciones cercanas a una atmósfera neutra, se midió una velocidad de fricción $u_\tau=0.39$ m/s. Para el caso estable, Andrén reporta que $\theta=46.1^\circ$ y $u_\tau=0.247$ m/s. Simulaciones numéricas llevadas a cabo por Brost y Wyngaard (Brost and Wyngaard, 1978), indican que si la razón de cambio de la temperatura superficial es 1 K h^{-1} , entonces: $\theta=38^\circ$, y $u_\tau=0.18$ m/s. Esto confirma lo que en párrafos anteriores se señaló, en el sentido de que al utilizar la condición de frontera $q_s=\text{cte}$, se obtendría una menor pérdida de energía y en consecuencia un flujo menos estratificado. Caughey et al. (Caughey et al., 1979) reportan que en la corrida experimental 2C2 ($q_o=-0.0217 \text{ K m/s}$), la velocidad de fricción y el ángulo máximo que se alcanzó entre la dirección del viento geostrófico y la dirección del aire a 4 m de altura fueron: $u_\tau=0.31$ m/s y $\theta=35^\circ$ respectivamente. Estos datos coinciden con los resultados obtenidos por los modelos seR y ceR.

Al observar las figuras 6.27 y 6.28, se confirma lo que se mencionó en párrafos anteriores, en relación a que en una atmósfera neutra, se tiene mayor intensidad de turbulencia. Los resultados indican que en el caso neutro, la energía turbulenta κ ,

⁶En las secciones anteriores, se mostró que en una atmósfera neutra, el ángulo θ (cerca de la superficie) que se obtiene con los modelos seR y ceR, coincide satisfactoriamente con los datos medidos sobre la ciudad de Leipzig y con los resultados numéricos de DyE.

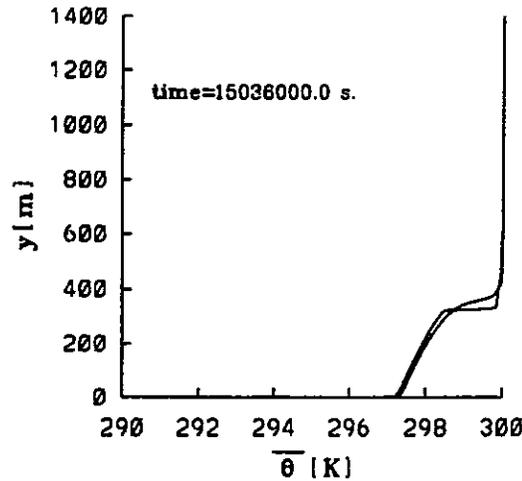


Figura 6.29: Variación de la temperatura potencial $\bar{\theta}$ con respecto a la altura. Atmósfera estable ($q_s = -23.6 \text{ W/m}^2$). Modelo κ - ϵ modificado en la ecuación de disipación. Definición de las curvas como en la figura 6.24.

en la frontera inferior del dominio es: $\kappa = 0.8 \text{ m}^2/\text{s}^2$. El valor máximo de la energía turbulenta en la capa superficial es: $\kappa_{max} = 1.04 \text{ m}^2/\text{s}^2$. Los valores correspondientes a la condición estable, son los siguientes: en la frontera, $\kappa = 0.78 \text{ m}^2/\text{s}^2$, el valor máximo es: $\kappa_{max} = 1.01 \text{ m}^2/\text{s}^2$. En la parte superior de la capa límite, se observa que en el caso estable, la energía turbulenta κ , desaparece aproximadamente a los 480 m de altura, mientras que en la condición estable, κ es nula alrededor de los 300 m. En la figura 6.28, se observa que la viscosidad turbulenta ν_t , es menor para el caso estable. En condiciones neutras, el valor máximo de $\nu_{t,max} = 4.93 \text{ m}^2/\text{s}$ se presenta a los 48 m de altura (en esta figura se observa que en el caso neutro, los modelos seR y ceR predicen resultados diferentes, la menor viscosidad ν_t corresponde al caso ceR). En condiciones estables, $\nu_{t,max} = 4.49 \text{ m}^2/\text{s}$, y se presenta a 42 m de la superficie. En el caso neutro, ν_t desaparece alrededor de los 400 m de altura, en la condición estable, ν_t es nula a los 280 m de la superficie.

En la figura 6.29, se presenta la variación de la temperatura potencial $\bar{\theta}$ en el interior de la capa límite. Se puede observar que los modelos seR y ceR, predicen resultados diferentes alrededor de los 330 m de altura. En esta posición, el modelo seR, indica que existe un cambio brusco de la temperatura, (a 323.9 m de altura, la temperatura es: $\bar{\theta} = 298.5^\circ$, a 327.9 m de altura la temperatura es: $\bar{\theta} = 299.5^\circ$). Este comportamiento no se presenta con el modelo ceR, el cual predice una transición "suave" de la temperatura del viento geostrófico ($\bar{\theta} = 300 \text{ K}$), a la temperatura en el interior de la capa límite. El perfil de la temperatura potencial $\bar{\theta}$, que se presenta en la figura 6.29, es muy similar (sobre todo el que se obtiene con el modelo ceR) al perfil típico que se presenta en una atmósfera estable (Caughey et al., 1979), (Nieuwstadt, 1984). Los resultados de la temperatura potencial indican, que después de 10 h de iniciarse el enfriamiento,

la temperatura de la superficie es: $\bar{\theta}_s=296.8$ K, es decir el cambio en la temperatura superficial fue de: $\Delta\bar{\theta}=300-296.8=3.2$ K.

En la figura 6.30, se presentan las varianzas de las fluctuaciones de velocidad para el caso de una atmósfera neutra. En la figura, se comparan los resultados de los modelos seR y ceR con los datos experimentales que reportan Brost et al. (Brost et al., 1982) y Grant (Grant, 1986), y con la solución numérica de Andrén (Andrén, 1990). Es conveniente mencionar, que en los experimentos, la condición de atmósfera neutra estuvo limitada por una capa de inversión, cuya altura se define por el parámetro $u_\tau/f_c y_i$, el cual es proporcional a la altura de la capa límite planetaria (PBLD) en condiciones neutras, dividida por la altura de la capa de inversión y_i . En la literatura se menciona con frecuencia que si la atmósfera se encuentra en condiciones neutras, la altura de la capa límite planetaria (PBLD), se determina a partir de la relación:

$$PBLD = \frac{C_n u_\tau}{f_c} \quad (6.49)$$

donde C_n puede variar en el rango 0.3-0.5.

En los artículos de Brost et al. y Grant, se grafica la variación de los esfuerzos normales en el sistema de coordenadas denominado: PBL ("Planetary Boundary Layer"), en donde el eje de las ordenadas, es la distancia vertical normalizada con respecto a la altura de la capa de inversión (y_i). La forma en que se presentan los resultados de la figura 6.30, es la misma que utilizó Andrén para comparar su solución numérica con los datos que reportan Brost et al. y Grant. En el artículo de Andrén (al igual que en la figura 6.30), el eje de las ordenadas es la distancia vertical normalizada con respecto a la altura de la capa límite planetaria (PBLD). Para realizar la conversión de los datos experimentales, Andrén utilizó el valor de $C_n=0.5$ y probablemente la relación $u_\tau/f_c y_i=10$.

En la figura 6.30 se observa que los modelos seR y ceR, proporcionan resultados muy similares entre sí, al grado que no es posible distinguir la diferencia. La distancia vertical en los dos modelos propuestos, se normalizó con respecto a la altura de la capa límite planetaria (PBLD), cuyo valor se obtuvo utilizando en la ec. (6.49), la constante $C_n=0.3$. Es posible observar en la figura, que el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds, permite determinar la anisotropía de la turbulencia en el interior de la capa límite. Se observa que las fluctuaciones $\overline{u'u'}$ y $\overline{w'w'}$ son mayores a las fluctuaciones de velocidad en la dirección vertical, este comportamiento se debe a que la superficie, amortigua la intensidad de turbulencia en la dirección normal a la frontera sólida. En la figura 6.30, se observa que en la dirección longitudinal y en la dirección transversal, los modelos seR y ceR, proporcionan valores que son de mayor magnitud que los datos experimentales y que los valores obtenidos por Andrén. Con respecto a los resultados de Andrén, es conveniente comentar que si la intensidad de turbulencia que obtiene es menor, debería de obtener un ángulo de rotación mayor al encontrado por los modelos seR y ceR. Sin embargo, como se mencionó anteriormente, el ángulo de rotación que calcula Andrén es menor, lo cual es inconsistente. En la figura 6.30, se observa que en la parte superior de la capa límite ($y/PBLD > 0.2$), las fluctuaciones horizontales que se obtienen con los modelos seR y ceR, se ubican dentro de la dispersión de los datos experimentales. En relación a las fluctuaciones de velocidad en la dirección

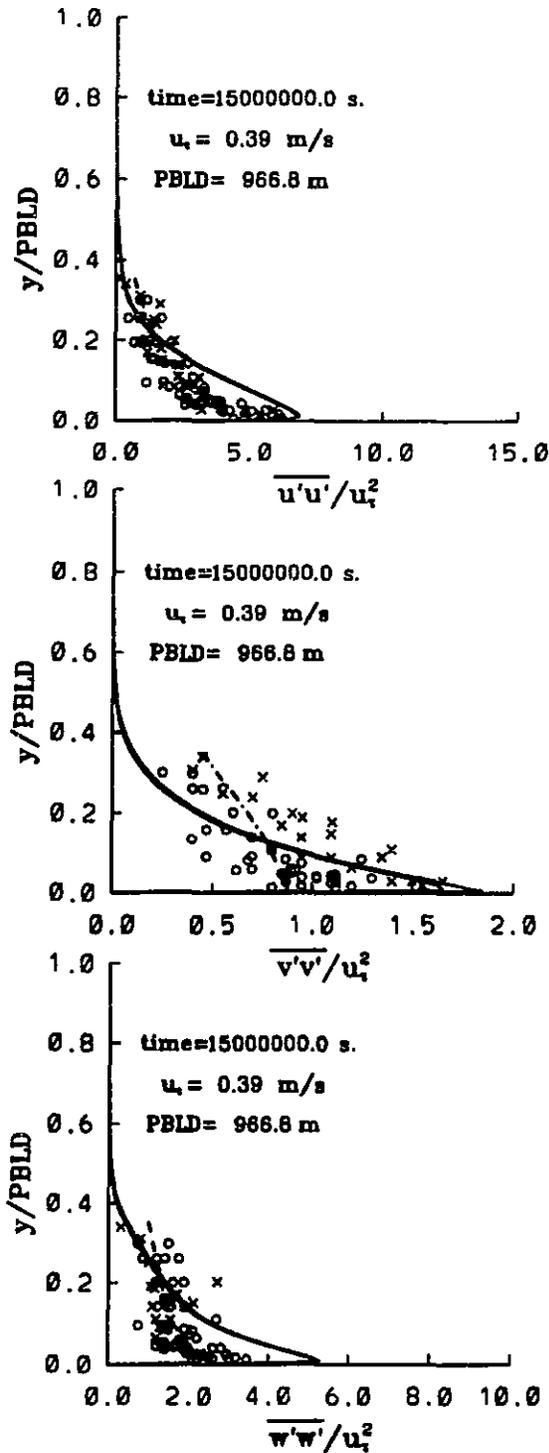


Figura 6.30: Variación en el interior de la capa límite de los esfuerzos normales $\overline{u'u'}$, $\overline{v'v'}$ y $\overline{w'w'}$, normalizados con respecto a la resultante de la velocidad de fricción u_τ . Atmósfera neutra, (x) datos de Brost *et al.* (Brost *et al.*, 1982), (o) datos de Grant (Grant, 1986), (-.-) resultados numéricos de Andrén (Andrén, 1990). Definición de las curvas como en la figura 6.24.

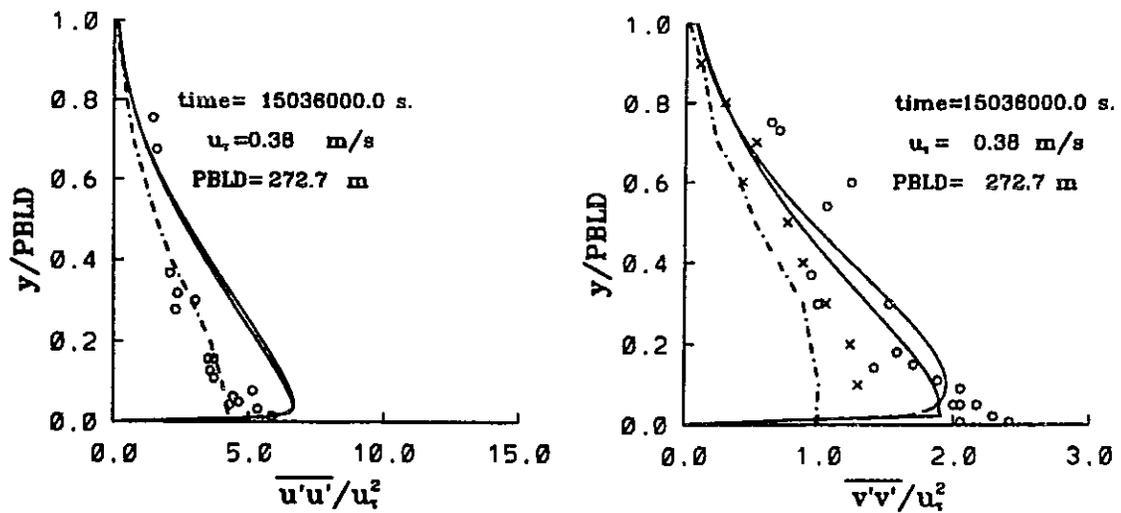


Figura 6.31: Variación en el interior de la capa límite de los esfuerzos normales $\overline{u'u'}$ y $\overline{v'v'}$, normalizados con respecto a la resultante de la velocidad de fricción u_τ . Atmósfera estable ($q_s = -23.6$ W/m²), (x) datos de Nieuwstadt (Nieuwstadt, 1984), (o) datos de Caughey et al. (Caughey et al., 1979), (-.-) resultados numéricos de Andrés (Andrés, 1990). Definición de las curvas como en la figura 6.24.

vertical, puede observarse que tanto las predicciones de Andrés como los resultados de los modelos seR y ceR, coinciden satisfactoriamente con las mediciones. Andrés, sin embargo, cerca de la superficie, obtiene un valor pequeño de la correlación $\overline{v'v'}$.

En las figuras 6.31 y 6.32, se comparan los esfuerzos normales ($\overline{u'u'}$, $\overline{v'v'}$) y las correlaciones ($\overline{v'\theta'}$, $\overline{u'\theta'}$), que se obtienen en este trabajo (para el caso estable), con la solución numérica de Andrés (Andrés, 1990) y con los datos experimentales proporcionados por Caughey et al. (Caughey et al., 1979) y Nieuwstadt (Nieuwstadt, 1984).

En las figuras 6.31 y 6.32, la distancia vertical y , se ha normalizado con respecto a la altura de la capa límite planetaria, la cual se obtiene a partir de la expresión (Boughton and DeLaurentis, 1992):

$$PBLD = \frac{u_\tau}{f_c} \left(\frac{1}{0.3} + \frac{1}{0.4} \sqrt{\frac{u_\tau}{f_c L}} \right)^{-1} \quad (6.50)$$

donde L , es la escala de Monin-Obukhov, definida por la ec. (3.49). En la figura 6.31, se observa que la varianza horizontal $\overline{u'u'}$ que se obtiene con los modelos seR y ceR, es de mayor magnitud en relación a los datos experimentales y a la solución de Andrés. Aunque los dos modelos propuestos predicen valores de $\overline{u'u'}$ muy semejantes entre sí, se observa que el modelo ceR, proporciona valores mayores en la parte media de la capa límite. El hecho de que los modelos propuestos en este trabajo, proporcionen en el caso estable, valores superiores de la turbulencia, se debe básicamente a que en la solución

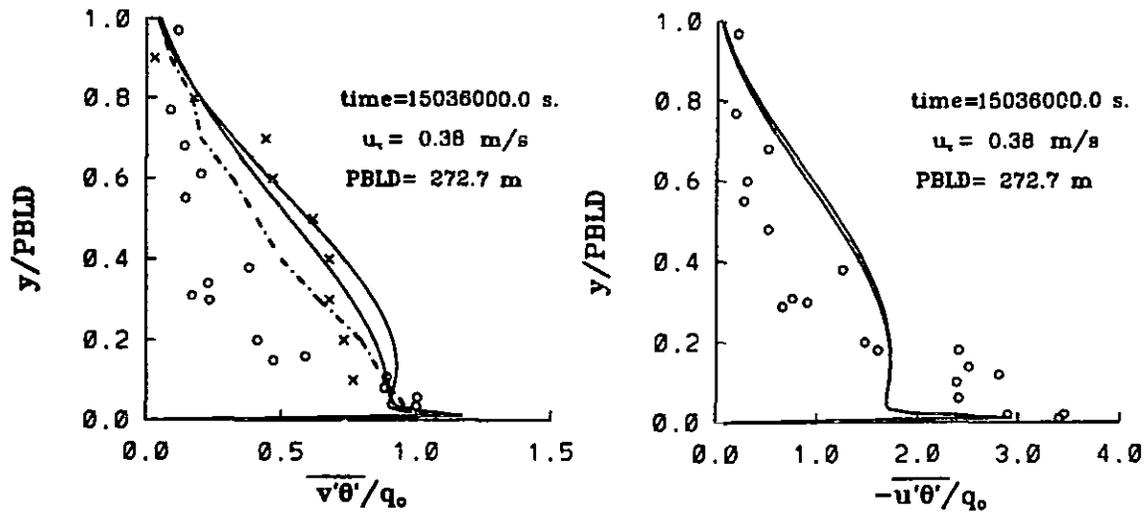


Figura 6.32: Variación en el interior de la capa límite de las correlaciones $\overline{v'\theta'}$ y $\overline{u'\theta'}$, normalizadas con respecto al flujo de calor cinemático ($q_0 = q_s / \rho c_p$). Atmósfera estable ($q_s = -23.6 \text{ W/m}^2$), (x) datos de Nieuwstadt (Nieuwstadt, 1984), (o) datos de Caughey et al. (Caughey et al., 1979), (-.-) resultados numéricos de Andrén (Andrén, 1990). Definición de las curvas como en la figura 6.24.

de Andrén y en los experimentos, la pérdida de energía térmica en la superficie es mayor, de tal manera que el nivel de turbulencia es menor. Si se observan las varianzas verticales, puede notarse que los modelos seR y ceR, predicen resultados que coinciden satisfactoriamente con los datos experimentales. La solución de Andrén sin embargo, está por debajo de los valores experimentales en la mayor parte de la capa límite. Se observa en la figura 6.31, que el modelo ceR (con respecto al modelo seR) proporciona valores mayores de las varianzas verticales, en la parte media de la capa límite. Puede observarse que algunos datos experimentales de la varianza vertical normalizada, son mayores que 2, sin embargo en los modelos seR y ceR, las varianzas normalizadas máximas no alcanzan este valor ya que se encuentran alrededor de 1.9. Caughey et al. reportan, que en la corrida experimental 2C2 del experimento de Minnesota, se obtuvo una varianza vertical normalizada $\overline{v'v'}/u_*^2 = 1.96$.

En la figura 6.32, se observa la capacidad que tiene el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds, de redistribuir los flujos de calor debido a la turbulencia. En la figura, es posible observar que las fluctuaciones de velocidad-temperatura, son mayores en la dirección longitudinal, y que se amortiguan (debido a la presencia de la superficie) en la dirección vertical. Puede observarse que los modelos seR y ceR proporcionan valores de la correlación $\overline{v'\theta'}$ (normalizada con respecto al flujo cinemático de calor q_0), que coinciden cercanamente con los datos que reporta Nieuwstadt, sobre todo en la parte superior de la capa límite. El modelo ceR, proporciona (nuevamente) valores mayores al modelos seR, sin embargo la forma del perfil es semejante en ambos modelos. La solución de Andrén proporciona valores inferiores a los que se obtienen en este trabajo,

lo que indica, que existe menor flujo de calor debido a la turbulencia. En relación a la correlación $\overline{u'\theta'}$, se observa que en la parte superior de la capa límite se obtienen valores mayores que los datos que reporta Caughey et al., sin embargo, en la parte inferior de la capa límite, existe una tendencia a adquirir el valor máximo que ocurre en la superficie. Andrén no reporta los valores de la correlación $\overline{u'\theta'}$.

Con los resultados que se han presentado en las secciones anteriores, en relación a la simulación numérica de la capa límite atmosférica en condiciones neutras y estables, puede decirse que el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds que se propone en esta tesis, predice satisfactoriamente las características medias y turbulentas de la capa límite atmosférica.

Con los resultados que se han mostrado, todo parece indicar, que el modelo desarrollado en este trabajo, predice apropiadamente los campos medios de: velocidad, temperatura, energía cinética turbulenta y disipación de energía turbulenta. Sin embargo, tal y como lo anticipó Mellor y Yamada (Mellor and Yamada, 1982), el modelo proporciona resultados "razonables" de las varianzas y covarianzas de las velocidades y de los flujos de calor.

6.4 Simulación numérica de la dispersión de partículas en un flujo turbulento

En esta sección, el modelo Lagrangiano Estocástico Determinístico que se presentó en el capítulo 4, es utilizado para calcular la trayectoria y la velocidad de partículas que se desplazan en el interior de un flujo turbulento. Al conocer la posición de cada partícula como función del tiempo, es posible determinar la concentración de partículas en el dominio Euleriano. La concentración que se obtiene con el modelo LSD, se compara, para dos casos distintos, con la solución de la ecuación de advección-difusión de concentración de especies. En el primer caso, las partículas son liberadas de manera continua hacia un flujo turbulento uniforme. En el segundo caso, las partículas se liberan de manera instantánea en el interior de un flujo turbulento, cuya velocidad media en la dirección longitudinal varía linealmente en la dirección vertical (flujo con cortante). En la solución de ambos casos, se supone lo siguiente: (a) las partículas se comportan como elementos de fluido, (b) la cantidad de partículas que se libera por unidad de tiempo y volumen, es tan pequeña, que las características medias y turbulentas del flujo no se alteran, (c) las partículas adquieren inmediatamente la velocidad instantánea del fluido, (d) no existe intercambio molecular (viscosidad y difusión) entre las partículas y el fluido, (e) los efectos de trayectorias cruzadas y los efectos de inercia se consideran despreciables (ver capítulo 4), (f) la turbulencia es isotrópica y estacionaria y (g) la fuente de material tiene geometría esférica.

Los resultados del modelo LSD correspondientes al primer caso, se comparan con la teoría estadística de dispersión de partículas, desarrollada por Taylor (Hinze, 1975). La escala integral (Lagrangiana) de tiempo de la turbulencia, el coeficiente de difusión turbulenta y la energía cinética turbulenta que se obtienen con el modelo, coinciden satisfactoriamente con la teoría de Taylor.

Es conveniente mencionar que el propósito de esta sección, es verificar únicamente

el comportamiento del modelo LSD, por lo que los campos Eulerianos de velocidad media \bar{u}_i , energía cinética turbulenta κ y disipación de energía ϵ , no son calculados por el modelo **ATFLOW**, sino que se suponen conocidos ⁷. En el capítulo 4, se explicó en detalle el algoritmo que utiliza el modelo LSD para determinar: la trayectoria y la concentración de partículas en un dominio definido en un marco de referencia Euleriano. En el capítulo 4, se mencionó que las fluctuaciones de la velocidad u'_i del flujo (las cuales motivan la dispersión de los elementos de fluido), se generan como números aleatorios con distribución de probabilidad Gaussiana. Si la turbulencia es isotrópica, la distribución de probabilidad tiene una desviación estándar definida por:

$$u_{rms} = \left(\overline{u'^2} \right)^{1/2} = \left(\frac{2}{3} \kappa \right)^{1/2} \quad (6.51)$$

El tiempo de vida de los remolinos Lagrangianos que acompañan a la partícula se obtiene a partir de la ec. (4.34), es decir:

$$\tau_L = 0.3 \frac{\kappa}{\epsilon} \quad (6.52)$$

En el modelo LSD (ver capítulo 4), una nueva fluctuación de velocidad u'_i , se genera si cualquiera de los dos eventos siguientes ocurre primero: (a) la partícula abandona el remolino turbulento, ó (b) se consume el tiempo de vida del remolino. Sin embargo, si las partículas se comportan como elementos de fluido, ellas siguen exactamente la trayectoria de los remolinos Lagrangianos, por lo que los efectos de trayectorias cruzadas y los efectos de inercia no existen. De acuerdo a lo anterior, una nueva fluctuación de velocidad se genera únicamente cuando el tiempo de vida del remolino turbulento se consume. El modelo LSD, permite determinar la velocidad y la posición de partículas "más pesadas" que el aire, a partir de resolver sus ecuaciones Lagrangianas de cantidad de movimiento ver ecs. (4.7, 4.8 y 4.9). En este caso, los términos de fuerza de arrastre y de gravedad se incluyen en las ecuaciones. Si las partículas se comportan como elementos de fluido, su posición se determina a partir de la siguientes expresiones simplificadas, ver ecs. (4.21, 4.22 y 4.23), (Lange, 1973), (Boughton and DeLaurentis, 1992), (Williams and Yamada, 1990), (Lincoln et al., 1991), (Lyons et al., 1993):

$$x_p(t + \Delta t) = x_p(t) + u_p \Delta t \quad (6.53)$$

$$y_p(t + \Delta t) = y_p(t) + v_p \Delta t \quad (6.54)$$

$$z_p(t + \Delta t) = z_p(t) + w_p \Delta t \quad (6.55)$$

El algoritmo a partir del cual se calcula la trayectoria de varios miles de partículas, se explicó en el capítulo 4. Si las partículas se comportan como elementos de fluido, el

⁷En las secciones anteriores se ha mostrado que el modelo **ATFLOW**, proporciona resultados satisfactorios de las características medias y turbulentas del flujo. En los resultados que se presentan en esta sección, el módulo de dispersión de partículas, está desacoplado del módulo que resuelve las ecuaciones de transporte del aire atmosférico.

procedimiento de cálculo es similar y se explica en la referencia (Avila and Cervantes, 1997b).

Los resultados del modelo LSD, se comparan con la solución de la siguiente ecuación diferencial de advección-difusión, de conservación de especies (Pasquill, 1974):

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \chi}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \chi}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \chi}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial \chi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial \chi}{\partial z} \right) \quad (6.56)$$

donde χ , es el número de partículas por unidad de volumen.

6.4.1 Dispersión de partículas que se liberan de manera continua, en un flujo turbulento uniforme

En este primer caso, se analiza la dispersión de partículas de fluido que se introducen en un flujo turbulento uniforme. En la simulación numérica, la liberación continua de partículas, se discretiza mediante la generación sucesiva de nubes de partículas de forma esféricas ("puffs"), que aparecen en el flujo de manera instantánea. Como se explicó en el capítulo 4, la geometría esférica de la nube, se logra a partir de generar la posición inicial de cada partícula, mediante números aleatorios con distribución de probabilidad Gaussiana y desviación estándar σ_0 . En la simulación, la sucesión de nubes esféricas, se libera en un dominio tridimensional de dimensiones 56 km x 56 km x 56 km, el cual se discretiza por una malla numérica uniforme definida por 27^3 volúmenes de control. Las partículas son transportadas por un flujo uniforme, que tiene velocidad media diferente de cero únicamente en la dirección longitudinal x , y cuya turbulencia es isótropa, homogénea y estacionaria. Como se mencionó anteriormente; en esta sección se supone que se conocen de antemano, la velocidad media y las características turbulentas del flujo. Para llevar a cabo la simulación y poder comparar la solución Lagrangiana del modelo LSD, con la solución Euleriana de la ecuación de advección-difusión, ec. (6.56), se fijaron los siguientes valores de las características del flujo: (a) $\bar{u}=2$ m/s, (b) $\bar{v}=\bar{w}=0$, (c) $\kappa=15$ m²/s², y (d) $D_x=D_y=D_z=D=1,000$ m²/s.

En la simulación, se supone que el coeficiente de difusión turbulenta de masa, es igual al coeficiente de difusión turbulenta de cantidad de movimiento (número de Schmidt unitario, $Sc=\nu/D=1$) (Pasquill, 1974), por lo que utilizando la ecuación (6.7), se tiene:

$$\nu_t = D = c_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (6.57)$$

A partir de la ecuación (6.57), es posible evaluar la disipación de energía turbulenta ϵ . Sin embargo, la constante c_μ (para flujo turbulento uniforme) no se conoce. Para determinar la constante c_μ , se recurre a la expresión de la escala integral (Lagrangiana) de tiempo, que presenta Hinze (Hinze, 1975):

$$T_L = \frac{2 \overline{u'^2}}{C \epsilon} = \frac{4}{3C} \frac{\kappa}{\epsilon} \quad (6.58)$$

donde $C = 8.5$. La ec. (6.58), es válida para tiempos de difusión grandes, en donde la estructura turbulenta de pequeña escala, se determina únicamente por la disipación de

energía turbulenta ϵ (subrango inercial). La constante C , de la ec. (6.58), se obtiene a partir de mediciones en turbulencia isotrópica Hinze (Hinze, 1975). Al combinar las ecuaciones (6.57) y (6.58), se obtiene la siguiente expresión de la constante c_μ :

$$c_\mu = \frac{0.156 D}{T_L \kappa} \quad (6.59)$$

Si se toma en cuenta la teoría estadística de la dispersión de partículas, desarrollada por Taylor (Hinze, 1975), T_L para tiempos de difusión grandes, puede expresarse como:

$$T_L = \int_0^{\tau_L} R_L(\tau) d\tau = \frac{\overline{Y^2}(t)}{2 t \overline{u'^2}} = \frac{D}{\overline{u'^2}} \quad (6.60)$$

donde: $\overline{Y^2}$, es la varianza de los desplazamientos de las partículas, debido a las fluctuaciones de velocidad, y $R_L(\tau)$, es el coeficiente de auto-correlación Lagrangiana, definido por (ver ecs. (4.1 y 4.2)):

$$R_L(\tau) = \frac{\overline{u'(t) u'(t+\tau)}}{\overline{u'^2}} \quad (6.61)$$

Si se sustituye la ec. (6.60) en la ec. (6.59), se obtiene el valor de $c_\mu=0.104$.

Es conveniente mencionar que τ_L , definido por la ec. (6.52), se identifica como el valor de τ para el cual $R_L(\tau) \approx 0$, si $\tau > \tau_L$. A partir de la ecuación (6.61), y dado que una nueva fluctuación de velocidad, se genera cuando el tiempo de vida del remolino se termina, se concluye que la forma del correlograma Lagrangiano, que utiliza el modelo LSD, es el siguiente (Pasquill, 1974):

$$R_L(\tau) = 1 \text{ cuando } \tau \leq \tau_L \quad \text{y} \quad R_L(\tau) = 0 \text{ cuando } \tau \geq \tau_L \quad (6.62)$$

Los resultados del modelo LSD se comparan primero con la teoría de Taylor, la cual establece que para tiempos de difusión pequeños $t \ll T_L$, la intensidad de turbulencia se calcula a partir de (Hinze, 1975):

$$\overline{u'^2} \approx \frac{\overline{Y^2}(t)}{t^2} \quad (6.63)$$

mientras que para tiempos de difusión grandes, el coeficiente de dispersión turbulenta D y la escala integral Lagrangiana se calculan a partir de la ecuación (6.60), es decir:

$$D = \frac{\overline{Y^2}(t)}{2 t} \quad (6.64)$$

y

$$T_L = \frac{\overline{Y^2}(t)}{2 t \overline{u'^2}} \quad (6.65)$$

Si se conoce la trayectoria de cada partícula, es posible calcular la varianza de los desplazamientos $\overline{Y^2}$ como función del tiempo (dado que el flujo es tridimensional y la turbulencia es isotrópica, además de evaluar la dispersión de la nube de partículas en la dirección vertical y , es posible determinar, la varianza $\overline{Z^2}$ en la dirección transversal z). La varianza $\overline{Y^2}$ (y $\overline{Z^2}$), se determina a partir de un procedimiento estadístico el cual toma en cuenta que las partículas se liberan mediante una sucesión de nubes esféricas.

El procedimiento estadístico consta de dos etapas: en la primer etapa, se calcula la varianza $\overline{y^2}$ de las partículas (que conforman cada nube), cuando se desplazan con intervalos discretos de tiempo Δt . Es conveniente recordar que en cada intervalo Δt , la trayectoria de cada partícula se calcula desde el tiempo $t=0$ hasta el tiempo $t= \Delta t$, ver capítulo 4. Una vez que todas las partículas han viajado durante el tiempo Δt , se almacena su posición para realizar el promedio estadístico. Este procedimiento se lleva a cabo para todos los incrementos de tiempo Δt , que en conjunto representan el tiempo total de simulación, es decir:

$$t_{tot} = \sum_{i=1}^{i=ntstep} i\Delta t \quad (6.66)$$

donde: i es el i ésimo intervalo de tiempo y $ntstep$ es el número total de intervalos de tiempo. En la segunda etapa, se realiza el promedio estadístico de grupo de las varianzas $\overline{y^2}$. El promedio de grupo, se toma en cada i ésimo intervalo de tiempo.

La expresión para determinar la varianza $\overline{y^2}$, de las partículas que se encuentran en el interior de cada nube (primera etapa), es la siguiente:

$$\overline{y^2}_{j,i} = \frac{1}{n_p} \sum_{k=1}^{n_p} ((y_k)_{j,i} - (y_k)_o)^2 \quad (6.67)$$

donde: $\overline{y^2}_{j,i}$, es la varianza de las partículas localizadas en la j ésima nube, al final del i ésimo intervalo de tiempo ($i\Delta t$), n_p es el número de partículas en el interior de la nube, $(y_k)_{j,i}$ es la posición vertical de la k ésima partícula que se ubica en la j ésima nube, al final del i ésimo intervalo de tiempo ($i\Delta t$), y $(y_k)_o$ es la posición vertical inicial y, de la k ésima partícula en el interior de la nube. Nótese que cada partícula dentro de la nube, tiene una diferente posición inicial $(y_k)_o$ (generada a partir de números aleatorios), sin embargo, la posición inicial de la k ésima partícula es la misma para todas las nubes esféricas. Una relación semejante se utiliza para calcular la varianza $\overline{z^2}$, a lo largo del la dirección transversal.

En la segunda etapa, la varianza $\overline{Y^2}$, se encuentra a partir de llevar a cabo un promedio de grupo, el cual se expresa a partir de la siguiente relación:

$$\overline{Y^2}_i = \frac{1}{ntstep - i + 1} \left[\sum_{j=1}^{ntstep-i+1} \overline{y^2}_{j,i+j-1} \right] \quad (6.68)$$

donde $\overline{Y^2}_i$, es la varianza en el i ésimo intervalo de tiempo ($i\Delta t$), el valor de $ntstep$, corresponde al número total de nubes que se liberan, $ntstep-i+1$ representa el número de nubes que han viajado (en el tiempo) hasta el final del i ésimo intervalo de tiempo ($i\Delta t$) y $\overline{y^2}_{j,i+j-1}$ es la varianza de la j ésima nube que viajó (en el tiempo) hasta el final del i ésimo intervalo de tiempo ($i\Delta t$) después de $(j+i-1)$ intervalos de tiempo. Un procedimiento semejante se llevó a cabo para calcular la varianza $\overline{Z^2}$. Puede notarse que a partir de utilizar la expresión (6.68), la varianza $\overline{Y^2}$, en el intervalo de tiempo $i=ntstep$, es decir, $\overline{Y^2}_{ntstep}$ es igual a la varianza de la primera nube, es decir $\overline{y^2}_{1,ntstep}$. Esto implica que la única nube que se toma en cuenta en $i=ntstep$, es la primera en ser liberada. Por otro lado, la varianza promedio en el primer paso de

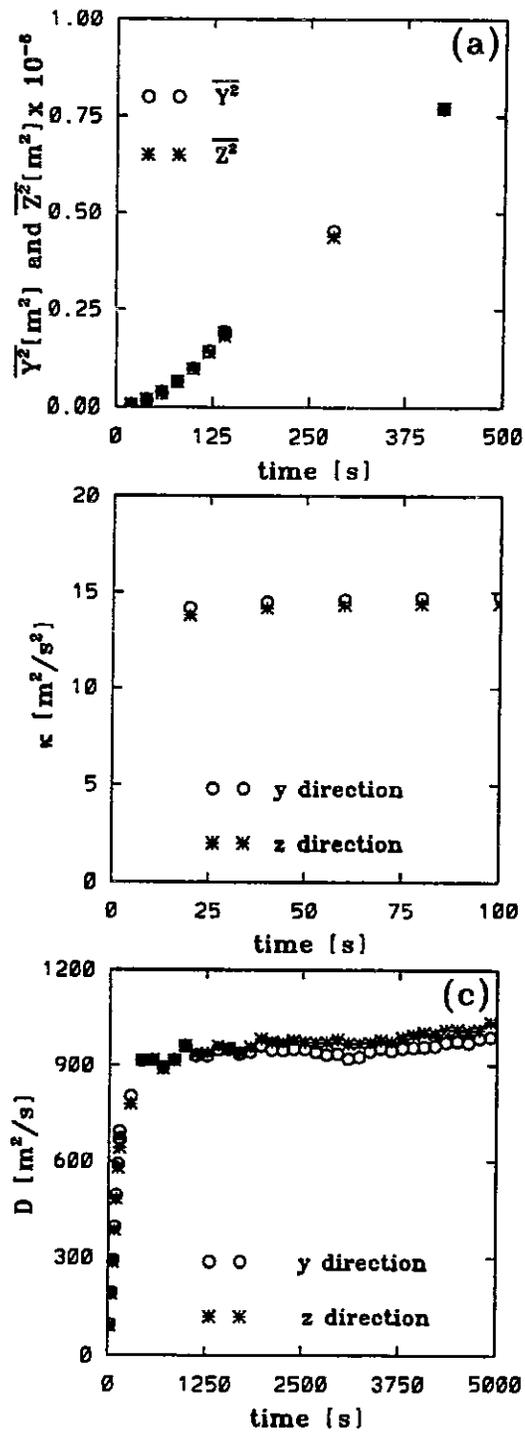


Figura 6.33: Variación de las características turbulentas con respecto al tiempo; (a) varianza de los desplazamientos laterales $\overline{Y^2}$ y $\overline{Z^2}$, (b) energía cinética turbulenta κ para tiempos de difusión pequeños, (c) coeficiente de difusión turbulenta D para tiempos de difusión grandes.

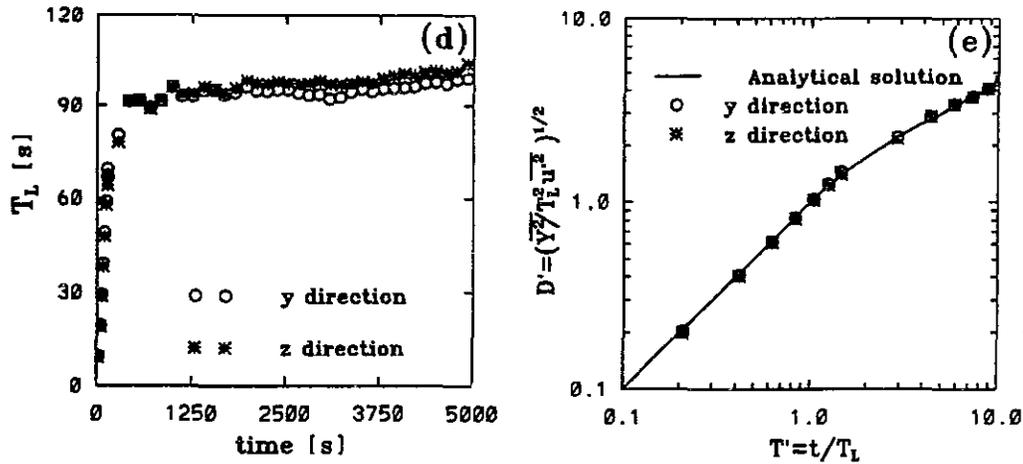


Figura 6.33: (continuación). Variación de las características turbulentas con respecto al tiempo; (d) escala integral de tiempo T_L , (e) Dispersión adimensional D' vs. tiempo adimensional T' .

tiempo $i=1$, $\overline{Y^2}_1$, se calcula a partir de considerar que todas las nubes llegaron a este punto en el tiempo. Una vez que la varianza se calcula como función del tiempo, es posible determinar las características turbulentas del flujo, ver ecs. (6.63-6.65).

En la figura 6.33, se comparan los resultados que se obtienen con el modelo LSD, con la teoría de Taylor. La escala de tiempo de los remolinos turbulentos, que se obtiene a partir de la ec. (6.52), es: $\tau_L=192.3$ s. (el valor de la disipación, ϵ , se obtiene de la ec. ((6.57). Las varianzas $\overline{Y^2}$ y $\overline{Z^2}$ se grafican como función del tiempo en la figura 6.33a. Nótese que si tienen el mismo valor, es debido a que la turbulencia es isótropa. En la figura 6.33b se muestra la energía cinética turbulenta para tiempos de difusión pequeños; estos valores se obtuvieron a partir de la ecuación (6.63) y considerando que la turbulencia es isótropa, es decir $\kappa=3/2 \overline{u'^2}$. En la figura 6.33b, también se presenta la energía cinética turbulenta, que se obtiene al evaluar la dispersión transversal $\overline{Z^2}(t)$, es decir:

$$\kappa = \frac{3}{2} \overline{w'^2} \approx \frac{3}{2} \frac{\overline{Z^2}}{t^2} \quad (6.69)$$

Es alentador observar en la figura 6.33b, que el modelo LSD, a partir de calcular la trayectoria de partículas discretas, recupera el valor de la energía cinética turbulenta que se le proporciona como dato, es decir: $\kappa=15 \text{ m}^2/\text{s}^2$. En la figura 6.33c, se presenta la variación del coeficiente de difusividad turbulenta D , como función del tiempo. Se observa, que el coeficiente D (calculado a partir de la ecuación (6.64)), incrementa con el tiempo, primero linealmente y después tiende a un valor constante. Se observa, que cuando el tiempo de difusión es grande; el modelo recupera adecuadamente el valor que se le proporciona como dato, es decir: $D=1,000 \text{ m}^2/\text{s}$. En la figura 6.33d, se presenta la escala Lagrangiana de tiempo T_L , calculada a partir de la ec. (6.65). Se observa que T_L , tiene el mismo comportamiento que el coeficiente D , es decir, primero se incrementa de

manera lineal y después tiende hacia un valor aproximadamente constante, $T_L \approx 96.1$ s, el cual corresponde aproximadamente al valor de la escala integral de tiempo de la Teoría de Taylor (ver ec. (6.60)). Es decir, si: $D=1,000 \text{ m}^2/\text{s}$ y $\kappa=15 \text{ m}^2/\text{s}^2$, la ecuación (6.60) establece que para turbulencia isótropa, la escala de tiempo es:

$$T_L = \frac{D}{u'^2} = \frac{1,000 \text{ m}^2/\text{s}}{10 \text{ m}^2/\text{s}^2} = 100 \text{ s} \quad (6.70)$$

Wang y Stock (Wang and Stock, 1992b) mencionan; que si en un proceso de Monte Carlo, las fluctuaciones de velocidad se generan con intervalos de tiempo constantes $T_L = \Delta t$, donde: T_L representa la escala integral Lagrangiana "real" de una partícula de fluido, entonces, la escala integral de tiempo que se obtiene con la señal proporcionada por las fluctuaciones de velocidad es $T_L/2$. Lo anterior coincide con los cálculos numéricos que se obtienen con el modelo LSD, ya que con el proceso de Monte Carlo, $T_L=96.1$ s, mientras que la escala Lagrangiana de los remolinos turbulentos, que se le proporcionó al modelo como dato es: $\tau_L=192.3$ s. Wang y Stock mencionan además que si el proceso de Monte Carlo recupera una escala de tiempo que es la mitad de la escala "real", entonces el valor de la difusividad D , también es un medio de la difusividad real. En los resultados que se muestran en la figura 6.33, se observa que el modelo LSD, reproduce los resultados de la Teoría de Taylor, a partir de definir una escala de tiempo de los remolinos turbulentos ec. (6.52). Esta escala de tiempo, se obtiene como función de las características turbulentas del flujo (κ , ϵ y D), las cuales están relacionadas con el coeficiente de auto-correlación R_L y la escala integral de tiempo T_L , ver las ecs. (6.57-6.61). De acuerdo a lo anterior, se concluye que si la escala de tiempo definida por la ec. (6.52), se cuantifica adecuadamente, el proceso de Monte Carlo, reproduce satisfactoriamente la teoría de Taylor.

Si se sustituye el correlograma Lagrangiano de la ec. (6.62) en la ec. (6.60), se obtiene la siguiente expresión analítica adimensional (Pasquill, 1974):

$$D'^2 = T'^2 \quad \text{cuando} \quad t \leq T_L \quad (6.71)$$

$$D'^2 = 2T' - 1 \quad \text{cuando} \quad t \geq T_L \quad (6.72)$$

donde: $D'^2 = \overline{Y^2}/T_L^2 u'^2$ y $T' = t/T_L$. La solución analítica, ecs. (6.71 y 6.72), junto con los resultados del modelo LSD, se presentan en la figura 6.33e (en esta figura, los resultados numéricos se obtuvieron con el valor de la escala integral que se obtiene con el modelo y que corresponde aproximadamente con la teoría de Taylor es decir: $T_L=96.1$ s). Se observa que para $T' < 1$ (tiempos de difusión pequeños), la dispersión $\sqrt{\overline{Y^2}}$ es una función lineal del tiempo y se determina únicamente por la intensidad de turbulencia, ver la ec. (6.63). En la región parabólica $T' > 1$, la dispersión depende de $\sqrt{T_L}$, ver la ec. (6.65). Con los resultados mostrados con anterioridad, se concluye que el modelo LSD, puede ser utilizado para evaluar la dispersión de partículas de fluido que se liberan continuamente, en el interior de un flujo con turbulencia homogénea.

En los siguientes párrafos, se presentará la comparación de los resultados del modelo LSD, con la solución de la ecuación diferencial de advección-difusión de conservación de especies, representada por la ec. (6.56). El caso que se analiza corresponde a la dispersión de partículas de fluidos, que se liberan de forma continua en un flujo uniforme

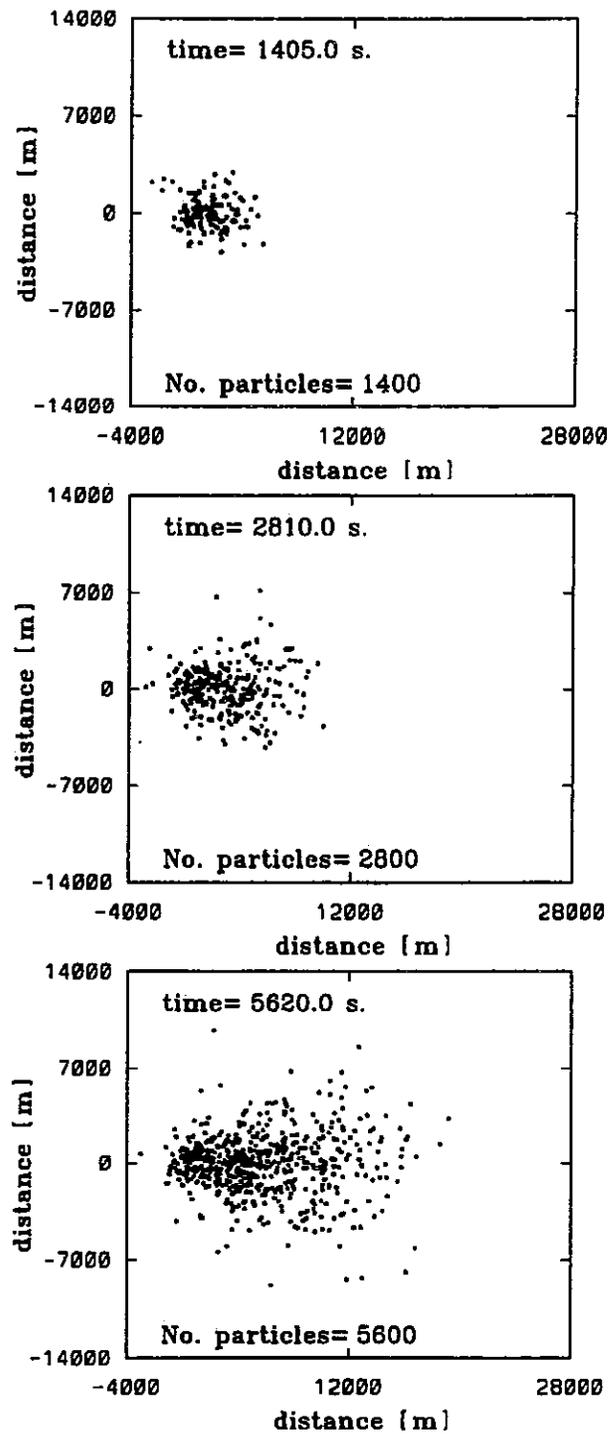


Figura 6.34: Distribución de partículas en el plano x - z . Liberación continua en un flujo turbulento uniforme, $\bar{u}=2$ m/s, $\kappa=15$ m²/s² y $D=1,000$ m²/s. La velocidad media \bar{u} , se dirige de izquierda a derecha.

con turbulencia homogéna, isotrópica y estacionaria. En la simulación, la liberación de partículas se representa por una sucesión de nubes esféricas de radio $a = \sqrt{2} \sigma_o$, donde: $\sigma_o = 20$ m. Cada nube está constituida por 140 partículas de fluido y se libera hacia el dominio con intervalos de tiempo $\Delta t = 140.5$ s, lo que resulta en un flujo de: $Q = 0.996$ partículas/s. El número total de esferas ("puffs") liberadas durante el tiempo de simulación es 53, de tal manera que 7,420 partículas se introducen en el dominio después de 7,446.5 s, de la liberación inicial. Las características medias y turbulentas del flujo, así como las dimensiones del dominio de estudio se mencionaron en párrafos anteriores.

Si la ecuación (6.56) (suponiendo que $D_x = D_y = D_z = D = 1,000$ m²/s) se integra en el tiempo desde $t=0$ hasta el tiempo $t=T$, se obtiene la concentración $\chi(x, y, z, t)$, en unidades de número de partículas dentro de cada celda numérica $\chi_p(x, y, z, t)$ (Lange, 1973):

$$\chi_p(x, y, z, t) = \frac{Q \Delta V}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^T \frac{1}{(\sigma_o^2 + 2DT)^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{(x - \bar{u}t)^2 + y^2 + z^2}{\sigma_o^2 + 2DT} \right] \right\} dt \quad (6.73)$$

donde ΔV , es el volumen de la celda numérica, es decir, $(\Delta x)^3$, donde $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 56,000/27 = 2,074$ m. La ec. (6.73), se integró numéricamente usando la cuadratura numérica de Gauss-Legendre, con una fórmula de quince puntos (Carnahan et al., 1969).

En la figura 6.34, se muestra en el plano $x-z$ (para tres tiempos diferentes), el transporte de las partículas en la dirección longitudinal x y la forma en que la difusión turbulenta actúa para dispersar las partículas en la dirección transversal z . Es conveniente mencionar, que la fuente de liberación se localiza en el punto ($x=y=z=0$ m). La dirección del flujo ($\bar{u}=2$ m/s), es de izquierda a derecha (en la dirección positiva del eje x).

En la figura 6.35, se comparan para tres tiempos diferentes, los resultados del modelo LSD, con la solución numérica de la ec. (6.73). La concentración χ_p que resulta de integrar la ec. (6.73), se obtuvo a lo largo de una línea paralela al eje x , con los valores fijos $y=1,037$ m y $z=1,037$ m y variando el tiempo t . Los resultados del modelo LSD que aparecen en la figura 6.35, corresponden al número de partículas que se encuentran en las celdas Eulerianas, cuyos centros se localizan a lo largo de la línea ($x, 1,037$ m, $1,037$ m). Puede observarse que los resultados de la simulación, coinciden adecuadamente con la solución de la ec. (6.73), especialmente cerca de la fuente, donde las dos soluciones proporcionan concentraciones finitas en la región localizada corriente arriba de la fuente, $x < 0$. Es decir, debido a la alta intensidad de turbulencia relativa $u_{rms}/\bar{u}=1.58$, la difusión en la dirección opuesta a la dirección del flujo medio, no es despreciable. Puede observarse que aunque las celdas numéricas son grandes, en relación al tamaño de la fuente, el modelo LSD ofrece resultados satisfactorios tanto en la región cercana a la fuente (tiempos de difusión pequeños), como en zonas alejadas de ella (tiempos de difusión grandes). En la figura 6.36, se muestra para dos tiempos diferentes, la concentración de partículas a lo largo de la dirección transversal (dispersión transversal). La línea de muestreo que en este caso es paralela al eje z , se localiza en la posición $x=11,407$ m, $y=1,037$ m. Nótese que para tiempos de difusión

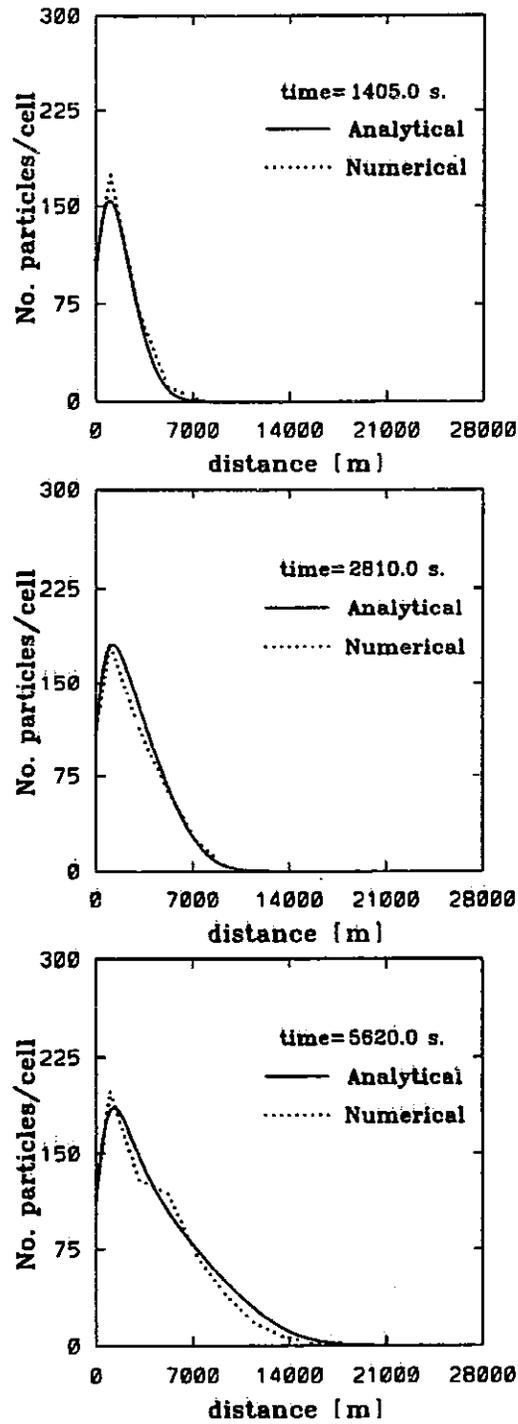


Figura 6.35: Número de partículas en las celdas que se ubican a lo largo de la línea paralela al eje x ($y=1,037$ m, $z=1,037$ m). Liberación continua en un flujo turbulento uniforme, $\bar{u}=2$ m/s, $\kappa=15$ m²/s² y $D=1,000$ m²/s.

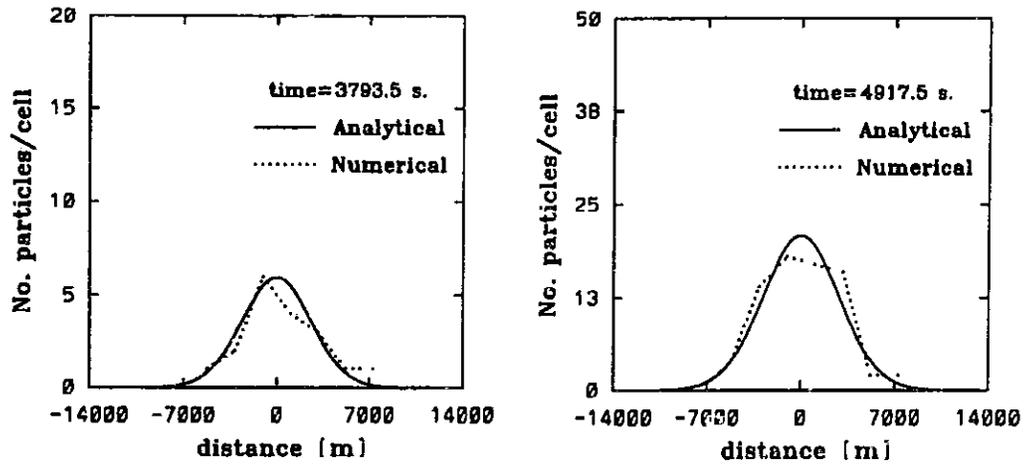


Figura 6.36: Número de partículas en las celdas que se ubican a lo largo de la línea paralela al eje z ($x=11,407$ m, $y=1,037$ m). Liberación continua en un flujo turbulento uniforme, $\bar{u}=2$ m/s, $\kappa=15$ m²/s² y $D=1,000$ m²/s.

grandes, el modelo LSD predice el comportamiento Gaussiano de la dispersión, en el plano $x-z$.

6.4.2 Dispersión de partículas que se liberan de manera instantánea, en un flujo turbulento con cortante

En el segundo caso que se presenta en esta sección, se analiza la difusión turbulenta de una nube de partículas que se libera de manera instantánea. La nube se libera en un flujo con cortante con turbulencia homogénea, isotrópica y estacionaria. La solución analítica de la ecuación (6.56) para estas condiciones, la desarrolló Quesada y MacLeod (Quesada and MacLeod, 1971) y es la siguiente:

$$\frac{\chi(x, y, z, t)}{\chi_0} = \frac{\exp[-y'^2/(1+4\tau)] \exp(-F/G)}{[(1+4\tau)G]^{1/2}} \quad (6.74)$$

donde

$$\chi = [n_p/\Delta V], \quad \chi_0 = [n_{p0}/V_s]$$

$$F = (x' - vz'\tau)^2(1+4\tau) + 4vz'\tau^2(x' - vz'\tau) + z'^2\left(1+4\tau + \frac{4}{3}v^2\tau^3\right)$$

$$G = (1+4\tau)^2 + \frac{4}{3}v^2\tau^3(1+\tau)$$

Las variables adimensionales se definen como:

$$v = \frac{Sa^2}{D} \quad \tau = \frac{tD}{a^2} \quad x' = \frac{x}{a} \quad y' = \frac{y}{a} \quad z' = \frac{z}{a} \quad (6.75)$$

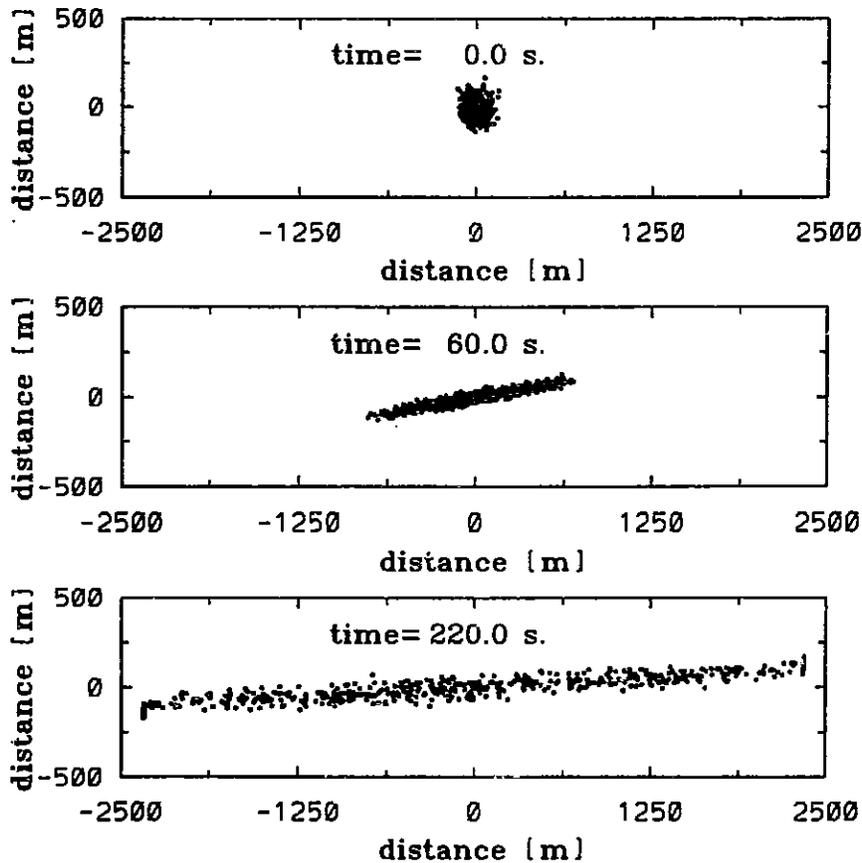


Figura 6.37: Distribución de partículas en el plano $x-z$. Liberación instantánea en un flujo turbulento con cortante, 5,000 partículas, $\bar{u}=0.125$ z , $\kappa=2.4$ m^2/s^2 y $D=15$ m^2/s .

donde: χ_0 es la concentración de partículas en la nube inicial, n_{p0} es el número de partículas que forman la nube y V_s es el volumen de la nube esférica.

La nube instantánea está formada por $n_{p0}=5,000$ partículas. La desviación estándar de la distribución de probabilidad normal, la cual se utilizó para generar la posición inicial de la partícula en el interior de la nube, es $\sigma_0=50$ m. El flujo turbulento tiene el siguiente perfil de la velocidad media \bar{u} ⁸:

⁸El autor desea comentar que en el análisis de este caso, se conservó el sistema de referencia utilizado en los capítulos anteriores, es decir, el eje y se orienta en la dirección vertical. Sin embargo; Quesada y MacLeod (Quesada and MacLeod, 1971), consideraron en su solución analítica, que el eje z se orienta en la dirección vertical. Para comparar los resultados del modelo LSD, con la solución analítica (si se toma en cuenta que no se resuelven las ecuaciones de cantidad de movimiento y que en la ecuación de difusión advección-difusión no se presenta ningún efecto que actúe preferentemente en alguna dirección), no se incurre en ningún error si se utiliza el plano $x-z$ de la solución de Quesada y MacLeod como el plano $x-y$ del modelo. Es decir, en la simulación, la variación de la velocidad media del flujo con cortante se definió en la dirección vertical y . Por tanto en las figuras en donde se presentan los resultados del modelo LSD, figuras 6.38-6.40, cuando se hace referencia al plano $x-z$,

$$\bar{u} = S z, \quad \bar{v} = 0, \quad \bar{w} = 0 \quad (6.76)$$

donde $S=0.125 \text{ s}^{-1}$, es el factor del cortante. Las partículas de fluido se generan en el punto $(x=y=z=0)$, y se dispersan en un dominio Euleriano de dimensiones $(-2,500 \text{ m} \leq x \leq 2,500 \text{ m}, -500 \text{ m} \leq y \leq 500 \text{ m}, -500 \text{ m} \leq z \leq 500 \text{ m})$, el cual se discretiza por una malla tridimensional uniforme de 30^3 volúmenes finitos. De acuerdo a la definición del flujo con cortante ec. (6.76), la velocidad media \bar{u} es positiva cuando $z > 0$, y negativa cuando $z < 0$. Al igual que en el primer caso, las velocidades medias y las características turbulentas del flujo se conocen con anticipación. Para definir las propiedades turbulentas del flujo, se recurrió a los datos que proporciona Detering y Etling (Detering and Etling, 1985), en la capa límite atmosférica en condiciones neutras. Para una altura de 100 m, $\kappa=2.4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $D_x=D_y=D_z=D=\nu_t=15 \text{ m}^2/\text{s}$ y $c_\mu=0.0256$. Si se utiliza la ec. (6.57) para definir la disipación ϵ , el tiempo de vida característico de los remolinos turbulentos es: $\tau_L=73.2 \text{ s}$. La simulación se llevó a cabo hasta 500 s después de la liberación, y se utilizó un incremento de tiempo $\Delta t=10 \text{ s}$. En la figura 6.37, se muestra en el plano $x-z$, la forma en que la nube original es transportada por el flujo con cortante. Se observa también la dispersión de las partículas debido a la difusión turbulenta en la dirección z . En las figuras 6.38 y 6.39, se muestra para diferentes tiempos, la concentración de partículas a lo largo del eje x y del eje z , respectivamente. El número de partículas en el interior de cada volumen de control en la solución analítica ec. (6.74), se obtiene a partir de la expresión:

$$n_p(x, y, z, t) = n_{po} \frac{\Delta V \exp[-y^2/(1+4\tau)] \exp(-F/G)}{V_s [(1+4\tau)G]^{1/2}} \quad (6.77)$$

En las figuras 6.38 y 6.39, se observa que las partículas se dispersan simétricamente con respecto a $x=0$ y con respecto a $z=0$, respectivamente. Si el tiempo de difusión es corto $t=30 \text{ s}$, el modelo LSD, predice un bajo nivel de dispersión, sin embargo cuando $t=60 \text{ s}$, los resultados coinciden satisfactoriamente con la solución analítica. Para tiempos de difusión mayores, $t=260 \text{ s}$, los resultados de la simulación, siguen la tendencia de la solución analítica, sin embargo en el centro del dominio, tal parece que el modelo predice menor dispersión.

En la figura 6.40 se muestra la concentración relativa $\chi(0, 0, 0, t)/\chi_0$, como función del tiempo. Puede observarse que para tiempos de difusión menores a la escala de tiempo de los remolinos turbulentos $\tau_L=73.2 \text{ s}$, los resultados del modelo son muy satisfactorios. Es interesante observar que para tiempos de difusión mayores, el modelo predice un comportamiento oscilatorio, lo cual puede interpretarse como ruido estadístico, ya que la concentración de partículas es muy reducida. Es conveniente recordar que para tiempos de difusión muy pequeños, la difusividad turbulenta es una función lineal del tiempo, ver la figura 6.33c. Sin embargo, en la solución analítica, la difusividad turbulenta es una constante. Esto significa que el modelo LSD debe proporcionar valores de dispersión menores (para tiempos de difusión pequeños), esto se muestra en las figuras 6.38 y 6.39. Para tiempos de difusión grandes, Hinze (Hinze, 1975) menciona que en un flujo turbulento con cortante, no es posible definir un valor

este plano es el correspondiente a la solución analítica, pero corresponde al plano $x-y$ del modelo LSD.

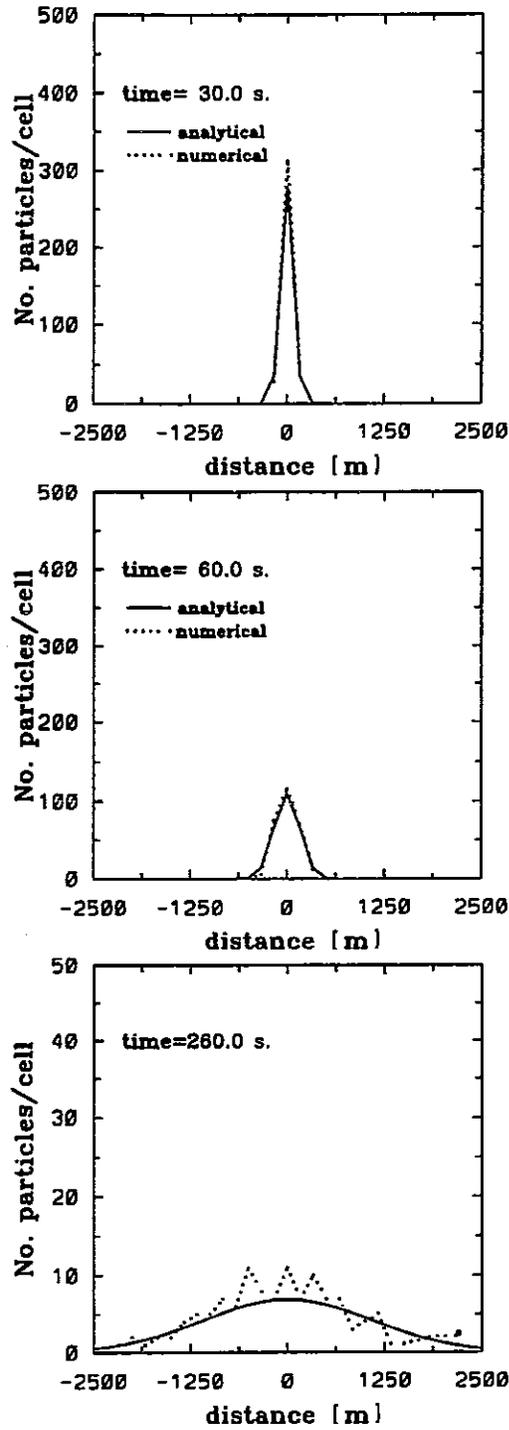


Figura 6.38: Número de partículas en las celdas que se ubican a lo largo del eje x ($y=0$ m, $z=0$ m). Liberación instantánea en un flujo turbulento con cortante, 5,000 partículas, $\bar{u} = 0.125 z$, $\kappa = 2.4$ m^2/s^2 y $D = 15$ m^2/s .

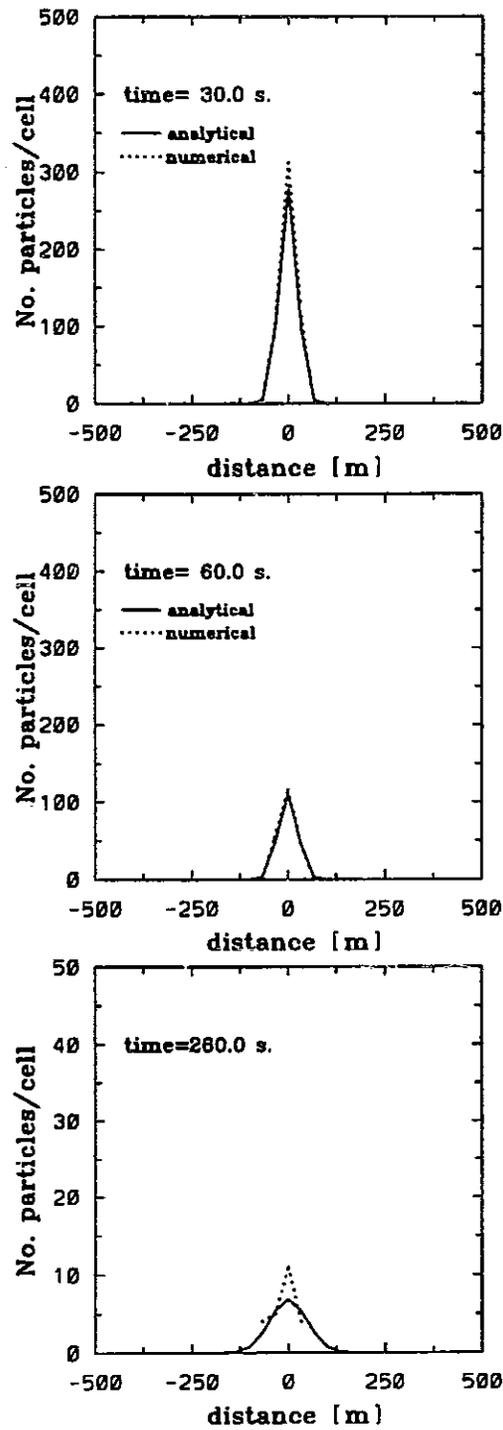


Figura 6.39: Número de partículas en las celdas que se ubican a lo largo del eje z ($x=0$ m, $y=0$ m). Liberación instantánea en un flujo turbulento con cortante, 5,000 partículas, $\bar{u}=0.125z$, $\kappa=2.4$ m^2/s^2 y $D=15$ m^2/s .

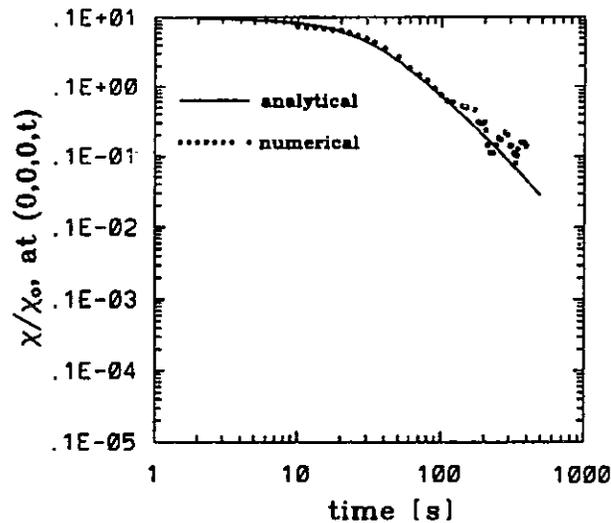


Figura 6.40: Concentración relativa $\chi(0,0,0,t)/\chi_0$, como función del tiempo. Liberación instantánea en un flujo turbulento con cortante, 5,000 partículas, $\bar{u}=0.125$ z, $\kappa=2.4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ y $D=15 \text{ m}^2/\text{s}$.

constante del coeficiente D , en términos de una escala integral de tiempo, y de una velocidad característica de la turbulencia ver ec. (6.60). De acuerdo a los resultados mostrados, puede decirse que para tiempos de difusión largos, el modelo LSD predice menor dispersión que la solución analítica. Esto se debe probablemente a que el modelo no tiene tiempo suficiente para predecir el valor constante del coeficiente D . En un flujo con cortante, es probable que las partículas en su trayectoria cambian continuamente de región (volumen de control), y entran a condiciones de velocidad diferente. Conviene recordar que el modelo LSD, actualiza el tiempo característico de vida del remolino que acompaña a la partícula, cuando se detecta que cambia de celda numérica. Un comportamiento similar fue detectado por Lange (Lange, 1973) al utilizar el modelo ADPIC (ver capítulo de introducción). Lange sin embargo, concluye que la poca dispersión que obtuvo para tiempos de difusión grandes, se debió a la influencia del cortante y a la poca resolución de la concentración χ , la cual se requiere para determinar la velocidad de transporte \bar{u}_d .

En esta sección, se ha mostrado que el modelo LSD predice satisfactoriamente la dispersión de partículas que son liberadas por fuentes continuas e instantáneas. En el caso de fuentes continuas, los resultados del modelo se verificaron con respecto a la teoría de Taylor y con respecto a la solución de la ecuación de advección-difusión de concentración de especies. En el segundo caso, relacionado con la dispersión de partículas en un flujo turbulento con cortante, se mostró que el modelo predice menor concentración que la solución analítica de la ecuación de advección-difusión. Esto es debido a que en el flujo con cortante, el modelo no es capaz de obtener el valor asintótico del coeficiente de difusión D , el cual es utilizado por la solución analítica.

Los resultados que se obtienen con el modelo son muy alentadores y forman la base teórica para estudios posteriores, en los cuales se tomarán en cuenta diversos aspectos tales como: (a) inercia de la partícula, (b) atmósfera estratificada, (c) turbulencia no

homogénea y (d) flujos con topografía compleja.

6.5 Simulación numérica de la dispersión de partículas sólidas en zona de montaña

Para estudiar el comportamiento del modelo Euleriano-Lagrangiano propuesto en este trabajo, se llevó a cabo la simulación numérica de la dispersión de partículas en la zona montañosa localizada en la región de los Geysers, al norte del estado de California en los Estados Unidos de Norteamérica.

6.5.1 Descripción general del experimento en la región de los Geysers, en septiembre de 1980

La región de yacimientos geotérmicos, conocida como la región de los Geysers, fue seleccionada por el programa "Atmospheric Studies in Complex Terrain" (ASCOT) del Departamento de Energía de los E.U.A., para estudiar el impacto sobre la calidad del aire que tiene la liberación de gases contaminantes, principalmente el sulfuro de hidrógeno (Gudiksen, 1983).

El programa ASCOT; tiene la tarea de desarrollar la tecnología necesaria para determinar las características atmosféricas, y evaluar el impacto sobre la calidad del aire de los recursos energéticos localizados en zonas con terreno complicado. El programa ASCOT, tiene tres actividades principales: llevar a cabo mediciones de campo, realizar investigación teórica de la física de la atmósfera y desarrollar modelos matemático-computacionales. El objetivo común de estas actividades, es proporcionar una metodología que permita evaluar la calidad del aire en zonas con topografía compleja.

En septiembre de 1980, el programa ASCOT realizó una intensa campaña de medición en la región de los Geysers, con el propósito de obtener datos meteorológicos y datos relacionados con la dispersión y concentración de gases trazadores. La obtención de estos datos permitiría comprender el transporte y la difusión del material trazador, en el interior de un flujo nocturno dominado por la topografía del terreno (Gudiksen, 1983).

La región de yacimientos geotérmicos, está localizada aproximadamente a 120 km al norte de San Francisco California. En esta región, se localiza el valle Anderson Springs, el cual fue seleccionado para realizar el experimento de septiembre de 1980. El valle Anderson Springs (ver figura 6.41), tiene aproximadamente ocho kilómetros de longitud y está limitado al oeste por las montañas Mayacamas, al sur por la montaña Pine, al noroeste por la montaña Cobb y al noreste por la montaña Boggs. Hacia el valle Anderson Springs, fluyen los arroyos: Putah, Anderson, Gunning y Bear. El valle, tiene una topografía rugosa ocasionada por el escurrimiento de los cuatro arroyos. El terreno en el valle varía en distinta forma, puede encontrarse desde suelo al descubierto, hasta vegetación de bosques.

El programa ASCOT llevó a cabo en el valle Anderson Springs, campañas de medición de datos meteorológicos durante todo el año de 1980. Sin embargo, en un periodo de tres semanas (el cual dió inicio el 8 de septiembre de 1980), se realizaron

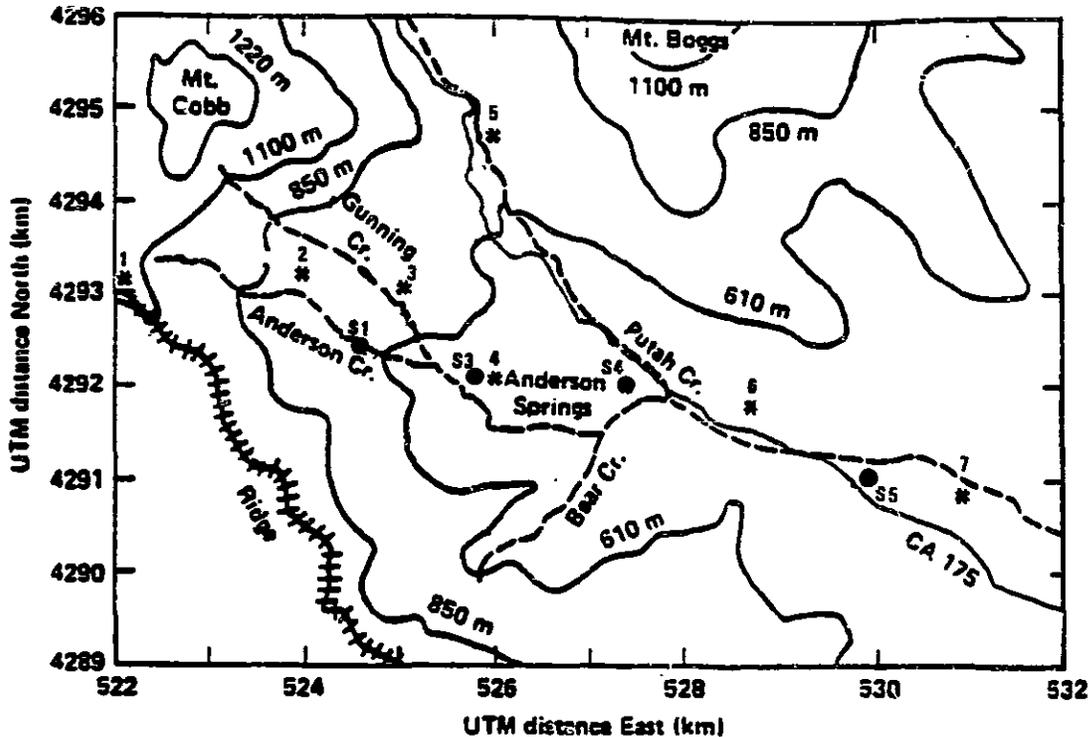


Figura 6.41: Valle Anderson Springs, con los arroyos Anderson, Gunning y Putah, rodeado por las montañas Mayacamas, la montaña Cobb y la montaña Boggs. (*) sondas meteorológicas (1-7), ver tabla 6.1. (●) muestreadores secuenciales de superficie S1, S3, S4, S5.

cinco experimentos nocturnos (independientes uno del otro), en los cuales se liberaron partículas trazadoras de gas. Los experimentos comenzaron a las 23000 PST (Pacific Standard Time), en el momento en que se inició la liberación simultánea, de tres gases trazadores distintos: dos perfluorocarbonos C_7F_{14} (PMCH) y C_8F_{16} (PDCH), y un hexafluoruro de azufre SF_6 . La liberación de cada gas trazador se llevó a cabo durante una hora, desde las 2300 PST a las 0000 PST. Los gases PMCH, PDCH y SF_6 se liberaron en la zona cercana al yacimiento de los arroyos Anderson, Gunning y Putah respectivamente. En este trabajo, únicamente se presenta la simulación numérica de la liberación del arroyo Anderson. La noche del 19-20 de septiembre de 1980, se liberó durante una hora (2300-0000 PST) un total de 416 g de PMCH, a una altura de 1.5 m.

Cada uno de los cinco experimentos, finalizó aproximadamente a las 0500 PST del

día siguiente, después de que los gases trazadores habían abandonado el valle. Los datos meteorológicos fueron coleccionados mediante una extensa red de monitoreo que incluyó equipo instalado en: globos de gas (anclados), torres de medición y estaciones de superficie. La concentración promedio de los gases trazadores, se midió tanto en la superficie como en la dirección vertical, esto último se realizó con instrumentos colocados en globos de gas anclados a la superficie terrestre. Un resumen del equipo de medición que se utilizó en los cinco experimentos y una lista de los diversos laboratorios norteamericanos que participaron durante la campaña, es presentado por Lange (Lange, 1985).

En el presente estudio, al igual que lo hizo Lange (Lange, 1985), se utilizaron únicamente los datos de la cuarta noche (septiembre 19 y 20). El experimento de la cuarta noche, tuvo características particulares, ya que existió poca interacción entre el flujo dominado por la topografía del terreno, y el viento sinóptico del noroeste. El experimento de la noche del 19 y 20 de septiembre, fue seleccionado por los investigadores del programa ASCOT, como el experimento base a ser estudiado.

Los datos meteorológicos que se tomaron en el valle Anderson Springs, durante los cinco experimentos nocturnos, fueron básicamente de cuatro tipos: datos de superficie, mediciones en torres meteorológicas, perfiles verticales y anemómetros laser.

Mediciones en la superficie:

La red de monitoreo de datos superficiales, estuvo integrada por 27 estaciones meteorológicas portátiles. En las estaciones se midieron: velocidad, dirección y temperatura del aire atmosférico a una altura de 4.5 m. La distribución de las 27 estaciones portátiles las presenta Gudiksen (Gudiksen, 1983).

Torres meteorológicas

Se colocaron siete torres meteorológicas de 10 m de altura para medir velocidad, dirección y temperatura del aire. Adicionalmente se colocó una torre de 60 m de altura, en la cual fue posible tomar mediciones de velocidad, dirección y temperatura en los niveles de 5, 10, 15, 20, 30, 40, 50 y 60 m de altura. La localización de las torres las reporta Gudiksen (Gudiksen, 1983).

Perfiles verticales:

La distribución vertical de velocidad, dirección y temperatura del aire atmosférico, se obtuvo con equipo instalado en siete sondas montadas en globos de gas (anclados). La ubicación de las sondas la presenta Gudiksen (Gudiksen, 1983) y se muestra en la figura 6.41. Con el propósito de tener una representación de la distribución de velocidades en una sección transversal del valle, las sondas se colocaron aproximadamente en línea recta. Este sistema de medición, proporcionó información hasta una altura de 500 m sobre la superficie. Las mediciones se tomaron con un ascenso/descenso que duró aproximadamente una hora. La ubicación de las sondas se presenta en la tabla 6.1.

Anemómetros Laser:

Un total de ocho anemómetros laser, se utilizaron en los experimentos. Los anemómetros proporcionaron información sobre la velocidad promedio en la dirección normal a la trayectoria óptica. La colocación de los anemómetros es reportada por Lange (Lange, 1985).

La concentración promedio de los gases trazadores PMCH/PDCH, se midió mediante 43 muestreadores de superficie y por una estación que reportó la distribución

Número	Sonda ^a	UTMX ^b	UTMY ^c	ASNM ^d	x ^e	z ^f
1	Ridge	522.5 km	4,293 km	1,143 m	500 m	3,000 m
2	Unit 19	524 km	4,293.25 km	771 m	2,000 m	2,750 m
3	Thorne 7	525 km	4,293 km	649 m	3,000 m	3,000 m
4	Rancho T	526 km	4,292 km	530 m	4,000 m	4,000 m
5	Larrys Q	526 km	4294.5 km	655 m	4,000 m	1,500 m
6	Oakmont	528.25 km	4,292 km	402 m	6,250 m	4,000 m
7	D. East	531.25 km	4,290.75 km	344 m	9,250 m	5,250 m

Tabla 6.1: Ubicación de las sondas utilizadas para medir la distribución vertical de datos meteorológicos. Experimento en el valle Anderson Springs, septiembre de 1980.

^anombre de la sonda.

^bcoordenadas "Universal Transverse Mercator" en la dirección este.

^ccoordenadas "Universal Transverse Mercator" en la dirección norte.

^dAltura Sobre el Nivel del Mar.

^ecoordenada x en la simulación numérica.

^fcoordenada z en la simulación numérica.

vertical. Tres tipos de muestreo se realizaron: (a) medición secuencial, la cual sirvió para observar el paso de la nube, con tiempos de muestreo entre 10 y 20 minutos, (b) medición con tiempos de muestreo largos, entre 1 y 2 horas, para observar la extensión de la nube y (c) muestreo mediante globos, para observar el mezclado vertical del gas trazador.

En la figura 6.41, se presenta la distribución de los muestreadores secuenciales de PMCH. Los muestreadores secuenciales se ubicaron a lo largo del arroyo Anderson (S1, S3, S4 y S5). La localización de los 40 medidores de concentración superficial de PMCH, con tiempo de muestreo de 2 hrs, la reporta Gudiksen (Gudiksen, 1983). El muestreo vertical de los gases trazadores PMCH/PDCH se realizó mediante instrumentos instalados en un globo de gas cuya localización coincidió con la posición del muestreador secuencial S4 (ver figura 6.41). La concentración promedio (1 hora) del gas PMCH, se midió verticalmente en cuatro niveles hasta una altura de 400 m.

6.5.2 Discretización de la región de estudio y condiciones de frontera

La región seleccionada para llevar a cabo la simulación numérica de las características medias y turbulentas del aire atmosférico, y la predicción de la dispersión de partículas, se presenta en la figura 6.42. Las dimensiones del paralelepípedo que se muestra en la figura son: 10,000 m, 1,300 m y 7,000 m, en las direcciones x , y y z respectivamente. La región de estudio, se discretizó con una malla numérica de 41 celdas en la dirección longitudinal x , 28 celdas en la dirección vertical y y 29 celdas en la dirección transversal z . La discretización en cada dirección es uniforme de tal manera que cada volumen de control tiene las dimensiones: $\Delta x = 243.9$ m, $\Delta y = 46.4$ m y $\Delta z = 241.3$ m.

En la figura 6.42 (figura superior), puede observarse hacia el noroeste la montaña Cobb, la cual tiene un altura promedio de 1,400 m sobre el nivel del mar. En el noreste

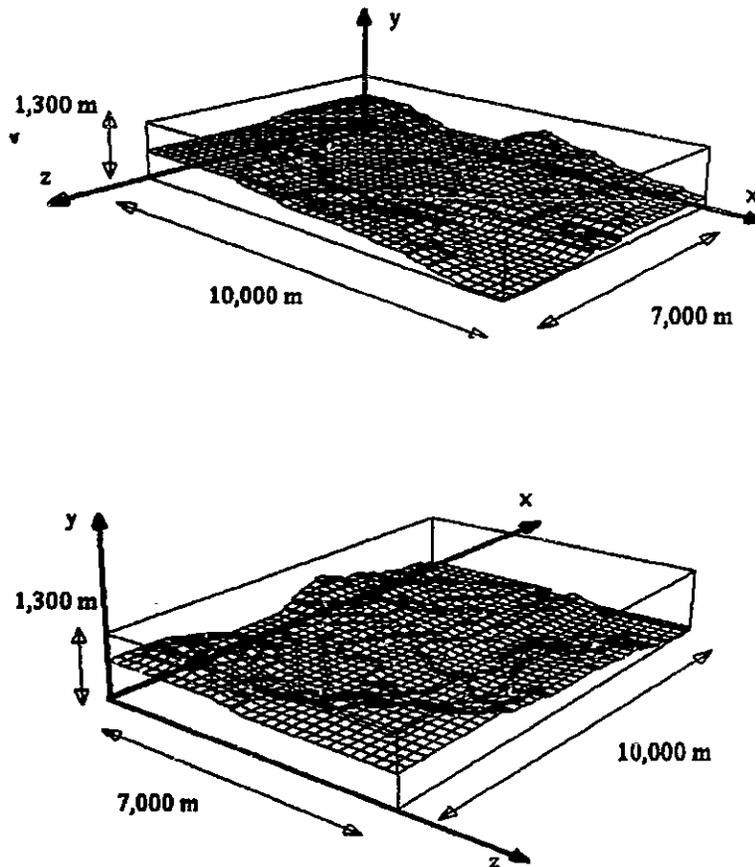


Figura 6.42: Perspectiva del valle Anderson Springs, en la región de los Geysers, 120 km al norte de San Francisco, California. La región se discretizó utilizando una malla numérica de $41 \times 28 \times 29$ volúmenes de control en las direcciones: x , y y z respectivamente.

puede observarse la montaña Boggs con un altura de 1,300 m. La región más baja del valle Anderson Springs se localiza hacia el sureste con una altura de 350 m sobre el nivel del mar.

En la simulación numérica, la región de menor altura del valle (sureste) se ubicó en el plano $x-z$ localizado en la posición vertical $y=0$ m. La orientación de los ejes cartesianos se definió en base a la regla de la mano derecha (ver figura 6.42), por lo que el origen de los ejes, se localiza en el punto con coordenadas UTMX=522 km y UTM Y=4,296 km (ver figura 6.41). En la dirección vertical, el origen de los ejes cartesianos se localiza a una altura de 350 m sobre el nivel del mar. En la simulación numérica, entre el punto de menor nivel $y=0$ m y el punto de mayor altura (monte Cobb), existe una diferencia de 1050 m, por lo que cinco celdas numéricas son utilizadas para determinar el flujo de aire por arriba del punto más alto de la región (monte Cobb).

La topografía de la zona montañosa, se generó mediante el procedimiento conocido como "bloqueo de volúmenes de control", descrito en detalle por Patankar (Patankar,

1980). Mediante este procedimiento, la velocidad del aire en las celdas numéricas ubicadas en la región sólida (zona de montaña), se obliga a ser cero a partir de la definición de términos fuente que se introducen artificialmente en las ecuaciones de cantidad de movimiento en las tres direcciones.

Aunque la campaña de medición de septiembre de 1980, involucró un gran esfuerzo de varios laboratorios nacionales de los E.U.A, los datos obtenidos no son suficientes para definir las condiciones iniciales y de frontera de un modelo de pronóstico como el que se presenta en este trabajo. En el experimento del valle Anderson Springs, no se colocaron instrumentos de medición de las condiciones meteorológicas, a lo largo de las caras laterales del paralelepípedo que se presenta en la figura 6.42 ⁹. El punto de medición, más cercano a la frontera oeste, plano $(0,y,z)$ de la figura 6.42, fue la sonda Ridge (ver figura 6.41 y tabla 6.1). Los datos obtenidos con esta sonda (hasta una altura de 500 m), indican que durante toda la noche del 19-20 de septiembre de 1980, el viento provino del oeste (270°) y del noroeste (290° a 340°), con un velocidad en promedio de 4 m/s aproximadamente. En el apéndice D, se presenta un ejemplo típico de los datos que se midieron en cada una de las siete sondas que se enlistan en la tabla 6.1. Los datos corresponden al ascenso (hasta una altura de 500 m aproximadamente), símbolo Δ y al descenso, símbolo ∇ , de cada sonda. Los perfiles verticales que se midieron en cada sonda son: (a) dirección del viento en grados (DD) (360° indica que el viento fluye desde el norte, 270° indica que el viento fluye desde el oeste), (b) velocidad del viento en m/s (S), (c) relación de mezcla en gramos de vapor de agua a kg de aire seco, (d) humedad relativa (%), (e) temperatura potencial (K) y (f) temperatura ($^\circ\text{C}$). Gudiksen (Gudiksen, 1983), presenta de manera extensa la recopilación de los datos que se adquirieron durante los cinco experimentos de septiembre de 1980.

En la figura D.1, puede observarse que entre las 2258 y 2347 PST del día 19 de septiembre, a un altura superior a los 100 m, la sonda Ridge midió vientos provenientes del oeste (270°), con una velocidad promedio del orden de 4 m/s. Debido a que la dirección y la velocidad del viento en la sonda Ridge, permaneció prácticamente invariable durante la noche del 19-20 de septiembre, estos valores se tomaron como dato para la condición de frontera impuesta en la superficie oeste del paralelepípedo que representa el dominio en estudio. Tomando en cuenta lo anterior, en la frontera oeste, se consideró que la velocidad en la dirección x es $\bar{u} = 4$ m/s, mientras que la velocidad en las direcciones y y z , se consideró igual a cero, es decir $\bar{v} = \bar{w} = 0$ m/s.

Definir las condiciones del viento en la frontera norte del dominio en estudio, no fue sencillo ya que desafortunadamente, no se tienen datos que indiquen la magnitud de la velocidad del aire que entra por esta frontera. El punto de medición más cercano a la frontera norte fue la sonda Larrys Q (ver figura 6.41 y tabla 6.1). En la figura D.5, puede observarse que entre las 2300 y las 2350 PST del 19 de septiembre, cerca de la superficie, el viento proviene del norte (360°), con una velocidad promedio de aproximadamente 2 m/s, sin embargo a un altura entre 200 m y 500 m, la velocidad disminuye, y el viento tiene una dirección que varía con la altura entre 270° (viento del oeste) y 90° (viento del sur). Por arriba de los 500 m, se observa que el viento proviene del norte, con una velocidad entre 0.5 y 1.0 m/s. De acuerdo a lo anterior, la condición

⁹En la simulación numérica, las caras del paralelepípedo constituyen las fronteras de la región de estudio.

de frontera en la cara norte del paralelepípedo, se definió como sigue ¹⁰: $\bar{u}=\bar{v}=0$ m/s y $\bar{w}=0.5$ m/s.

Para definir la condición de frontera en la cara sur del paralelepípedo, se analizaron las mediciones de la sonda más cercana a esta frontera (sonda 7 de la tabla 6.1) y los resultados numéricos del modelo de diagnóstico MATHEW (Lange, 1985). En la figura D.7, puede observarse que el viento (al pasar por la sonda D. East entre las 0222 y las 0240 PST del 20 de septiembre), proviene del oeste (270°), con una velocidad (por arriba de los 200 m de altura) que se aproxima a los 4 m/s. En la solución numérica que presenta Lange (Lange, 1985), es posible observar que las líneas de flujo cerca de la frontera sur, provienen del oeste por lo que son paralelas a la frontera sur. De acuerdo a lo anterior, se decidió considerar en esta frontera, las siguientes condiciones: $\bar{u}=4$ m/s, $\bar{v}=\bar{w}=0$ m/s.

En la cara superior del paralelepípedo, se fijaron las siguientes condiciones: $\bar{u}=4$ m/s, $\bar{v}=0$ m/s, $\bar{w}=0.5$ m/s.

En la frontera este de la región de estudio, se considera que el viento tiene únicamente la componente de velocidad \bar{u} . La magnitud de la velocidad en esta frontera, se determina en el procedimiento de cómputo, a partir de satisfacer los principios de conservación de masa y cantidad de movimiento.

La condición de frontera que se utiliza en el valle y en la región de montaña (topografía del terreno), está representada por las leyes logarítmicas de pared, las cuales se han explicado en detalle con anterioridad en este capítulo y en el capítulo 3.

La condición inicial del campo de velocidades medias y de las características turbulentas, se definió de tal manera que se supone que el viento en el interior del dominio, se encuentra en reposo.

La simulación numérica del comportamiento del aire atmosférico, se llevó a cabo desde las 2220 a las 0500 PST (24,000 s \equiv 6hrs 40 min). Las ecuaciones diferenciales de la fase continua se resolvieron utilizando un incremento de tiempo Euleriano $\Delta t=100$ s.

El tiempo que la computadora CRAY-YMP de la UNAM requirió para resolver el campo de flujo (con 18,000 partículas en suspensión), durante los 240 intervalos de tiempo, fue de 33 hrs de CPU.

6.5.3 Condiciones generales de la liberación de partículas sólidas, en la simulación numérica

En la literatura, no es posible encontrar datos experimentales relacionados con la dispersión atmosférica de partículas sólidas en condiciones controladas. Muchos de los datos que se obtuvieron durante los experimentos realizados en el estado de Nevada en los E.U.A. (1955-1963), en donde se liberaron partículas de material radioactivo debido a la detonación de un explosivo químico, aún permanecen como información clasificada (Boughton and DeLaurentis, 1992).

¹⁰Para determinar el valor de la velocidad \bar{w} en la frontera norte, se realizaron diversas corridas de cómputo variando el valor de la velocidad \bar{w} , en el rango 0-1 m/s. Desde el punto de vista cualitativo se observó que el valor de 0.5 m/s, podría representar adecuadamente la dispersión de las partículas.

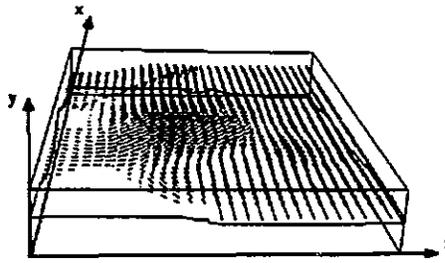


Figura 6.43: Perfil de velocidades en el plano x - z localizado a 1,110 m sobre el nivel del mar (2400 PST). Experimento en el valle Anderson Springs, 19-20 de septiembre de 1980. Velocidad en la dirección x , $\bar{u}=4$ m/s, velocidad en la dirección z , $\bar{w}=0.5$ m/s.

Debido a la falta de información experimental relacionada con la dispersión de partículas sólidas en la atmósfera, se recurrió a utilizar los datos obtenidos en el valle Anderson Springs. Como se mencionó anteriormente, en la región de los Geysers, en septiembre de 1980, se liberaron gases trazadores, por lo que; para simular numéricamente estos experimentos, se decidió utilizar partículas sólidas que tuvieran por un lado, un tiempo característico de respuesta dinámica pequeño, mientras que por otro lado, tuvieran efectos de inercia y trayectorias cruzadas. Para tal propósito, se seleccionaron partículas sólidas de forma esférica con densidad media de 50 kg/m^3 (con desviación estándar de 10 kg/m^3) y diámetro medio de $100 \times 10^{-6} \text{ m}$ (con desviación estándar de $10 \times 10^{-6} \text{ m}$). Con estas condiciones, el tiempo característico de respuesta dinámica de las partículas, en el régimen de Stokes ($Re_p < 1$, $f = 1$), es $\tau_p = 0.00187 \text{ s}$ (ver la ec. (4.10)). Con este valor de τ_p , y tomando en cuenta que el incremento de tiempo Lagrangiano δt para integrar las ecuaciones de cantidad de movimiento de cada partícula, fue aproximadamente constante e igual a $\delta t = 0.5 \text{ s}$, las partículas adquieren inmediatamente la velocidad del aire en las direcciones x y z , ya que el término exponencial de las ecuaciones (4.18) y (4.20) es prácticamente cero. Debido a la relación de densidades entre el aire y las partículas ($\rho/\rho_p = 0.0235$), el término de gravedad de la ecuación (4.19), permite que se presente el efecto de trayectorias cruzadas.

En la simulación numérica, se liberaron un total de 18,000 partículas en un lapso de 1 hora (23000-0000 PST). Como se mencionó anteriormente, el incremento de tiempo Euleriano fue $\Delta t = 100 \text{ s}$, por lo que la liberación tuvo lugar durante 36 intervalos de tiempo Δt . Es decir, se liberaron 36 "puff", cada uno con 500 partículas. Cada nube ("puff") liberada, tuvo inicialmente forma esférica con un diámetro de 2 m. La posición inicial de cada una de las 500 partículas (en el interior de cada "puff") se generó aleatoriamente, tal y como se explicó en el capítulo 4.

La liberación de partículas dió inicio, después de que las ecuaciones de transporte

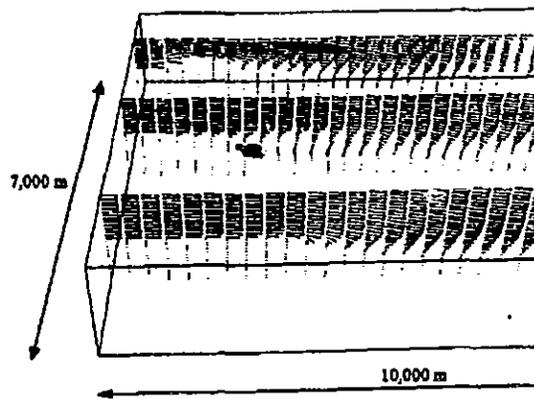


Figura 6.44: Perfiles de velocidad en diferentes planos x - y (2400 PST). El plano central se ubica en la zona de liberación de partículas. Experimento en el valle Anderson Springs, 19-20 de septiembre de 1980. Velocidad en la dirección x , $\bar{u}=4$ m/s, velocidad en la dirección z , $\bar{w}=0.5$ m/s.

y conservación del aire de la atmósfera se calcularon durante 40 min \equiv 2,400 s \equiv 24 iteraciones (2220-2300 PST). Debido a la topografía de la región y a las condiciones del flujo, este tiempo no fue suficiente para que el flujo adquiriera la condición de flujo estacionario, por lo que la dispersión de partículas se determinó con un campo de velocidades que estuvo cambiando en el tiempo.

Las partículas se liberaron en el yacimiento del arroyo Anderson (750 m sobre el nivel del mar) en la posición UTMX=524 km ($x=2,000$ m) y UTMY=4292.75 km ($z=3,250$ m). En la simulación, las partículas se liberaron con una velocidad inicial igual a cero.

6.5.4 Presentación de resultados

A continuación se presentan los resultados obtenidos con el modelo ATFLOW-LSD, relacionados con el campo de velocidades y con la dispersión de partículas en el valle Anderson Springs. Es conveniente aclarar que debido a que no se cuenta con suficiente información, tanto para definir las condiciones de frontera del dominio, como para inicializar el modelo, la comparación de los resultados de la simulación numérica, con los datos experimentales, debe ser considerada exclusivamente como cualitativa.

En la figura 6.43, se presenta el campo de velocidades en el plano x - z , localizado a 1,150 m sobre el nivel del mar ($y=765$ m en la simulación), a las 2400 PST, es decir, después de 6,000 s \equiv 60 incrementos de tiempo Δt de haberse iniciado el proceso de cálculo. Puede observarse el chorro "jet" de aire que entra por el norte con una velocidad $\bar{w}=0.5$ m/s y que se introduce entre las montañas Cobb y Boggs. Se observa que el "jet" perturba las líneas de flujo que entran por el oeste con una velocidad de 4 m/s.

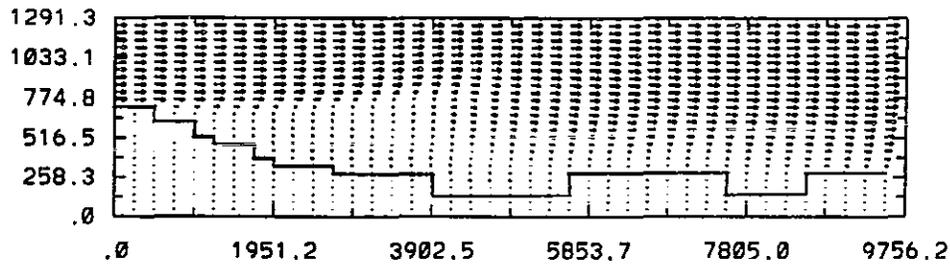


Figura 6.45: Perfil de velocidades (después de 24,000 s) en el plano x - y donde se ubica la sonda Ridge (3^a hilera de vectores de izquierda a derecha) y la sonda Thorne 7 (13^a hilera de vectores), UTM Y =4,293 km (z =3,000 m).

En la figura 6.44, se presenta un acercamiento de la región oeste del dominio en estudio. En la figura se muestran los vectores de velocidad en tres planos x - y calculados a las 2400 PST. En el plano central (el cual incluye el punto en donde se liberan las partículas), se observa que existe una amplia zona de recirculación motivada por el súbito aumento de la sección transversal por donde fluye el aire. Es importante mencionar que en la región cercana al punto de liberación de las partículas, el aire tiene una componente de velocidad vertical positiva, la cual motiva que las partículas se eleven hasta alcanzar la corriente libre del aire que entra por el oeste. Las velocidades negativas en la dirección del eje x , motivan la precipitación de partículas en la zona de montaña ubicada corriente arriba del punto de liberación. En esta figura se observa, que el campo de velocidades del plano central se recupera (deja de existir zona de recirculación) en el extremo derecho de la figura, que corresponde a una posición UTM X =528 km. En la figura 6.44 puede observarse que el modelo predice un aumento de la velocidad del viento en donde se presenta una disminución de la sección transversal del flujo (flujo sobre la montaña Cobb).

En la figura 6.45, se muestran los vectores de velocidad en el plano x - y sobre el cual se ubican las sondas Ridge y Thorne 7, UTM Y =4,293 km (z =3,000 m). El campo de velocidades es el que se presenta a las 0500 PST del día 20 de septiembre, es decir, después de 24,000 s (240 incrementos Δt) de haberse iniciado el proceso de cómputo. La sonda Ridge se localiza en la posición x =500 m (tercer hilera de vectores de izquierda a derecha). Puede observarse que la distribución vertical de la velocidad en el punto donde se ubica la sonda Ridge, indica que el viento proviene del oeste (270°) con una velocidad de 4 m/s, excepto en el punto inferior el cual recibe la influencia de la superficie sólida. Este resultado coincide con los datos experimentales que se muestran en la figura D.1. La sonda Thorne 7, se localiza en la posición x =3,000 m (13^a hilera de vectores de izquierda a derecha). Puede observarse que esta sonda se localiza en la zona de recirculación, y muy cerca del lugar de la liberación de las

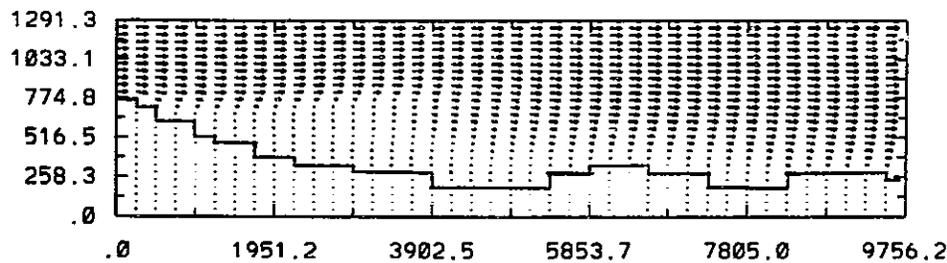


Figura 6.46: Perfil de velocidades (después de 24,000 s) en el plano x - y donde se ubica la sonda Unit 19 (10ª hilera de vectores de izquierda a derecha), UTM Y =4,293.25 km (z =2,750 m).

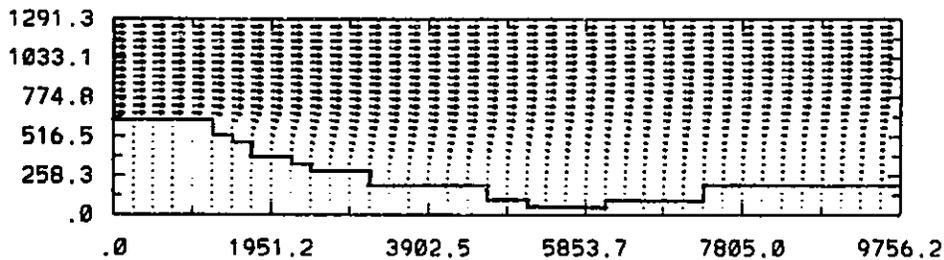


Figura 6.47: Perfil de velocidades (después de 24,000 s) en el plano x - y donde se ubica la sonda Rancho T (18ª hilera de vectores de izquierda a derecha), y la sonda Oakmont (26ª hilera de vectores de izquierda a derecha), UTM Y =4,292 km (z =4,000 m).

partículas. La componente de velocidad es negativa desde $y=287$ m hasta $y=700$ m (413 m de diferencia). A partir de esta altura, el aire adquiere rápidamente la velocidad de la corriente libre (4 m/s). En la figura D.3, se observa que la sonda Thorne 7 midió cerca de la superficie (0-10 m) velocidades que provienen del norte. Sin embargo, por arriba de los 10 m y hasta los 425 m (415 m de diferencia), se presenta una marcada tendencia del viento a provenir del sureste (90° - 180°). A partir de los 425 m y hasta los 500 m de altura, el viento proviene del noroeste (275° - 350°) (corriente libre del viento).

En la figura 6.46 se muestra la distribución de velocidades en el plano x - y en donde se ubica la sonda Unit 19, UTM Y =4,293.25 km (z =2,750 m). La sonda Unit 19 se localiza en la posición $x=2,000$ m (10ª hilera de vectores de izquierda a derecha). Puede observarse que esta sonda se localiza también en la zona de recirculación, por lo que el comportamiento del aire de la atmósfera es muy semejante al que se encontró en

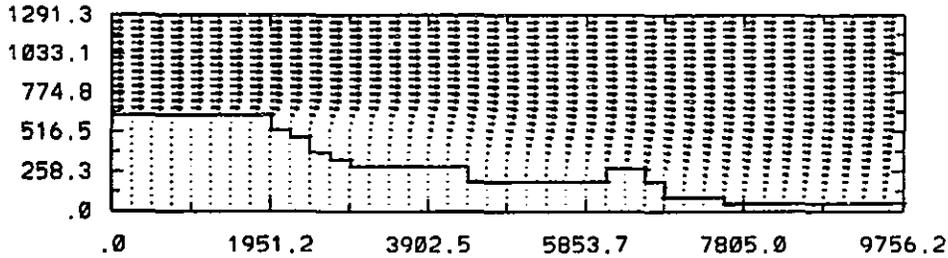


Figura 6.48: Perfil de velocidades (después de 24,000 s) en el plano x - y donde se ubica la sonda D. East (38ª hilera de vectores de izquierda a derecha), UTM Y =4,290.75 km (z =5,250 m).

la zona cercana a la sonda Thorne 7. En la figura se observa que la componente de velocidad es negativa desde $y=400$ m hasta $y=700$ m (300 m de diferencia). A una altura mayor, el viento adquiere la velocidad y dirección de la corriente libre. En los datos experimentales que se muestran en la figura D.2, se puede observar que entre las 2357 PST y las 0047 de la noche del 19-20 de septiembre, por arriba de los 50 m y hasta los 300 m de altura, el viento tiene tendencia a provenir del sureste (90° - 180°) con un velocidad por debajo de la corriente libre, (entre 0.5 y 1.0 m/s). Por arriba de los 300 m de altura, el viento proviene del oeste (270°) con una velocidad muy cercana a los 4 m/s. Lo anterior coincide cualitativamente con los resultados del modelo.

En la figura 6.47, se muestra la distribución de velocidades en el plano x - y en donde se localizan las sondas Rancho T y Oakmont, UTM Y =4,292 km (z =4,000 m). La sonda Rancho T se ubica en la posición $x=4,000$ m (18ª hilera de vectores de izquierda a derecha). Puede observarse que desde la posición $y=200$ m hasta la posición $y=700$ m (500 m de diferencia), se presenta la región de capa límite con una dirección del viento que proviene básicamente del noroeste (270° - 360°), ver figura 6.43 en donde se observa el "jet" proveniente del norte. Por arriba de la posición $y=700$ m el flujo adquiere la velocidad de la corriente libre. En la figura D.4, se observa que entre las 0101 PST y las 0134 PST del 20 de septiembre, desde la superficie hasta una altura de 400 m, se presentaron vientos con velocidad inferior a la velocidad de la corriente libre y cuya dirección varió con la altura. Se presentaron: vientos del norte (cerca de la superficie), vientos del oeste (20-200m), vientos del sureste, 90° - 180° (200-350m) y vientos del suroeste, 180° - 270° (350-400m). Se observa que por arriba de los 400 m, el viento proviene del noroeste con una velocidad que se acerca a la velocidad de la corriente libre. El modelo no puede predecir el comportamiento del viento entre la superficie y los 400 m de altura. La sonda Oakmont se localiza en la posición $x=6,250$ m (26ª hilera de vectores de izquierda a derecha). Las velocidades que el modelo predice, son cualitativamente similares a las que se obtienen en la posición donde se ubica la

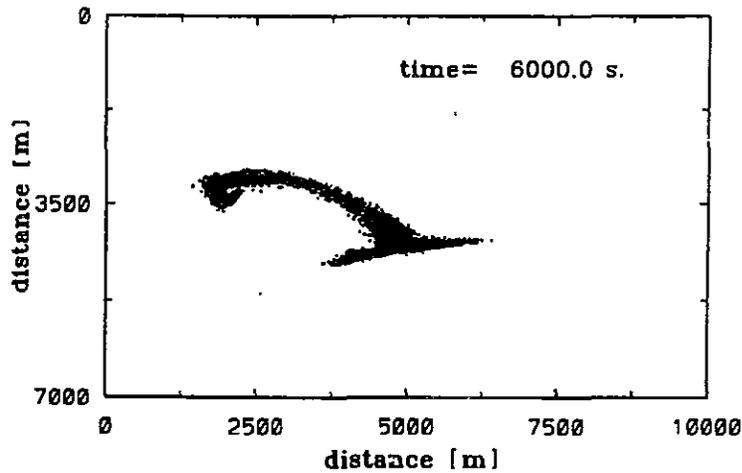


Figura 6.49: Vista superior (plano $x-z$) de la distribución total de partículas una hora después de haberse iniciado la liberación.

sonda Rancho T. Es decir, existe una perturbación del "jet" que proviene del norte, lo que ocasiona que cerca de la superficie, se tengan vientos del noroeste. Fuera de la capa límite $y=800$ m, el viento adquiere la velocidad de la corriente libre. Durante la campaña de medición en el valle Anderson, se decidió, no tomar en cuenta los datos de velocidad tomados por la sonda Oakmont, ya que tuvo problemas en el sistema de adquisición de datos. Sin embargo, los datos relacionados con la dirección del viento que aparecen en la figura D.6, sí se consideraron como correctos. En la figura D.6, se presentan los datos obtenidos por la sonda Oakmont entre las 2359 PST y las 0049 PST de la noche del 19-20 de septiembre. Los datos indican que se tuvieron vientos del noroeste (270° - 360°) desde la superficie hasta una altura de 350 m, lo cual coincide con los resultados del modelo.

En la figura 6.48 se muestra la distribución de velocidades en el plano $x-y$ en donde se ubica la sonda D. East, $UTMY=4,290.75$ km ($z=5,250$ m). La sonda D. East se localiza en la posición $x=9,250$ m (38° hilera de vectores de izquierda a derecha). Puede observarse que esta sonda se localiza prácticamente a la salida del flujo por la parte sureste del valle. El perfil de velocidades que se obtiene con el modelo, tiene una capa límite que se extiende hasta la posición $y=500$ m aproximadamente. En la posición $x=9,250$ m, se tienen vientos que provienen del oeste. En los datos experimentales que aparecen en la figura D.7, se observa que entre las 0222 PST y las 0240 PST del día 20 de septiembre, se tuvieron vientos del oeste. Se puede observar que el viento tiene una capa límite que se extiende por arriba de los 400 m. Lo anterior coincide con los resultados del modelo.

En las figuras 6.49 a 6.51, se muestra la simulación numérica de la dispersión de partículas sólidas, una, dos y tres horas, después de iniciarse la liberación. Las figuras representan la vista superior (plano $x-z$) de la distribución total de partículas. Con el propósito de observar la capacidad que tiene el modelo ATFLOW-LSD de predecir la precipitación de partículas en la superficie de la región, en las figuras 6.52 a 6.54,

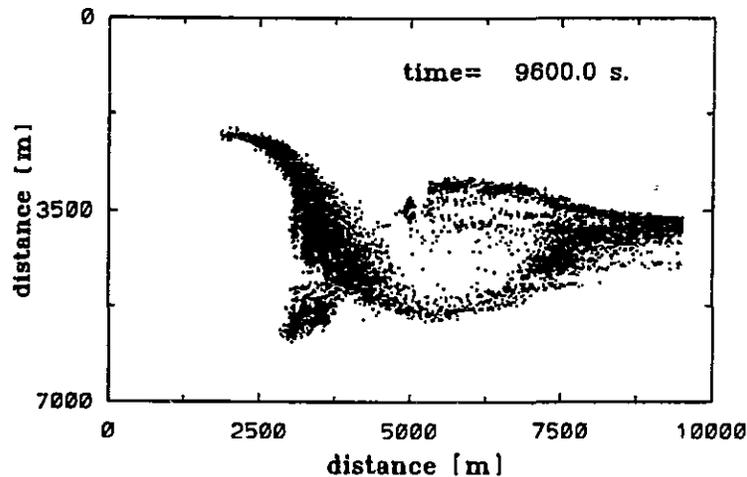


Figura 6.50: Vista superior (plano $x-z$) de la distribución total de partículas dos horas después de haberse iniciado la liberación.

se presenta una vista superior de la distribución de partículas que se han depositado sobre la superficie, después de una, dos y tres horas de haber iniciado la liberación.

En la figura 6.49 se presenta la forma que tiene la nube de partículas después de una hora de transporte y difusión. El tiempo corresponde al momento en que se dejaron de liberar las partículas (recuerde que el campo de velocidades se calculó previamente sin partículas durante los primeros 2,400 s, por lo que si se tienen 3,600 s de simulación con partículas, resultan los 6,000 s que aparecen en la figura 6.49). Después de una hora de liberación, la nube presenta una tendencia a seguir el arroyo Anderson (ver figura 6.41). En la zona cercana a la fuente de partículas, puede observarse que la nube se dirige inicialmente en la dirección negativa del eje x (lo que motiva la precipitación de las partículas en la ladera de la montaña). Esto se debe a que el punto de liberación se localiza en la zona de recirculación del viento. Cerca de la fuente, existe una velocidad del viento en la dirección vertical (positiva), lo que ocasiona que las partículas sean transportadas hacia la corriente libre del viento y queden sujetas al "jet" que proviene del norte, y al flujo que proviene del oeste. Esto resulta en un desplazamiento de la nube hacia el sureste. La velocidad vertical (positiva) que adquieren inicialmente las partículas, es suficiente para que después de una hora, no se presente precipitación de la fase dispersa, corriente abajo del punto de liberación. Esto puede observarse en la figura 6.52, en donde se presenta una vista superior de las partículas que se han depositado (en la simulación numérica) sobre la superficie de la región, después de una hora de haberse iniciado la liberación. En la figura 6.52, puede observarse que las partículas que se han depositado se localizan en la ladera de la montaña, que se ubica corriente arriba de la fuente (efecto de la recirculación del viento).

En la figura 6.50 se presenta la forma de la nube después de dos horas (0100 PST) de haberse iniciado la liberación. Es posible observar que la nube de partículas sólidas, empieza a perder altura y es transportada por los vientos que dependen de la topografía del terreno. Esto trae como consecuencia que algunas partículas se precipiten (ver

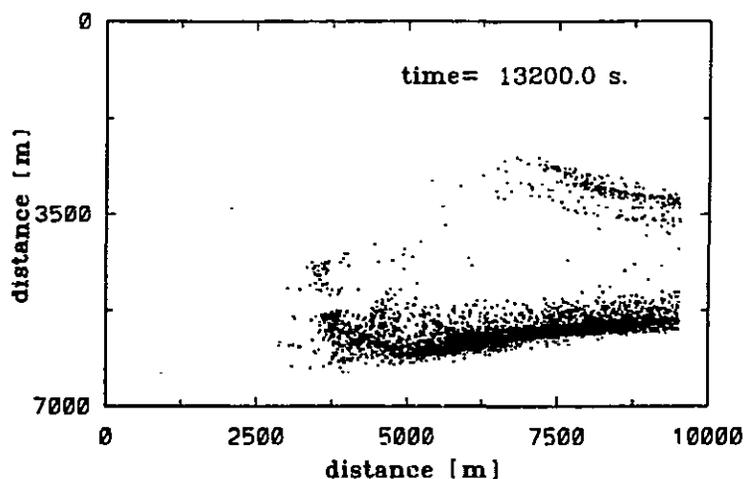


Figura 6.51: Vista superior (plano $x-z$) de la distribución total de partículas tres horas después de haberse iniciado la liberación.

figura 6.53). En la figura 6.50, se puede observar que el "jet" proveniente del norte ha penetrado hasta una distancia del orden de 5,250 m en la dirección z . Las últimas partículas que son liberadas (a las 2400 PST) se dirigen hacia el norte, debido a que el viento proveniente del oeste, rodea a la montaña con una componente de velocidad hacia el norte (ver figura 6.43). Después de dos horas de haberse iniciado la liberación, algunas partículas han abandonado el valle por el sureste. En la figura 6.53, se observa que algunas partículas ya se han precipitado en la región localizada corriente abajo de la fuente de material. Puede apreciarse en la figura 6.53 que existe precipitación de partículas al norte del lugar en donde se encuentra el punto de liberación, esto coincide con los datos experimentales que reporta Gudiksen (Gudiksen, 1983).

En la figura 6.51 se presenta la nube de partículas, tres horas después (0200 PST) de haberse iniciado la liberación. Las partículas siguen perdiendo altura, de tal manera que algunas ya se han precipitado en el valle y en las laderas de las montañas que rodean al valle Anderson Springs (ver figura 6.54). En la figura 6.51, se observa que la mayoría de las partículas son transportadas hacia el sureste y se disponen a abandonar el valle. En la figura 6.54 se observa que una buena cantidad de partículas se precipita en la región suroeste del dominio ($x=3,000$ m, $z=5,550$ m). En esta zona, debido a la topografía y al "jet" que penetra por el norte, se generan remolinos que atrapan a las partículas hasta que se depositan sobre la superficie.

Con el propósito de hacer una comparación cualitativa entre los resultados del modelo y los datos experimentales, en relación con la cantidad de material que se precipita sobre la superficie de la región, en la figura D.8, se presentan las curvas de concentración constante, que resultan después de tomar en cuenta los datos que se adquirieron con los 40 medidores de concentración superficial (con tiempos de muestreo de 2 hrs), durante la noche del 19-20 de septiembre. La figura D.8 se tomó del reporte de Gudiksen (Gudiksen, 1983) y en ella se muestran: (a) la ubicación de los 40 muestreadores de concentración superficial, (b) los valores de la concentración, en partes por trillón por

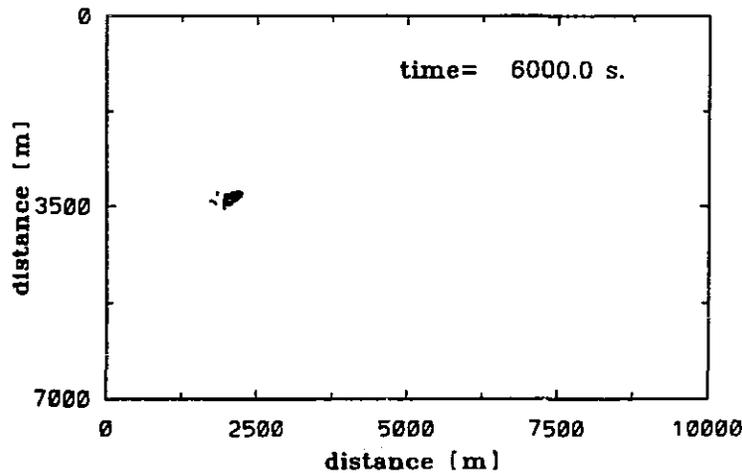


Figura 6.52: Vista superior (plano $x-z$) de la distribución total de partículas que se han depositado sobre la superficie, una hora después de haberse iniciado la liberación.

volumen (ppt), medidos por los 40 muestreadores, con un tiempo de muestreo que duró desde las 2300 PST hasta las 0100 PST (dos horas), (c) las curvas de nivel de la topografía y (d) las curvas de concentración constante, en partes por trillón por volumen.

En la figura D.8 es claro observar, que la línea central de la nube de partículas es transportada hacia el sureste y que la gran mayoría de partículas se precipita en la región cercana a la fuente de material.

Es muy alentador observar que una pequeña cantidad de material trazador es transportado hacia la región norte del punto de liberación (lo cual coincide con la simulación, ver figura 6.53 y 6.54). Puede observarse en la figura D.8, que existe un marcado "pandeo" de las curvas de concentración, hacia el norte. Esto coincide cualitativamente con lo que se presenta en la figura 6.54, en donde se observa que existe gran precipitación de partículas en la posición ($5,000 < x < 6,500$ m, $z = 3,500$ m).

Predecir el flujo con partículas en suspensión en la zona de montaña de los Geysers, es sumamente complicado, sin embargo, la simulación numérica que se presenta en este trabajo, reproduce cualitativamente algunas de las principales características del flujo. De acuerdo a la discusión que se presenta en esta sección, es posible concluir que el modelo podría reproducir (cuantitativamente) las condiciones meteorológicas y la dispersión de partículas, si se contara con información mucho más precisa para definir las condiciones de frontera y las condiciones iniciales del flujo.

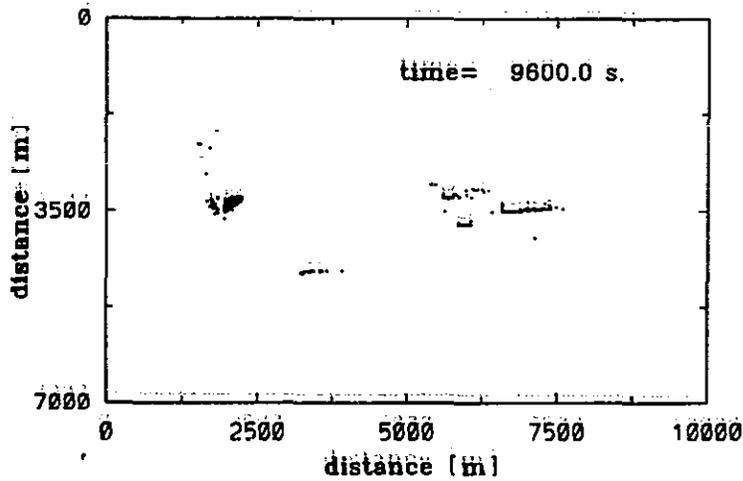


Figura 6.53: Vista superior (plano $x-z$) de la distribución total de partículas que se han depositado sobre la superficie, dos horas después de haberse iniciado la liberación.

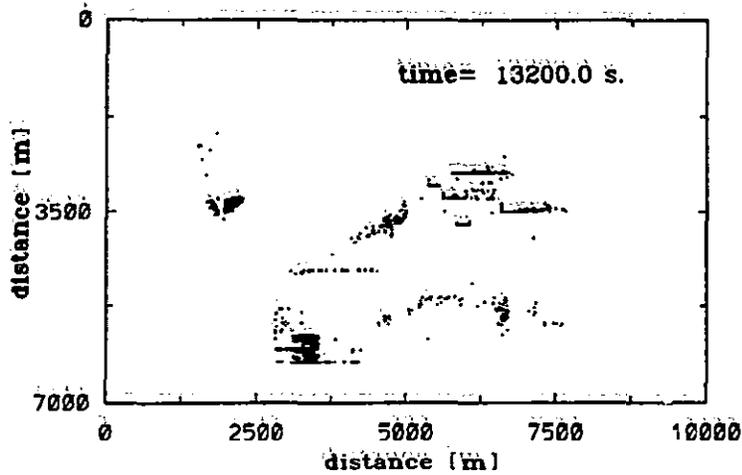


Figura 6.54: Vista superior (plano $x-z$) de la distribución total de partículas que se han depositado sobre la superficie, tres horas después de haberse iniciado la liberación.

Capítulo 7

Conclusiones

La modelación de flujos atmosféricos con partículas sólidas en suspensión, es un tema difícil de abordar. La complicada naturaleza de los fenómenos físicos que rigen la interacción entre las fases (aire-sólido), hacen muy difícil (sino es que imposible) la tarea de comprender, modelar y controlar estos flujos.

Los fenómenos físicos que se presentan en un flujo atmosférico con partículas sólidas, están lejos de ser comprendidos en su totalidad, debido a que, entre otras circunstancias, la obtención de datos experimentales, en los cuales debe sustentarse la investigación teórica, son también muy complicados de obtener, ya que se requiere de una inversión económica de gran magnitud. Aunque la atmósfera puede considerarse como un laboratorio natural, llevar a cabo experimentos para caracterizar una región en donde se liberan partículas, requiere de la participación conjunta de diversos grupos de investigación, involucrados con el estudio de la física de la atmósfera.

En este trabajo, se han presentado los fundamentos teóricos y computacionales, en los cuales se basan algunos de los modelos meteorológicos que se encuentran actualmente en uso. El modelo que se ha propuesto, tiene características que lo hacen único en relación a otros modelos computacionales. Mientras que la mayoría de los modelos, recurren a formulaciones que consideran a las partículas como elementos de fluido, las cuales no alteran el campo del flujo, el modelo ATFLOW-LSD; permite determinar la dispersión de partículas sólidas cuya concentración puede alterar de manera significativa el campo de velocidades e intensidad de turbulencia del flujo atmosférico.

En el presente estudio se ha mostrado, a través de comparar los resultados de la simulación numérica con soluciones analíticas y datos experimentales, que el modelo ofrece resultados alentadores.

Los dos primeros casos de análisis: Flujo de Poiseuille en un ducto con sección transversal cuadrada (sección 6.1) y el flujo turbulento sobre un placa plana con superficie lisa (sección 6.2), únicamente se presentaron con el propósito de mostrar; la capacidad que tiene la parte Euleriana del modelo, para calcular flujos que pueden ser considerados como "simples" (comparados con un flujo atmosférico con topografía compleja).

El tercer caso de análisis: Simulación de la capa límite atmosférica utilizando un modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds (sección 6.3), constituye una aportación al entendimiento de la interacción que existe entre los campos de velocidad y temperatura,

con las características turbulentas de un flujo que está sujeto a las fuerzas de gravedad y de Coriolis, y que tiene una condición neutra o estable. En el análisis de este caso, se mostró que las constantes de los modelos de turbulencia, no deben ser tomadas como constantes universales, ya que su valor depende fuertemente de las características del flujo. Se mostró también, que el modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds que se incluye en la parte Euleriana del modelo, es capaz de predecir la anisotropía de la turbulencia en la región cercana a la superficie terrestre. El incremento de la energía turbulenta en las direcciones longitudinal y transversal, y la disminución de la turbulencia en la dirección vertical (normal a la superficie), se obtuvieron de manera satisfactoria. Los resultados del modelo, se compararon de manera extensa con datos experimentales y con simulaciones numéricas que aparecen en la literatura.

La simulación numérica de la dispersión de partículas que se liberan (de manera continua o instantánea), en un flujo con turbulencia homogénea, isotrópica y estacionaria, se presentó en la sección 6.4. La comparación de los resultados del modelo con dos soluciones (analítica y numérica) de la ecuación de conservación de especies, permitió verificar que el modelo Lagrangiano (al seguir la trayectoria de algunos miles de partículas), reproduce los resultados de la ecuación Euleriana de advección-difusión. El modelo Lagrangiano propuesto, fue utilizado para reproducir la teoría de la dispersión de partículas debido al movimiento turbulento, formulada inicialmente por Taylor. Los resultados que se obtuvieron con el modelo, reproducen las características de la dispersión turbulenta que se presenta en tiempos cortos y largos.

Es necesario aclarar, que en este trabajo no se presenta de manera explícita el análisis de independencia de malla, de la solución numérica de los cuatro casos discutidos en las secciones 6.1-6.4. Sin embargo, conviene mencionar que buena parte del tiempo de cómputo que se consumió durante el desarrollo de esta tesis, haciendo uso de las diferentes computadoras de procesamiento rápido, a las cuales tiene acceso el autor (Origin-Silicon Graphics 8 procesadores R-10,000 DGSCA-UNAM, Origin-Silicon Graphics 4 procesadores R-10,000 ININ, Cray-YMP DGSCA-UNAM, Onix-Silicon Graphics 6 procesadores R-10,000 DGSCA-UNAM, 4 Estación de trabajo IMPACT-Silicon Graphics 1 procesador R 10,000 ININ), estuvo dedicado a realizar cálculos con diferentes tipos de discretización del dominio. En la solución del flujo de Poiseuille, aunque los resultados que se muestran en la sección 6.1, corresponden a una malla de $50 \times 39 \times 39$ celdas, se realizaron cálculos con mallas numéricas desde $9 \times 9 \times 9$ hasta $40 \times 69 \times 69$ volúmenes de control. Conforme la malla numérica, se hacía más fina, el error de la solución numérica, fue cada vez menor. Este tipo de análisis no se incluyó en esta tesis, debido a que hubiera resultado más extenso el trabajo escrito.

El análisis correspondiente al flujo turbulento sobre una placa plana, consumió recursos de cómputo de manera extensa, ya que el problema se resolvió utilizando diversas mallas numéricas; desde mallas uniformes de $10 \times 10 \times 10$ celdas, hasta mallas no uniformes (con variación logarítmica en la dirección vertical) del orden de $50 \times 100 \times 50$ volúmenes de control. La decisión de presentar en la sección 6.2, los resultados de una malla de $20 \times 40 \times 20$, se debe no sólo a que la solución no varió apreciablemente con mallas más finas, sino a limitaciones en el tiempo de cómputo requerido.

La solución del tercer caso de análisis (sección 6.3), también consumió una gran cantidad de tiempo de cómputo, previo a tomar la decisión de utilizar la malla numérica de

60 celdas en la dirección vertical. Se realizaron múltiples pruebas con mallas numéricas que variaron entre 10-100 celdas en la dirección vertical. Se realizaron una gran cantidad de experimentos numéricos, tomando en cuenta tanto mallas uniformes como logarítmicas.

En la solución del cuarto caso (sección 6.4), no fue necesario analizar el comportamiento del flujo al modificar la malla numérica. Lo anterior se debió a que en este caso, no se resolvieron las ecuaciones de la fase continua. Es decir; los campos de velocidades y características turbulentas del flujo, que transporta y dispersa a las partículas, se consideraron como conocidos.

En el quinto y último caso, no se intentó realizar estudios con diferentes mallas. Esto se debió, a que la topografía del terreno se conforma de acuerdo a la malla que se utiliza (recuerde que la topografía de la región se modela de acuerdo a la técnica del "bloqueo de celdas"). Modificar la malla numérica para modelar la región de los Geysers implicaría un trabajo intenso, de varias semanas, para definir los diferentes archivos que contienen información relacionada con:

1).-Identificación de las celdas que tienen que "bloquearse" para definir la topografía. Para cada ecuación de transporte y conservación que se resuelve, se tiene que generar un archivo.

2).-Identificación de las caras de las celdas bloqueadas para impedir que fluya aire hacia el interior. Para cada ecuación de transporte y conservación que se resuelve, se tiene que generar un archivo.

3).-Definir las condiciones de frontera de velocidad, temperatura, energía cinética turbulenta y disipación de energía turbulenta, en cada una de las caras de las celdas que conforman la topografía de la región. La definición de estas condiciones de frontera no es nada trivial.

Lo expuesto en los párrafos anteriores fue lo que motivó que no se intentara realizar un análisis de independencia de malla, de la simulación numérica del experimento en el valle Anderson Springs.

7.1 Trabajo de investigación a futuro

En el transcurso de esta tesis, el autor ha mencionado algunas actividades de investigación que es posible llevar a cabo en un futuro cercano, tomando como base los fundamentos teóricos que se presentan y el modelo matemático-computacional desarrollado.

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

.-El modelo (LSD) de dispersión de partículas que se ha presentado, genera las fluctuaciones de velocidad de los remolinos turbulentos, como números aleatorios independientes, se propone que se incorpore un modelo de cadenas de Markov para que las fluctuaciones de velocidad se generen, al menos con un paso de "memoria".

.-En el modelo LSD, el coeficiente de correlación Lagrangiana del remolino que se encuentra en contacto con la partícula, tiene forma cuadrada, se propone que se incorporen en el modelo, diferentes formas del coeficiente de correlación Lagrangiana, como son las formas: "triangular", "Gaussiana" y "exponencial", y estudiar la influencia de

éstos coeficientes sobre las características turbulentas de la fase dispersa.

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

.-El modelo LSD, considera que los remolinos turbulentos tienen la misma escala de longitud y tiempo en las direcciones x , y y z . Debido que en la atmósfera la turbulencia es anisótropa, se propone que en el modelo se incluyan escalas de tiempo y longitud (de los remolinos turbulentos que interaccionan con las partículas), que sean diferentes en las tres direcciones.

.-Se sugiere llevar a cabo actividades enfocadas a desarrollar un programa de cómputo que resuelva las ecuaciones de conservación del aire de la atmósfera en coordenadas generalizadas. Con un modelo computacional de este tipo, se pueden deformar las mallas numéricas de tal manera que se ajusten a la topografía de la región.

.-Se sugiere paralelizar el código que se presenta en este trabajo. Si el código se ejecuta de manera eficiente en computadoras con procesadores múltiples en paralelo, será posible reducir el tiempo de ejecución y llevar a cabo simulaciones en tiempo real.

.-Es necesario iniciar un ambicioso programa de investigación experimental, en donde a partir de experimentos a escala reducida, de regiones con topografía complicada, sea posible verificar tanto el modelo ATFLOW-LSD, como una gran variedad y cantidad de códigos que se han desarrollado (alrededor del mundo) en los últimos años, y los cuales requieren de información experimental confiable.

.-Con la experiencia adquirida en los últimos diez años en la simulación de flujos con partículas, el autor sugiere abrir una línea de investigación para desarrollar los algoritmos numéricos necesarios que permitan predecir el comportamiento de un flujo turbulento (a escala laboratorio o a escala atmosférica), sin resolver las ecuaciones de conservación formuladas en un marco de referencia Euleriano. El comportamiento del medio continuo (fluido) se calculará a través de resolver la trayectoria de varios miles de partículas que tienen que interaccionar unas con otras de tal manera que en conjunto representen el fluido en movimiento turbulento. Estos métodos de partículas, han sido utilizados en el campo de la astrofísica desde hace algunos años.

.-Finalmente, se considera conveniente que el modelo ATFLOW-LSD, sea tomado en cuenta para formar parte del núcleo computacional de los sistemas de alerta y aviso oportuno que existen alrededor del mundo. Estos sistemas predicen la dispersión de nubes tóxicas en caso de liberación accidental a la atmósfera.

Apéndice A

A.1 Elementos de la matriz $A(i, j)$ para el cálculo de los esfuerzos de Reynolds $\overline{u'_i u'_j}$ y flujos de calor $\overline{u'_i \theta'}$.

a).- $i=1$ y $j=1$

$$\frac{\overline{u'_1 u'_1}}{\kappa} = \frac{2}{3} + \frac{\Phi}{\epsilon} \left(P_{11}^* - \frac{2}{3} P^* \right) + \Phi_{m-1} \left(\Pi'_{11,1} + \Pi'_{11,2} \right) \quad (\text{A.1})$$

Desarrollando cada término se tiene:

$$\begin{aligned} & \overline{u'_1 u'_1} \left(\frac{1}{\kappa} + \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_1} \left\{ \frac{4}{3} \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{2}{3} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \quad (\text{A.2}) \\ & + \overline{u'_1 u'_2} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_2} \left\{ \frac{4}{3} \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{2}{3} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} - \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_1} \left\{ \frac{2}{3} \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{4}{3} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\ & + \overline{u'_1 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_3} \left\{ \frac{4}{3} \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{2}{3} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} - \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_1} \left\{ \frac{2}{3} \frac{\Phi}{\epsilon} - \frac{2}{3} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\ & + \overline{u'_2 u'_2} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_2} \left\{ -\frac{2}{3} \frac{\Phi}{\epsilon} - \frac{4}{3} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} - \Phi_{m-1} C'_1 \rho \frac{\epsilon}{\kappa} f \right) + \\ & + \overline{u'_2 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_3} \left\{ -\frac{2}{3} \frac{\Phi}{\epsilon} - \frac{4}{3} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} - \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_2} \left\{ \frac{2}{3} \frac{\Phi}{\epsilon} - \frac{2}{3} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\ & + \overline{u'_3 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_3} \left\{ -\frac{2}{3} \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{2}{3} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\ & + \overline{u'_1 \theta'} \{0\} + \overline{u'_2 \theta'} \left(-\frac{2}{3} \frac{\Phi}{\epsilon} \rho \beta g_2 \right) + \overline{u'_3 \theta'} \{0\} = \frac{2}{3} \end{aligned}$$

b).- $i=2$ y $j=2$

$$\frac{\overline{u'_2 u'_2}}{\kappa} = \frac{2}{3} + \frac{\Phi}{\epsilon} \left(P_{22}^* - \frac{2}{3} P^* \right) + \Phi_{m-1} \left(\Pi'_{22,1} + \Pi'_{22,2} \right) \quad (\text{A.3})$$

Desarrollando cada término se tiene:

$$\begin{aligned}
& \overline{u'_1 u'_1} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_1} \left\{ -\frac{2\Phi}{3\epsilon} - \frac{4}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \quad (A.4) \\
& + \overline{u'_1 u'_2} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_2} \left\{ -\frac{2\Phi}{3\epsilon} - \frac{4}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} + \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_1} \left\{ \frac{4\Phi}{3\epsilon} + \frac{8}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\
& + \overline{u'_1 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_3} \left\{ -\frac{2\Phi}{3\epsilon} - \frac{4}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} - \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_1} \left\{ \frac{2\Phi}{3\epsilon} + \frac{4}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\
& \quad + \overline{u'_2 u'_2} \left(\frac{1}{\kappa} + \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_2} \left\{ \frac{4\Phi}{3\epsilon} + \frac{8}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} + 2\Phi_{m-1} C'_1 \rho \frac{\epsilon}{\kappa} f \right) + \\
& + \overline{u'_2 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_3} \left\{ \frac{4\Phi}{3\epsilon} + \frac{8}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} - \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_2} \left\{ \frac{2\Phi}{3\epsilon} + \frac{4}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\
& \quad + \overline{u'_3 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_3} \left\{ -\frac{2\Phi}{3\epsilon} - \frac{4}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\
& + \overline{u'_1 \theta'} \{0\} + \overline{u'_2 \theta'} \left(\frac{4\Phi}{3\epsilon} \rho \beta g_2 \right) + \overline{u'_3 \theta'} \{0\} = \frac{2}{3}
\end{aligned}$$

c).- $i=3$ y $j=3$

$$\frac{\overline{u'_3 u'_3}}{\kappa} = \frac{2}{3} + \frac{\Phi}{\epsilon} \left(P_{33}^* - \frac{2}{3} P^* \right) + \Phi_{m-1} \left(\Pi'_{33,1} + \Pi'_{33,2} \right) \quad (A.5)$$

Desarrollando cada término se tiene:

$$\begin{aligned}
& \overline{u'_1 u'_1} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_1} \left\{ -\frac{2\Phi}{3\epsilon} + \frac{2}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \quad (A.6) \\
& + \overline{u'_1 u'_2} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_2} \left\{ -\frac{2\Phi}{3\epsilon} + \frac{2}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} + \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_1} \left\{ -\frac{2\Phi}{3\epsilon} - \frac{4}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\
& + \overline{u'_1 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_3} \left\{ -\frac{2\Phi}{3\epsilon} + \frac{2}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} + \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_1} \left\{ \frac{4\Phi}{3\epsilon} + \frac{2}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\
& \quad + \overline{u'_2 u'_2} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_2} \left\{ -\frac{2\Phi}{3\epsilon} - \frac{4}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} - \Phi_{m-1} C'_1 \rho \frac{\epsilon}{\kappa} f \right) + \\
& + \overline{u'_2 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_3} \left\{ -\frac{2\Phi}{3\epsilon} - \frac{4}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} + \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_2} \left\{ \frac{4\Phi}{3\epsilon} + \frac{2}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\
& \quad + \overline{u'_3 u'_3} \left(\frac{1}{\kappa} + \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_3} \left\{ \frac{4\Phi}{3\epsilon} + \frac{2}{3}\Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\
& + \overline{u'_1 \theta'} \{0\} + \overline{u'_2 \theta'} \left(-\frac{2\Phi}{3\epsilon} \rho \beta g_2 \right) + \overline{u'_3 \theta'} \{0\} = \frac{2}{3}
\end{aligned}$$

d).- $i=1$ y $j=2$

$$\frac{\overline{u'_1 u'_2}}{\kappa} = \frac{\Phi}{\epsilon} P_{12}^* + \Phi_{m-1} \left(\Pi'_{12,1} + \Pi'_{12,2} \right) \quad (A.7)$$

Desarrollando cada término se tiene:

$$\begin{aligned}
& \overline{u'_1 u'_1} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_1} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) \quad (A.8) \\
& + \overline{u'_1 u'_2} \left(\frac{1}{\kappa} + \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_1} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} + \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_2} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C'_1 \rho \frac{\epsilon}{\kappa} f \right) + \\
& \quad + \overline{u'_1 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_3} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\
& \quad + \overline{u'_2 u'_2} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_2} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\
& \quad + \overline{u'_2 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_3} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) + \\
& \quad + \overline{u'_3 u'_3} \{0\} + \overline{u'_1 \theta'} \left(\frac{\Phi}{\epsilon} \rho \beta g_2 \right) + \overline{u'_2 \theta'} \{0\} + \overline{u'_3 \theta'} \{0\} = 0
\end{aligned}$$

e).- i=1 y j=3

$$\frac{\overline{u'_1 u'_3}}{\kappa} = \frac{\Phi}{\epsilon} P_{13}^* + \Phi_{m-1} (\Pi'_{13,1} + \Pi'_{13,2}) \quad (A.9)$$

Desarrollando cada término se tiene:

$$\begin{aligned}
& \overline{u'_1 u'_1} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_1} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} \right\} \right) + \quad (A.10) \\
& \quad + \overline{u'_1 u'_2} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_2} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} \right\} \right) + \\
& \quad + \overline{u'_1 u'_3} \left(\frac{1}{\kappa} + \frac{\Phi}{\epsilon} \left\{ \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_3} + \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_1} \right\} \right) + \\
& \quad + \overline{u'_2 u'_2} \{0\} + \overline{u'_2 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_2} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} \right\} \right) + \overline{u'_3 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_3} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} \right\} \right) + \\
& \quad + \overline{u'_1 \theta'} \{0\} + \overline{u'_2 \theta'} \{0\} + \overline{u'_3 \theta'} \{0\} = 0
\end{aligned}$$

f).- i=2 y j=3

$$\frac{\overline{u'_2 u'_3}}{\kappa} = \frac{\Phi}{\epsilon} P_{23}^* + \Phi_{m-1} (\Pi'_{23,1} + \Pi'_{23,2}) \quad (A.11)$$

Desarrollando cada término se tiene:

$$\begin{aligned}
& \overline{u'_1 u'_1} \{0\} + \overline{u'_1 u'_2} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_1} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) \quad (A.12) \\
& \quad + \overline{u'_1 u'_3} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_1} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C'_2 f \right\} \right) +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \overline{u_2 u_2'} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_2} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C_2' f \right\} \right) + \\
& + \overline{u_2 u_3'} \left(\frac{1}{\kappa} + \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_2} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C_2' f \right\} + \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_3} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C_2' f \right\} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_1' \rho \frac{\epsilon}{\kappa} f \right) + \\
& + \overline{u_3 u_3'} \left(\frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_3} \left\{ \frac{\Phi}{\epsilon} + \frac{3}{2} \Phi_{m-1} C_2 C_2' f \right\} \right) + \\
& + \overline{u_1' \theta'} \{0\} + \overline{u_2' \theta'} \{0\} + \overline{u_3' \theta'} \left(\frac{\Phi}{\epsilon} \rho \beta g_2 \right) = 0
\end{aligned}$$

Las expresiones algebraicas para los flujos de calor son las siguientes:

g).- i=1

$$-\overline{u_1' \theta'} = \Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \left[\overline{u_1' u_1'} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_1} + \overline{u_1' u_2'} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_2} + \overline{u_1' u_3'} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_3} \right] - \Phi_\theta' \frac{\kappa}{\epsilon} P_{1\theta}^* - \Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \Pi'_{1\theta,1} \quad (\text{A.13})$$

Desarrollando cada término se tiene:

$$\begin{aligned}
& \overline{u_1' u_1'} \left(-\Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_1} \right) + \overline{u_1' u_2'} \left(-\Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_2} \right) + \overline{u_1' u_3'} \left(-\Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_3} \right) + \\
& + \overline{u_2' u_2'} \{0\} + \overline{u_2' u_3'} \{0\} + \overline{u_3' u_3'} \{0\} + \overline{u_1' \theta'} \left(-1 - \Phi_\theta' \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_1} \right) + \\
& + \overline{u_2' \theta'} \left(-\Phi_\theta' \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_2} \right) + \overline{u_3' \theta'} \left(-\Phi_\theta' \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_3} \right) = 0
\end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

h).- i=2

$$-\overline{u_2' \theta'} = \Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \left[\overline{u_2' u_1'} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_1} + \overline{u_2' u_2'} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_2} + \overline{u_2' u_3'} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_3} \right] - \Phi_\theta' \frac{\kappa}{\epsilon} P_{2\theta}^* - \Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \Pi'_{2\theta,1} \quad (\text{A.15})$$

Desarrollando cada término se tiene:

$$\begin{aligned}
& \overline{u_1' u_1'} \{0\} + \overline{u_1' u_2'} \left(-\Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_1} \right) + \overline{u_1' u_3'} \{0\} + \\
& + \overline{u_2' u_2'} \left(-\Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_2} \right) + \overline{u_2' u_3'} \left(-\Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_3} \right) + \overline{u_3' u_3'} \{0\} + \\
& + \overline{u_1' \theta'} \left(-\Phi_\theta' \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_1} + \Phi_\theta' \left(\frac{\kappa}{\epsilon} \right)^2 \beta g_2 C_\theta' \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_1} \right) + \\
& + \overline{u_2' \theta'} \left(-1 - \Phi_\theta' \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_2} + \Phi_\theta' \left(\frac{\kappa}{\epsilon} \right)^2 \beta g_2 C_\theta' \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_2} - \Phi_\theta \rho C_{1\theta}' f \right) + \\
& + \overline{u_3' \theta'} \left(-\Phi_\theta' \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_3} + \Phi_\theta' \left(\frac{\kappa}{\epsilon} \right)^2 \beta g_2 C_\theta' \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_3} \right) = 0
\end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

i).- i=3

$$-\overline{u'_3\theta'} = \Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \left[\overline{u'_3 u'_1} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_1} + \overline{u'_3 u'_2} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_2} + \overline{u'_3 u'_3} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_3} \right] - \Phi'_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} P_{3\theta}^* - \Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \Pi'_{3\theta,1} \quad (\text{A.17})$$

Desarrollando cada término se tiene:

$$\begin{aligned} & \overline{u'_1 u'_1} \{0\} + \overline{u'_1 u'_2} \{0\} + \overline{u'_1 u'_3} \left(-\Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_1} \right) + \\ & + \overline{u'_2 u'_2} \{0\} + \overline{u'_2 u'_3} \left(-\Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_2} \right) + \overline{u'_3 u'_3} \left(-\Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_3} \right) + \\ & + \overline{u'_1 \theta'} \left(-\Phi'_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_1} \right) + \overline{u'_2 \theta'} \left(-\Phi'_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_2} \right) + \overline{u'_3 \theta'} \left(-1 - \Phi'_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_3} \right) = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Apéndice B

B.1 Desarrollo de los términos que constituyen la ecuación algebraica de los esfuerzos de Reynolds, $\frac{\overline{u'_i u'_i}}{\kappa}$ y la ecuación algebraica de los flujos de calor, $-\overline{u'_i \theta'}$.

a).- $i=2, j=2$.

$$\frac{\overline{u'_2 u'_2}}{\kappa} = \frac{2}{3} + \frac{\Phi}{\epsilon} \left(P_{22}^* - \frac{2}{3} P^* \right) + \Phi_{m-1} \left(\Pi'_{22,1} + \Pi'_{22,2} \right) \quad (\text{B.1})$$

$$P_{22}^* = P_{22} + G_{22} \quad (\text{B.2})$$

$$P_{22}^* = -2\overline{u'_2 u'_1} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_1} - 2\overline{u'_2 u'_2} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_2} - 2\overline{u'_2 u'_3} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_3} - 2\rho \beta g_2 \overline{u'_2 \theta'} \quad (\text{B.3})$$

$$P^* = P + G \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} P^* = & -\overline{u'_1 u'_1} \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_1} - \overline{u'_1 u'_2} \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_2} - \overline{u'_1 u'_3} \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_3} - \\ & -\overline{u'_2 u'_1} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_1} - \overline{u'_2 u'_2} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_2} - \overline{u'_2 u'_3} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_3} - \\ & -\overline{u'_3 u'_1} \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_1} - \overline{u'_3 u'_2} \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_2} - \overline{u'_3 u'_3} \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_3} - \rho \beta g_2 \overline{u'_2 \theta'} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\Pi'_{22,1} = C'_1 \rho \frac{\epsilon}{\kappa} \left(\overline{u'_2 u'_2} - \frac{3}{2} \overline{u'_2 u'_2} - \frac{3}{2} \overline{u'_2 u'_2} \right) f \quad (\text{B.6})$$

$$\Pi'_{22,1} = -2\overline{u'_2 u'_2} C'_1 \rho \frac{\epsilon}{\kappa} f \quad (\text{B.7})$$

$$\Pi'_{22,2} = C'_2 \left(\Pi_{22,2} - \frac{3}{2} \Pi_{22,2} - \frac{3}{2} \Pi_{22,2} \right) f \quad (\text{B.8})$$

$$\Pi'_{22,2} = -2C'_2 \Pi_{22,2} f \quad (\text{B.9})$$

donde

$$\Pi_{22,2} = -C_2 \left(P_{22} - \frac{2}{3} P \right) \quad (\text{B.10})$$

sustituyendo se tiene:

$$\Pi'_{22,2} = 2C_2 C'_2 f \left(P_{22} - \frac{2}{3} P \right) \quad (\text{B.11})$$

desarrollando los términos P_{22} y P , se tiene:

$$\begin{aligned} \Pi'_{22,2} = 2C_2 C'_2 f & \left\{ -2\overline{u'_2 u'_1} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_1} - 2\overline{u'_2 u'_2} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_2} - 2\overline{u'_2 u'_3} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_3} \right\} + \\ & + \frac{4}{3} C_2 C'_2 f \left\{ \overline{u'_1 u'_1} \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_1} + \overline{u'_1 u'_2} \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_2} + \overline{u'_1 u'_3} \frac{\partial \rho \bar{u}_1}{\partial x_3} \right\} + \\ & + \frac{4}{3} C_2 C'_2 f \left\{ \overline{u'_2 u'_1} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_1} + \overline{u'_2 u'_2} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_2} + \overline{u'_2 u'_3} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_3} \right\} + \\ & + \frac{4}{3} C_2 C'_2 f \left\{ \overline{u'_3 u'_1} \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_1} + \overline{u'_3 u'_2} \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_2} + \overline{u'_3 u'_3} \frac{\partial \rho \bar{u}_3}{\partial x_3} \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Desarrollo en detalle de los términos que constituyen la ecuación algebraica de los flujos de calor, $-\overline{u'_i \theta'}$.

b).- $i = 2$.

$$-\overline{u'_2 \theta'} = \Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \left[\overline{u'_2 u'_1} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_1} + \overline{u'_2 u'_2} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_2} + \overline{u'_2 u'_3} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_3} \right] - \Phi'_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} P_{2\theta}^* - \Phi_\theta \frac{\kappa}{\epsilon} \Pi'_{2\theta,1} \quad (\text{B.13})$$

$$P_{2\theta}^* = P_{2\theta} + G_{2\theta} \quad (\text{B.14})$$

$$P_{2\theta}^* = - \left\{ \overline{u'_1 \theta'} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_1} + \overline{u'_2 \theta'} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_2} + \overline{u'_3 \theta'} \frac{\partial \rho \bar{u}_2}{\partial x_3} + \rho \beta g_2 \bar{\theta}^{\prime 2} \right\} \quad (\text{B.15})$$

donde

$$\bar{\theta}^{\prime 2} = - \frac{C'_\theta \kappa}{\rho \epsilon} \left(\overline{u'_1 \theta'} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_1} + \overline{u'_2 \theta'} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_2} + \overline{u'_3 \theta'} \frac{\partial \rho \bar{\theta}}{\partial x_3} \right) \quad (\text{B.16})$$

$$\Pi'_{2\theta,1} = -C'_{1\theta} \frac{\rho \epsilon}{\kappa} \overline{u'_2 \theta'} f \quad (\text{B.17})$$

Apéndice C

C.1 Parametrización de las funciones ϕ_m , ϕ_h , Ψ_m y Ψ_h

En las condiciones de frontera para las ecuaciones de cantidad de movimiento ecs. (3.50 y 3.51), energía térmica ec. (3.52), energía turbulenta ec. (3.72) y disipación de energía ec. (3.67), es necesario definir las funciones ϕ_m , ϕ_h , Ψ_m y Ψ_h

Como se mencionó en la página 48, las funciones $\phi_{m,h}$ consideradas en las condiciones de frontera, son diferentes a las utilizadas para definir la función f que aparece en las ecuaciones (3.23, 3.24 y 3.26). Además se considera que $\phi_m \neq \phi_h$. Las funciones universales $\phi_{m,h}$ y $\Psi_{m,h}$ utilizadas en este trabajo son las siguientes (Boughton and DeLaurentis, 1992):

Condición Neutra, ($\xi \rightarrow 0$)

$$\Psi_{m,h}(0) = 0 \quad (\text{C.1})$$

$$\phi_{m,h}(0) = 1 \quad (\text{C.2})$$

Condición Inestable, ($\xi < 0$)

$$\Psi_m = 2 \ln \left(\frac{1 + \phi_m^{-1}}{2} \right) + \ln \left(\frac{1 + \phi_m^{-2}}{2} \right) - 2 \arctan \left(\phi_m^{-1} \right) + \frac{\pi}{2} \quad (\text{C.3})$$

$$\Psi_h = 2 \ln \left(\frac{1 + \phi_h^{-1}}{2} \right) \quad (\text{C.4})$$

donde

$$\phi_m = (1 - 19\xi_p)^{-1/4} \quad (\text{C.5})$$

$$\phi_h = (1 - 14\xi_p)^{-1/2} \quad (\text{C.6})$$

En las ecs. (C.5 y C.6) se ha definido $\xi_p = y_p/L$, para indicar que la parametrización de las funciones $\phi_{m,h}$ y $\Psi_{m,h}$, se utiliza únicamente en la frontera representada por el punto y_p , el cual se localiza en la capa superficial.

Condición Estable, ($\xi > 0$)

$$\Psi_m = 0.667 (14.3 - \xi_p) \exp(-0.35\xi_p) - \xi_p - 9.52 \quad (\text{C.7})$$

$$\Psi_h = 0.667 (14.3 - \xi_p) \exp(-0.35\xi_p) - (1 + 0.667\xi_p)^{3/2} - 8.52 \quad (\text{C.8})$$

donde

$$\phi_m = 1 + \xi_p \{1 + 0.667 \exp(-0.35\xi_p) [1 + 0.35 (14.3 - \xi_p)]\} \quad (\text{C.9})$$

$$\phi_h = 1 + \xi_p \{(1 + 0.667\xi_p)^{1/2} + 0.667 \exp(-0.35\xi_p) [1 + 0.35 (14.3 - \xi_p)]\} \quad (\text{C.10})$$

Apéndice D

D.1 Muestra de los datos experimentales tomados la noche del 19-20 de septiembre, en el valle Anderson Springs

Se presenta una muestra de los datos meteorológicos que se obtuvieron con las siete sondas que aparecen en la figura 6.41, y cuya ubicación se enlista en la tabla 6.1 de la página 145.

En las figuras D.1-D.7, se presentan los siguientes datos meteorológicos:

DD (DEG) dirección del viento (donde proviene)

S (M/S) velocidad del viento

M.R. (GM/KG) (gramos de vapor de agua/kg de aire seco)

R.H. (%) humedad relativa

POT. TEMP (K) temperatura potencial

TEMP (°C) temperatura.

En la figura D.8, se presenta la concentración del gas PMCH en la superficie de la región. Los datos de concentración se midieron con muestreadores de superficie con tiempo promedio de medición de dos horas.

En las figuras de este apéndice se incluyen leyendas que indican: el nombre de la sonda, la fecha y la hora en que se tomaron los datos (PST). En las figuras se especifica si los datos se tomaron durante el ascenso (Δ) o descenso (∇) de la sonda.

Las figuras D.1-D.8, se tomaron del reporte de Gudiksen (Gudiksen, 1983).

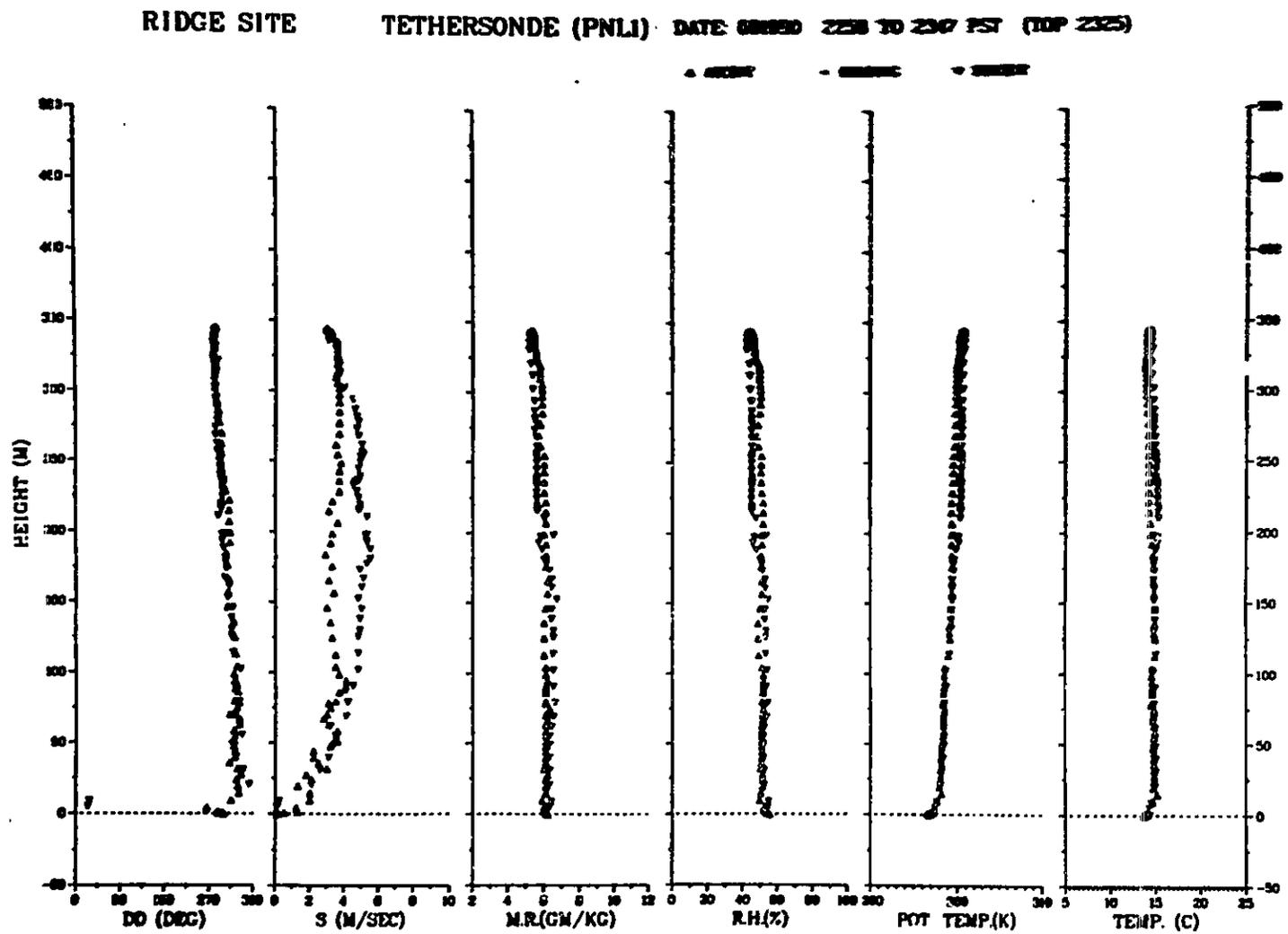


Figura D.1: Datos meteorológicos en la sonda Ridge.

UNIT 19 TETHERSONDE (PNL2)

DATE: 091980 2357 TO 0047 PST (TOP 0025)

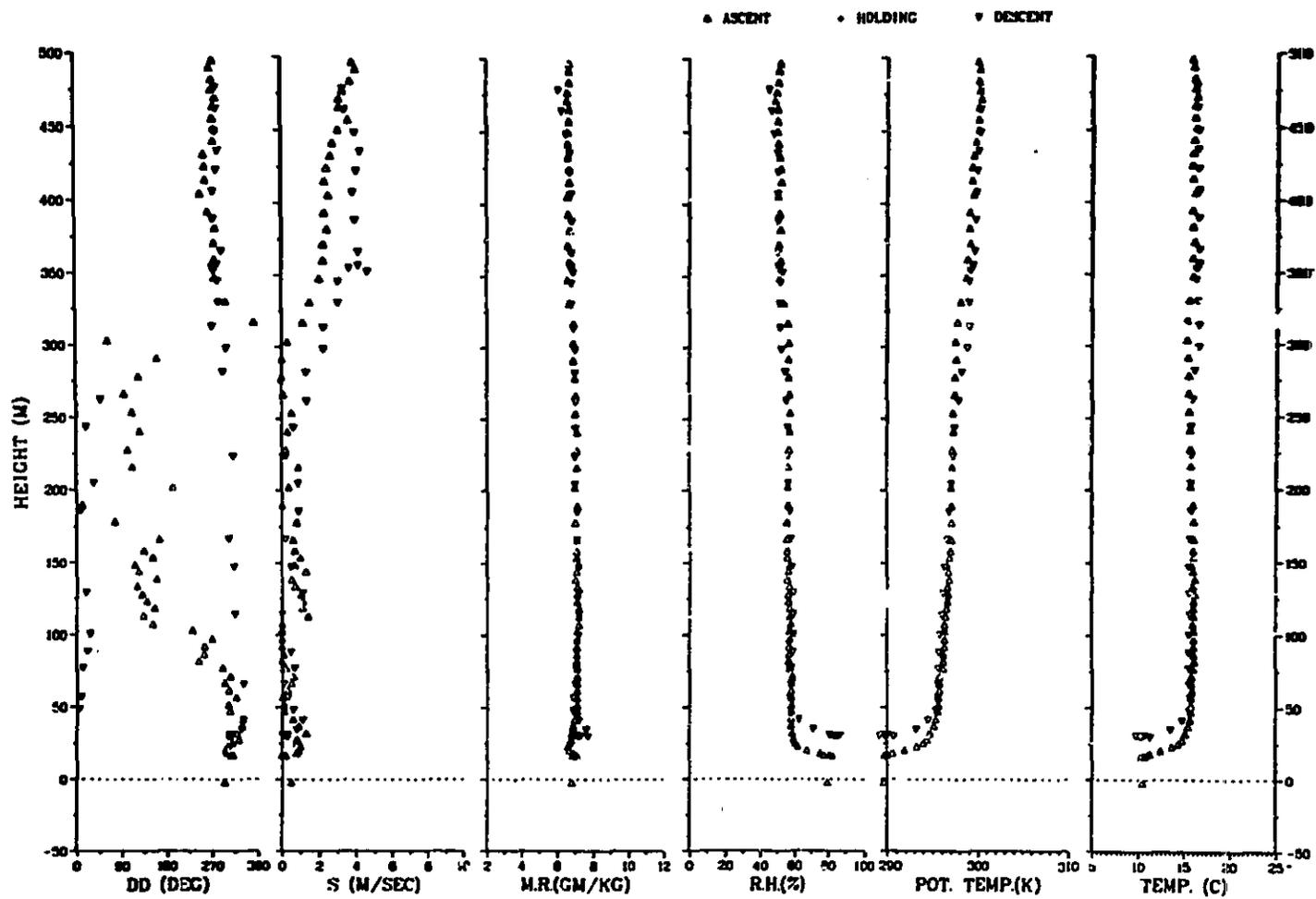


Figura D.2: Datos meteorológicos en la sonda Unit 19.

THORNE 7

TETHERSONDE (WPL) DATE: 091980 2359 TO 0032 PST (TOP 0016)

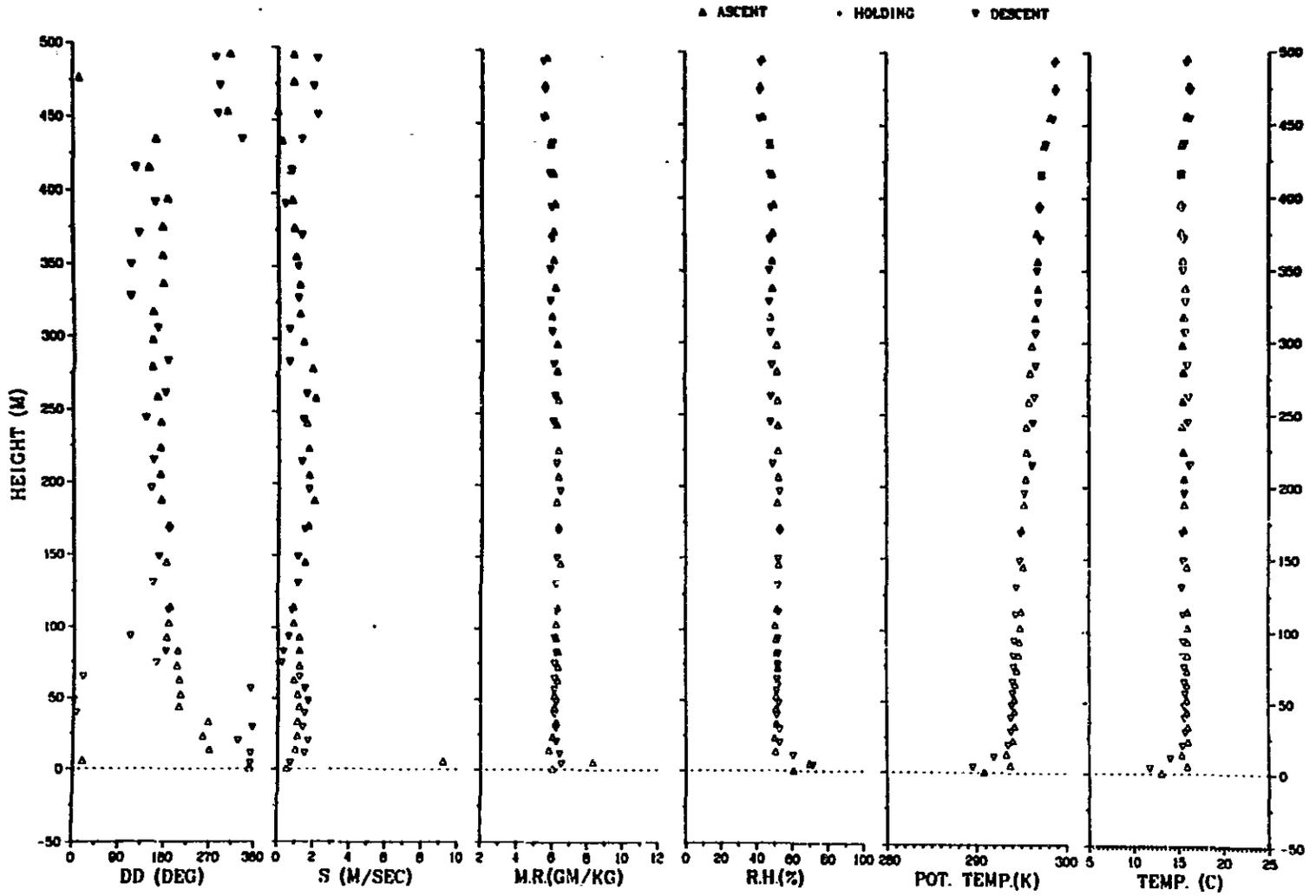


Figura D.3: Datos meteorológicos en la sonda Thorne 7.

RANCHO T

TETHERSONDE (SRL) DATE: 092080 0101 TO 0134 PST (TOP 0109)

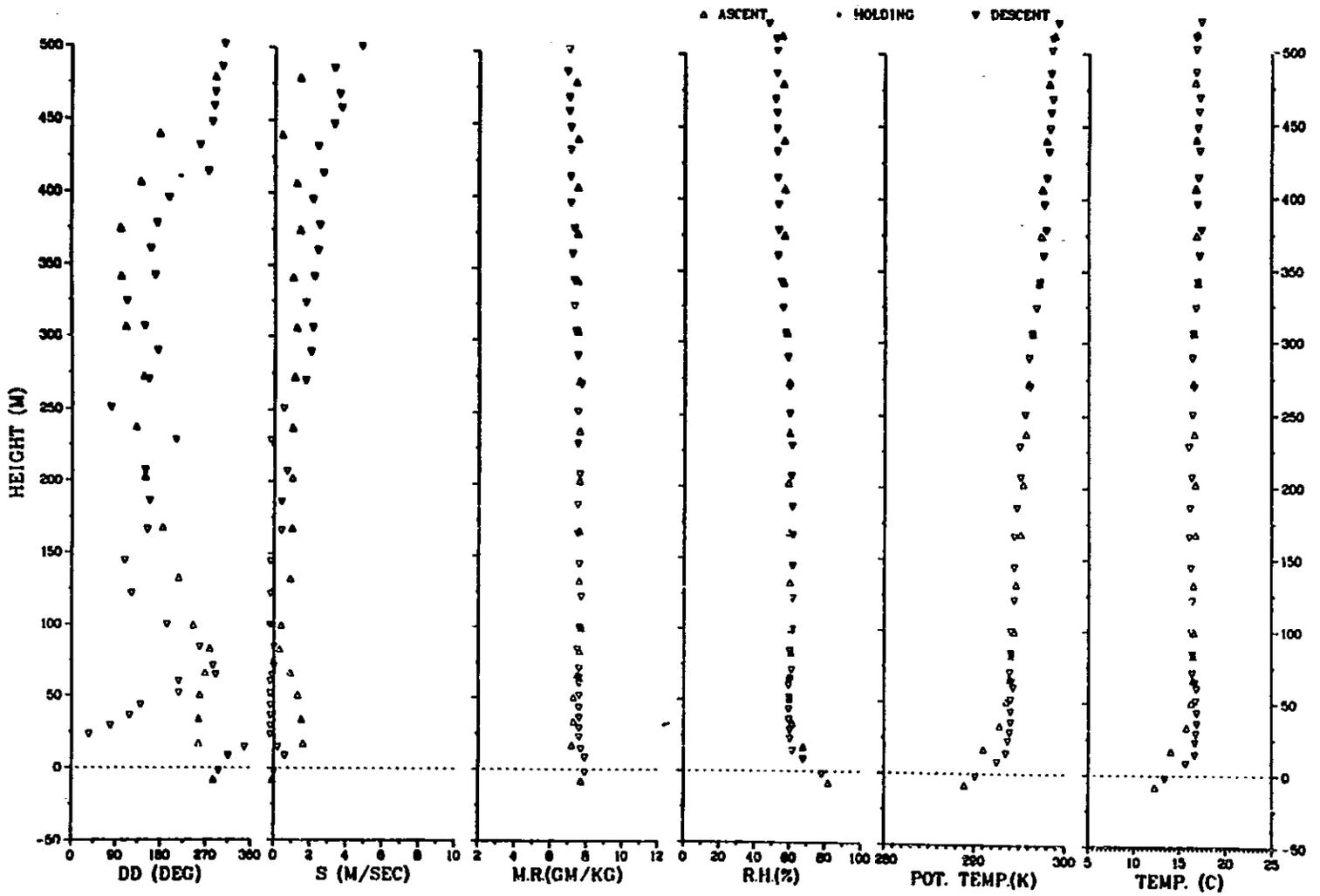


Figura D.4: Datos meteorológicos en la sonda Rancho T.

TETHERSONDE (ATDL) AT LARRY'S QUONSET HUT
 FROM 2300 TO 2350 ON SEPTEMBER 19, 1980

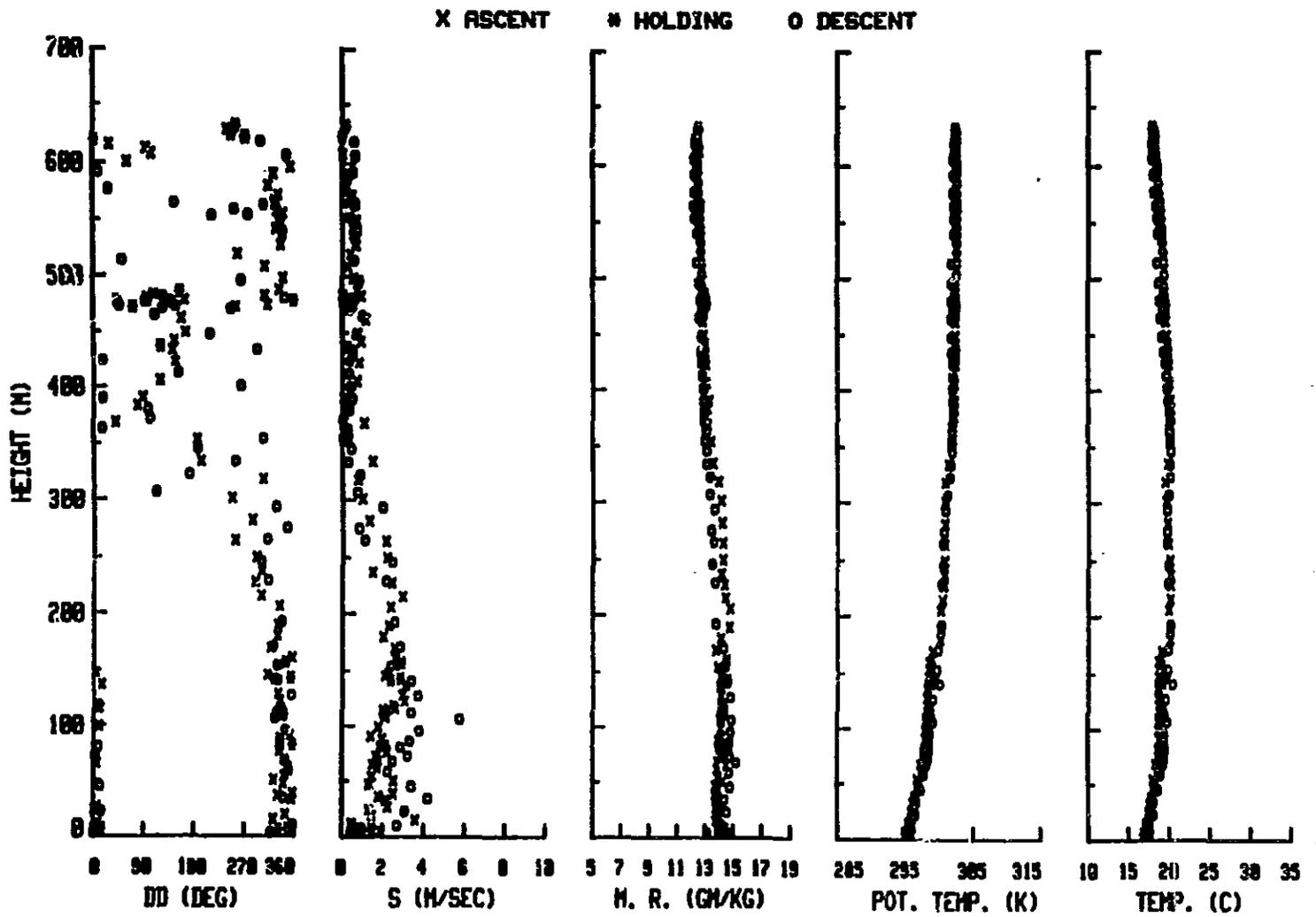


Figura D.5: Datos meteorológicos en la sonda Larrys Q.

OAKMONT

TETHERSONDE (LLNL) DATE 091080 2359 TO 0049 PST (TOP 0024)

▲ ASCENT • HOLDING ▼ DESCENT

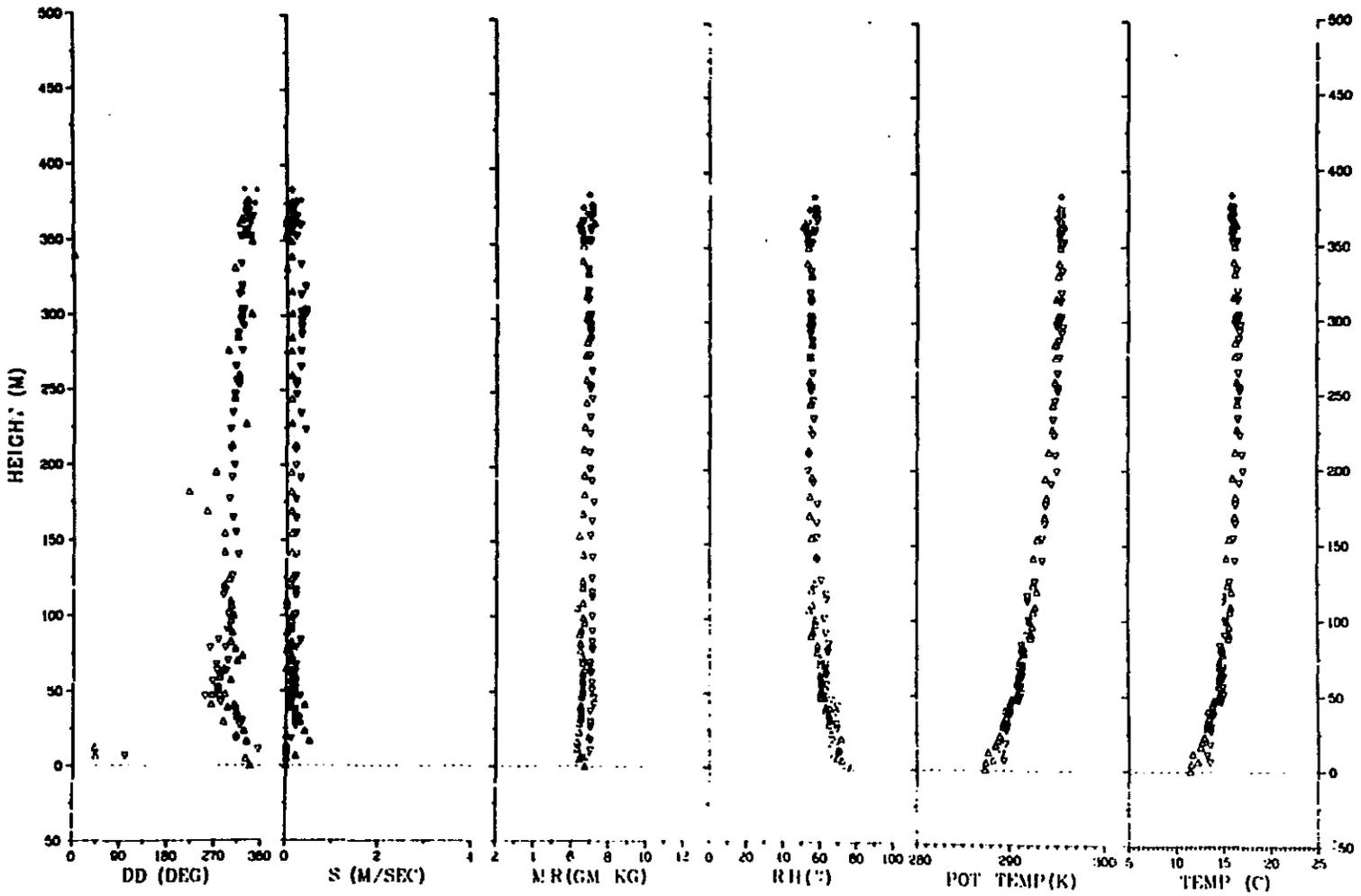


Figura D.6: Datos meteorológicos en la sonda Oakmont.

GEYSERS 80

TETHERSONDE FLT 49

DATE 800820

222 TO 240 PST

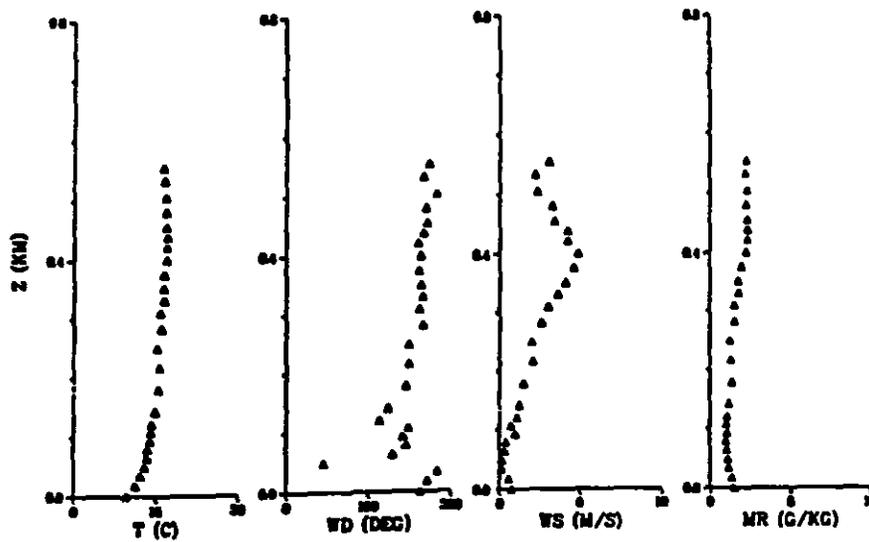
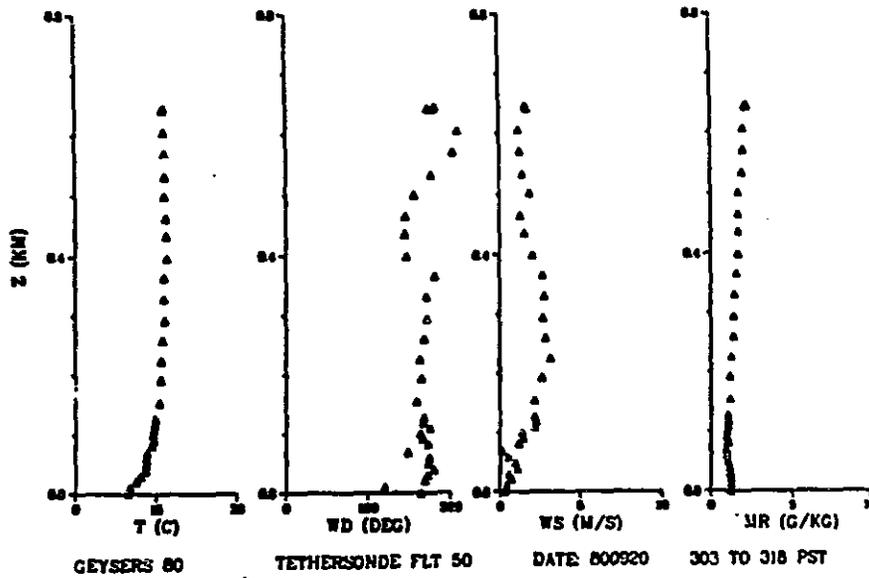


Figura D.7: Datos meteorológicos en la sonda D. East.

Bibliografía

- Andrén, A. (1990). Evaluation of a turbulence closure scheme suitable for air-pollution applications. *J. of Applied Meteorology*, 29:224–239.
- Avila, R. (1986). Lagrangian approach for the prediction of parabolic dispersed two-phase flows. In *Proceedings of the Third Workshop on Two-Phase Flow Predictions*. pp. 17-20, Boris Kidric Institute of Nuclear Sciences, Beograd, Yugoslavia, June 25-27.
- Avila, R. (1994). *Simulación de Flujos Turbulentos con Partículas en Suspensión*. Tesis de Maestría, División de Estudios de Posgrado Facultad de Ingeniería, U.N.A.M.
- Avila, R., Aguirre, R., and Cervantes, J. (1996). Análisis transitorio 3-D de la dispersión de una nube de gas liberada a la atmósfera. In *Segunda Reunión de Fluidodinámica y sus Aplicaciones, CUBA '96*. Universidad de Matanzas, Cuba.
- Avila, R. and Cervantes, J. (1987). Numerical prediction of particle dispersed two-phase flows, using the LSD and SSF models. In *Proceedings of the fourth workshop on two-phase flow predictions*, pages 46–59. edited by Th. Boerner, Erlangen F. R. G.
- Avila, R. and Cervantes, J. (1995). Analysis of the heat transfer coefficient in a turbulent particle pipe flow. *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, 38(11):1923–1932.
- Avila, R. and Cervantes, J. (1997a). Application of an algebraic Reynolds stress turbulence model to the atmospheric boundary layer. *en preparación para enviarse a la revista Boundary Layer Meteorology*.
- Avila, R. and Cervantes, J. (1997b). Numerical simulation of particle dispersion from continuous and instantaneous sources using a hybrid model. *enviado a The Atmospheric Environment*.
- Avila, R. and Cervantes, J. (1997c). Particle dispersion in Katabatic flows using an algebraic Reynolds stress turbulence model. *en preparación para enviarse a la revista Boundary Layer Meteorology*.
- Avila, R. and Cervantes, J. (1997d). Simulación de la capa límite atmosférica en condiciones neutras y estables utilizando un modelo algebraico de esfuerzos de Reynolds. In *Tercera Reunión de Fluidodinámica y sus Aplicaciones, CUBA '97*. Universidad de Matanzas, Cuba.

- Avila, R., Estrada, C., and Cervantes, J. (1994). 3-d numerical simulation of the heat transfer in a nuclear waste repository. In *Proceedings of The International Conference on "Fluid and Thermal Energy Conversion '94"*. Vol.1, pp. 419-424, Denpasar, Bali, Indonesia, Dec. 12-15.
- Avila, R., Estrada, C., and Cervantes, J. (1997). Transient Thermal Response in a Nuclear Waste Repository. *enviado a The Int. J. of Heat and Mass Transfer*.
- Baas, A. F. D., Dop, H. V., and Nieuwstadt, F. T. M. (1986). An application of the Langevin equation for inhomogeneous conditions to dispersion in a convective boundary layer. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 112:165-180.
- Baskett, R. L. and Cederwall, R. T. (1991a). Sensitivity of numerical dispersion modeling to explosive source parameters. In *84th Annual meeting and exhibition*, Vancouver, British Columbia. Air and Waste Management Association.
- Baskett, R. L. and Cederwall, R. T. (1991b). Sensitivity of numerical dispersion modeling to explosive source parameters. Technical Report UCRL-91865, Lawrence Livermore National Laboratory, also presented at 84th Annual Meeting & Exhibition, Air & Waste Management Assoc., Vancouver, British Columbia, June 16-21.
- Becerra, J. T. (1996). *Solución numérica a las ecuaciones de Navier-Stokes en coordenadas generalizadas*. Tesis de Licenciatura en Física, Facultad de Ciencias UNAM, 1996. Director de tesis Eduardo Ramos M.
- Beck, H. L. (1984). Estimates of fallout from Nevada weapons testing in the Western United States based on gummed-film monitoring data. Technical Report EML-433, Environmental Measurements Laboratory, U.S.A.
- Beck, H. L. and Anspaugh, L. R. (1990). Development of the County Data Base: estimates of exposure rates and times of arrival of fallout in the Off-site Radiation Exposure Review Project (ORERP), Phase-II area. Comparison with cumulative deposition estimates based on analysis of retrospective and historical soil samples. Technical Report NVO-320, Department of Energy, Las Vegas, Nevada, U.S.A.
- Borgas, M. S. and Sawford, B. L. (1994). A family of stochastic models for two-particle dispersion in isotropic homogeneous stationary turbulence. *J. of Fluid Mechanics*, 279:69-99.
- Boughton, B. A. and DeLaurentis, J. M. (1992). Description and validation of ERAD: an atmospheric dispersion model for high explosive detonations. Technical Report SAND92-2069, SANDIA National Laboratories, U.S.A.
- Boughton, B. A., DeLaurentis, J. M., and Dunn, W. E. (1987). A stochastic model of particle dispersion in the atmosphere. *Boundary Layer Meteorology*, 40:147-163.
- Brost, R. A. and Wyngaard, J. C. (1978). A model study of the stably stratified planetary boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 35:1427-1440.

- Brost, R. A., Wyngaard, J. C., and Lenschow, D. H. (1982). Marine stratocumulus layers. Part II: Turbulence budgets. *J. Atmos. Sci.*, 39:818-836.
- Careto, L. S., Gosman, A. D., Patankar, S. V., and Spalding, D. B. (1972). Two calculation procedures for steady, three-dimensional flows with recirculation. In *Proc. 3d Int. Conf. Num. Methods Fluid Dyn.* Paris, Vol. II.
- Carmona, J. (1997). *Evaluación de algoritmos de inversión de matriz y su integración modular al programa ATFLOW-3D*. Tesis de Maestría, Ciencias de la Computación, UAM-AZ (en preparación). Director de tesis R. Avila.
- Carnahan, B., Luther, H. A., and Wilkes, J. O. (1969). *Applied numerical methods*. John Wiley and Sons.
- Casadeval, T. J., editor (1991). *First international symposium on volcanic ash and aviation safety, program and abstracts*. Seattle Washington, U.S.A.
- Caughey, S. J., Wyngaard, J. C., and Kaimal, J. C. (1979). Turbulence in the evolving stable boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 36:1041-1052.
- Cebeci, T. and Smith, A. (1974). *Analysis of Turbulent Boundary Layers*. Academic Press, N.Y.
- Cederwall, R. T. and Peterson, K. R. (1990). Meteorological modeling of arrival and deposition of fallout at intermediate distances downwind of the Nevada test site. *Health Physics*, 59:593-601.
- Cervantes, J. (1990). *Apuntes de introducción al estudio del flujo turbulento*. Facultad de Ingeniería, UNAM.
- Chen, C. P. and Wood, P. E. (1985). A turbulence closure model for dilute gas-particle flows. *The Can. J. of Chem. Eng.*, 63:349-360.
- Church, H. W. (1969). Cloud rise from high-explosive detonations. Technical Report SC-RR-68-903, SANDIA National Laboratories, U.S.A.
- Crowe, C. T. (1982). Review-numerical models for dilute gas-particle flows. *Trans. ASME J. of Fluids Engineering*, 104:297-303.
- Crowe, C. T., Sharma, M. P., and Stock, D. E. (1977). The particle source-in cell (PSI-CELL) model for gas-droplet flows. *Trans. ASME J. of Fluids Engineering*, 99:325-332.
- Csanady, G. T. (1963). Turbulent diffusion of heavy particles in the atmosphere. *J. Atmos. Sci.*, 20:201-208.
- Detering, H. W. and Etling, D. (1985). Application of the E- ϵ turbulence model to the atmospheric boundary layer. *Boundary Layer Meteorology*, 33:113-133.

- Dickerson, M. H. and Lange, R. (1986). An example of emergency response model, evaluation studies using the MATHEW/ADPIC models. Technical Report UCRL-94388, Lawrence Livermore National Laboratory, U.S.A.
- Dickerson, M. H. and Sullivan, T. J. (1986). ARAC response to the Chernobyl reactor accident. Technical Report UCRL-20834, Lawrence Livermore National Laboratory, U.S.A.
- Durst, F., Milojevic, D., and Schönung, B. (1984). Eulerian and Lagrangian predictions of particulate two-phase flows: a numerical study. *Appl. Math. Modelling*, 8:101-115.
- Ellis, J. S. and Sullivan, T. J. (1991). ADPIC calculated volcanic ash cloud transport and fallout from 12/20/90 MSH puff. In *First international symposium on volcanic ash and aviation safety, program and abstracts*, Seattle, Washington. edited by T. J. Casadeval.
- Estrada-Gasca, C. A. (1986). *Analytical methods of heat transfer compared with numerical methods as related to nuclear waste repositories*. PhD thesis, New Mexico State University, Las Cruces.
- Ferrero, E., Anfossi, D., Brusasca, G., and Tinarelli, G. (1995). Lagrangian particle model LAMBDA: evaluation against tracer data. *Int. J. Environment and Pollution*, 5(4-6):360-374.
- Foster, K. T., Freis, R. P., and Nasstrom, J. S. (1990). Incorporation of an explosive cloud rise code into ARAC's ADPIC transport and diffusion model. Technical Report UCRL-ID-103443, Lawrence Livermore National Laboratory, U.S.A.
- García, R. (1997). *Simulación Numérica de la Difusión de Gas en Flujos Bifásicos con Superficie Libre*. Tesis de Maestría, ESIME, IPN (en trámite de titulación). Director de tesis R. Avila.
- Gibson, M. M. and Launder, B. E. (1976). On the calculation of horizontal, turbulent, free shear flows under gravitational influence. *J. of Heat Transfer, Trans. ASME*, 98C:81-87.
- Gibson, M. M. and Launder, B. E. (1978). Ground effects on pressure fluctuations in the atmospheric boundary layer. *J. of Fluid Mech.*, 86:491-511.
- Glasston, S. and Dolan, P. J. (1977). *The effects of nuclear war*. Government Printing Office, Washington, D. C. U.S.A.
- Gosman, A. D. and Ideriah, F. J. K. (1976). TEACH-2E: A general computer program for two-dimensional, turbulent, recirculating flows. Technical report, Department of Mechanical Engineering, Imperial College, London.
- Grant, A. L. M. (1986). Observations of boundary layer structure made during the 1981 KONTUR experiment. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 112:825-841.

- Gross, G. (1996). On the applicability of numerical mass/consistent wind field models. *Boundary Layer Meteorology*, 77:379-394.
- Gudiksen, P. H. (1983). ASCOT Data from the 1980 field measurement program in the Anderson Creek Valley, California. Technical Report UCID-18874-80. ASCOT 83-1, Vol. I to III, Lawrence Livermore National Laboratory, U.S.A.
- Gudiksen, P. H., Lange, R., Rodríguez, D. J., and Nasstrom, J. S. (1985). The use of field experimental studies to evaluate emergency response models. Technical Report UCRL-92342, Lawrence Livermore National Laboratory, U.S.A.
- Hanjalić, K. (1994). Advanced turbulence closure models: a view of current status and future prospects. *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 15(3):178-203.
- Hernandez, J. F., Cremades, L., and Baldasano, J. M. (1995). Dispersion modelling of a tall stack plume in the Spanish Mediterranean coast by a particle model. *Atmospheric Environment*, 29(11):1331-1341.
- Hinze, J. O. (1975). *Turbulence*. McGraw-Hill series in Mechanical Engineering, Second Edition.
- Johnk, R. E. and Hanratty, T. J. (1962). Temperature profiles for turbulent flow of air in a pipe-II. The thermal entrance region. *Chem. Eng. Science*, 17:881-892.
- Jones, W. P. and Launder, B. E. (1971). The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 15:301-314.
- Kallio, G. A. and Reeks, M. W. (1989). A numerical simulation of particle deposition in a turbulent boundary layer. *Int. J. Multiphase Flow*, 15(3):433-446.
- Klebanoff, P. S. (1955). Characteristics of turbulence in a boundary layer with zero pressure gradient. Technical Report TR-1247, N.A.C.A.
- Kunz, R. and Moussiopoulos, N. (1995). Simulation of the wind field in Athens using refined boundary conditions. *Atmospheric Environment*, 29(24):3575-3591.
- Laitone, J. A. (1981). A numerical solution for gas-particle flows at high Reynolds numbers. *Trans. ASME, J. Appl. Mech.*, 48:465-471.
- Landau, L. D. and Lifshitz, E. M. (1987). *Fluid Mechanics*. Pergamon Press, Second Edition, Course of Theoretical Physics, Vol. 6.
- Lange, R. (1973). ADPIC: A three-dimensional computer code for the study of pollutant dispersal and deposition under complex conditions. Technical Report UCRL-51462, Lawrence Livermore National Laboratory, U.S.A.
- Lange, R. (1978). ADPIC-a three-dimensional particle-in-cell model for the dispersal of atmospheric pollutants and its comparison to regional tracer studies. *J. of Applied Meteorology*, 17:320-329.

- Lange, R. (1985). *Relationship Between Model Complexity and Data Base Quality for Complex Terrain Tracer Experiments*. PhD thesis, University of California, Davis.
- Launder, B. E., Reece, G. J., and Rodi, W. (1975). Progress in the development of a Re-stress turbulence closure. *J. of Fluid Mech.*, 68:537-566.
- Launder, B. E. and Spalding, D. B. (1972). *Lectures in mathematical models of turbulence*. Academic Press, London and New York.
- Launder, B. E. and Spalding, D. B. (1974). The numerical computations of turbulent flows. *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.*, 3:269-289.
- Lettau, H. H. (1962). Theoretical wind spirals in the boundary layer of a barotropic atmosphere. *Beitr. Phys. Atm.*, 35:195-212.
- Lincoln, N. R., Johnson, M. T., Carlson, C., Lyons, W. A., Moon, D. A., Keen, C. S., Pielke, R. A., and Cotton, W. R. (1991). Visualization of forecasts and simulations produced by a three-dimensional mesoscale numerical model (the Applied Regional Atmospheric Modeling System). In *7th. Int. Conf. on Interactive Information Processing Systems for Meteor., Oceanog. and Hydrol.*, New Orleans. AMS.
- Luhar, A. K. and Britter, R. E. (1989). A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Atmospheric Environment*, 23(9):1911-1924.
- Luhar, A. K. and Rao, K. S. (1993). Random-walk model studies of the transport and diffusion of pollutants in Katabatic flows. *Boundary-Layer Meteorology*, 66:395-412.
- Lyons, W. A., Pielke, R. A., Cotton, W. R.,asz, M., Tremback, C. J., Walko, R. L., and Eastman, J. L. (1993). The applications of new technologies to modeling mesoscale dispersion in coastal zones and complex terrain. In *Air Pollution*, pages 35-85. (edited by P. Zannetti, C. A. Brebia, J. E. García and G. Ayala), Computational Mechanics Publication Southampton Boston copublished with Elsevier Science Publisher.
- Lyons, W. A., Pielke, R. A., Tremback, C. J., Walko, R., Moon, D. A., and Keen, C. S. (1995). Modeling impacts of mesoscale vertical motions upon coastal zone air pollution dispersion. *Atmospheric Environment*, 29(2):283-301.
- Maxey, M. R. and Riley, J. J. (1983). The equation of motion for small rigid particle sphere in a nonuniform flow. *Phys. Fluids*, 26:883-889.
- Mellor, G. L. and Yamada, T. (1982). Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 20(4):851-875.

- Milojevic, D. (1985). Lagrangian Stochastic Deterministic model (LSD) for the prediction of turbulent fluid-particle flows. In *Second Workshop on Two-Phase Flow Prediction*. Lehrstuhl für Strömungs Technik, Universität Erlangen-Nürnberg, Rep. of Germany.
- Milojevic, D., Boerner, T., Wennerberg, D., Berlemont, A., Desjonquieres, P., and Avila, R. (1987). A comparison of six two-phase flow models for the prediction of turbulent gas-particle flows in jets and channels. In *Int. Seminar on Transient Phenomena in Multiphase Flow*. Dubrovnik Yugoslavia.
- Monin, A. S. (1959). On the boundary condition on the earth surface for diffusing pollution. *Adv. Geophys.*, 6:435-436.
- Monin, A. S. and Yaglom, A. M. (1971). *Statistical Fluid Mechanics*, volume 1. M.I.T.
- Morsi, S. A. and Alexander, A. J. (1972). An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems. *J. Fluid Mech.*, 55:193-208.
- Nieuwstadt, F. T. M. (1984). The turbulent structure of the stable, nocturnal boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 41:2202-2216.
- Orlanski, I. (1975). Regional subdivision of scales for atmospheric processes. *Bull. Am. Met. Soc.*, 56(5):527-530.
- Pasquill, F. (1974). *Atmospheric diffusion*. John Wiley, N.Y.
- Patankar, S. V. (1975). Numerical prediction of three-dimensional flows. In *Studies in convection: theory, measurement and applications*. ed. B. E. Launder, Vol. 1, Academic New York.
- Patankar, S. V. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences, McGraw-Hill Company.
- Paulo, D. (1995). *Simulación 2D de la Convección Natural en una Cavidad Rectangular de Relación Dos a Uno*. Tesis de Licenciatura, ESIME, IPN. Director de Tesis, R. Avila.
- Pielke, R. A. (1984). *Mesoscale meteorological modeling*. Academic Press, Orlando.
- Pismen, L. M. and Nir, A. (1978). On the motion of suspended particles in stationary homogeneous turbulence. *J. Fluid Mech.*, 84:193-206.
- Quesada, A. F. and MacLeod, A. M. (1971). The determination of diffusion coefficients in a shearing flow by chemical tracer techniques. In *Symp. Air Pollution, Turbulence and Diffusion*, pages 384-391. Amer. Meteor. Soc., New Mexico.
- Reeks, M. W. (1977). On the dispersion of small particles suspended in an isotropic turbulent field. *J. Fluid Mech.*, 83:529-546.

- Reynolds, W. C. and Perkins, H. C. (1977). *Engineering Thermodynamics*. Mc. Graw-Hill, Second edition.
- Rocendo, L. (1997). *Simulación 3-D de la Dispersión de Partículas de Gas en el Interior de Flujos Turbulentos con Superficie Libre*. Tesis de Maestría, ESIME, IPN (en trámite de titulación). Director de tesis R. Avila.
- Rodi, W. (1980). Turbulence models for environmental problems. In *Prediction Methods for Turbulent Flows*, pages 259-349. ed. W. Kollmann, Hemisphere Publ. Co.
- Rodríguez, D. J. (1988). Long range transport: evaluation of a particle-in-cell model using sources in the US and USSR. Technical Report UCRL-99305, Lawrence Livermore National Laboratory, U.S.A.
- Rodríguez, D. J., Greenly, G. D., Gresho, P. M., Lange, R. L., Lawver, B. S., Lawson, L. A., and Walker, H. (1985). User's guide to the MATHEW/ADPIC models. Technical Report UCID-20415, Lawrence Livermore National Laboratory, U.S.A.
- Rodríguez, D. J. and Rosen, L. C. (1984). An evaluation of a series of SF₆ tracer releases using the MATHEW/ADPIC model. Technical Report UCRL-91854, Lawrence Livermore National Laboratory, U.S.A.
- Rowe, P. N. (1961). The drag coefficient of a sphere. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 39:175-181.
- Sato, Y. and Yamamoto, K. (1987). Lagrangian measurement of fluid particle motion in an isotropic turbulent field. *J. Fluid Mech.*, 175:183-199.
- Sawford, B. L. (1985). Lagrangian statistical simulation of concentration mean and fluctuation fields. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, 24:1152-1166.
- Schönung, B. (1983). *Numerische simulation teilchenbeladener vertikaler rohrströmungen*. PhD thesis, Karlsruhe Universität.
- Schlünzen, K. H. (1994). Mesoscale modelling in complex terrain- An overview on the German nonhydrostatic models. *Beitr. Phys. Atmosph.*, 67(3):243-253.
- Sherman, C. A. (1978). A mass-consistent model for wind fields over complex terrain. *J. of Applied Meteorology*, 17:312-319.
- Shir, C. C. (1973). A preliminary numerical study of atmospheric turbulent flows in the idealized planetary boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 30:1327-1339.
- Shuen, J. S., Chen, L. D., and Faeth, G. M. (1983). Evaluation of a stochastic model of particle dispersion in a turbulent round jet. *AIChE Journal*, 29(1):167-170.
- Snyder, W. H. and Lumley, J. L. (1971). Some measurements of particle velocity autocorrelation functions in a turbulent flow. *J. of Fluid Mech.*, 48 Part 1:41-71.

- Spalding, D. B. (1977). *GENMIX- A general computer program for two-dimensional parabolic phenomena*. Pergamon Press, Oxford.
- Tennekes, H. and Lumley, J. L. (1972). *A First Course in Turbulence*. The MIT Press, Cambridge, Mass.
- Thompson, C. B. (1990). Estimates of exposure rates and fallout arrival times near the Nevada test site. *Health Physics*, 59:555-563.
- Thomson, D. J. (1987). Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *J. of Fluid Mechanics*, 180:529-556.
- Tietjens, O. G. (1957). *Fundamentals of Hydro-and Aeromechanics*. Engineering Societies Monographs, Dover Publications, Inc.
- Tsuji, Y., Morikawa, Y., Tanaka, T., Nakatsukasa, N., and Nakatani, M. (1987). Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a two-dimensional horizontal channel. *Int. J. Multiphase Flow*, 13(5):671-684.
- Uliasz, M. (1994a). Lagrangian particle dispersion modeling in mesoscale applications. In *Environmental Modeling II*, pages 71-102. edited by P. Zannetti, Computational Mechanics Publications, chapter 4.
- Uliasz, M. (1994b). Subgrid-scale parameterizations. In *Mesoscale modeling of the Atmosphere: Meteorological monographs*, pages 13-19. edited by R. A. Pielke and R. P. Pearce, American Meteorological Society, vol. 25, No. 47, chapter 2.
- Uliasz, M., Stocker, R. A., and Pielke, R. A. (1996). Regional modeling of air pollution transport in the southwestern United States. In *Environmental Modeling III*, pages 145-182. edited by P. Zannetti, Computational Mechanics Publications, chapter 4.
- Wang, L. P. and Stock, D. E. (1992a). Numerical simulation of heavy particle dispersion: time step and nonlinear drag considerations. *J. Fluids Engr.*, 114:100-106.
- Wang, L. P. and Stock, D. E. (1992b). Stochastic trajectory models for turbulent diffusion: Monte Carlo Process versus Markov chains. *Atmospheric Environment*, 26 A(9):1599-1607.
- Wang, L. P. and Stock, D. E. (1993). Dispersion of Heavy particles by turbulent motion. *J. Atmos. Sci.*, 50(13):1897-1913.
- Wanta, R. C. and Lowry, W. P. (1976). The Meteorological Settings for Dispersal of Air Pollutants. In *Air Pollution*. ed. A. C. Stern, vol. I, chapter 8, Academic Press.
- Wells, M. R. and Stock, D. E. (1983). The effects of crossing trajectories on the dispersion of particles in a turbulent flow. *J. of Fluid Mech.*, 136:31-62.
- White, F. M. (1991). *Viscous Fluid Flow*. McGraw-Hill, Inc.

- Williams, M. and Yamada, T. (1990). A microcomputer-based forecasting model: potential applications for emergency response plans and air quality studies. *J. Air & Waste Mngmnt. Assoc.*, 40(9):1266-1274.
- Wilson, J. D., Flesch, T. K., and Swaters, G. E. (1993). Dispersion in sheared Gaussian homogeneous turbulence. *Boundary Layer Meteorology*, 62:281-290.
- Wilson, J. D. and Sawford, B. L. (1996). Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere. *Boundary Layer Meteorology*, 78:191-210.
- Wittig, S., Rodi, W., Sill, K. H., Eriksen, S., Rüd, K., Scheuerer, G., and Schulz, A. (1983). Gasturbinen-Schaufelkühlung-programmbeschreibung ALFA. Technical report, Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Universität Karlsruhe.
- Ying, R. and Canuto, V. M. (1996). Turbulence modelling over two-dimensional hills using an algebraic Reynolds stress expression. *Boundary Layer Meteorology*, 77:69-99.
- Yudine, M. I. (1959). Physical considerations on heavy-particle diffusion. In *Atmospheric diffusion and air pollution*. Advances in geophysics, vol. 6, New York, Academic Press, 185-191.
- Zannetti, P. (1990). *Air pollution modeling: theories, computational methods, and available software*. Computational Mechanics Publications.