

## **SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE LA DISPERSIÓN DE PARTÍCULAS SÓLIDAS EN LA ATMÓSFERA UTILIZANDO UN MODELO ACOPLADO.**

**César A. Aguirre<sup>a,b</sup>, Pablo G. Aceñolaza<sup>a,b</sup>, Armando B. Brizuela<sup>a,b</sup> y Carlos Sedano<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Centro de Investigaciones Científicas y Transferencia de Tecnología a la Producción  
(CICyTTP), CONICET. Materi y España s/n, (E3105BWA) Diamante, Argentina,  
cesaraguirredalotto@gmail.com, <http://www.cicyttp.org.ar>*

<sup>b</sup>*Facultad de Ciencias Agropecuarias - Universidad Nacional de Entre Ríos (FCA-UNER),  
Ruta 11, Km 10 (3101) Oro Verde, Argentina.*

**Palabras Clave:** Simulación de los Grandes Vórtices, Modelos Estocásticos, Dispersión de partículas sólidas, Capa límite atmosférica.

**Resumen.** El presente trabajo presenta una técnica de simulación de la trayectoria de partículas sólidas dispersadas en la capa límite atmosférica desde una o varias fuentes puntuales o distribuidas. Esta técnica considera la resolución de las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y energía a partir de la Simulación de los Grandes Vórtices acoplada a una ecuación estocástica lagrangiana para obtener las trayectorias de partículas fluidas vistas por las partículas sólidas. A esta formulación se incorporan las ecuaciones para la resolución de las trayectorias de partículas sólidas considerando que la concentración de las mismas, su tamaño y densidad no son lo suficientemente grandes como para modificar la dinámica del flujo de aire que las transporta. Se comparan las concentraciones a nivel del suelo de partículas de cobre de algunas decenas de micrón obtenidas a partir de simulaciones de la dispersión atmosférica desde dos chimeneas de una planta industrial ubicada en la ciudad de Tucumán, Argentina, con datos obtenidos in-situ para un caso de viento desde el este.

## 1. INTRODUCCIÓN

Los episodios de contaminación atmosférica provocados por basurales a cielo abierto, usinas con deficiente tratamiento de las emanaciones aéreas o mal funcionamiento de los sistemas de depuración, obsoleto parque automotor, entre otros; produce un deterioro en la calidad del aire para los seres vivos, atenta contra la salud, la calidad de vida y los recursos agropecuarios. Este tema es una constante preocupación de las instituciones que tienen a su cargo la formulación de reglamentaciones y control de las emisiones aéreas en parques industriales, circulación automotriz, salud animal, vegetal y humana.

La comprensión teórica del fenómeno de dispersión atmosférica de gases y material particulado ha sido abordada por muchos investigadores que utilizan técnicas experimentales y modelos numéricos. Algunos de ellos son los Modelos Estocásticos Lagrangianos (MEL) que simulan el transporte de partículas en flujos turbulentos. Los modelos estocásticos han sido utilizados como una herramienta de simulación de las trayectorias de partículas transportadas en este tipo de flujos debido al carácter aleatorio que presenta el fenómeno. A partir del pionero aporte de [Bachelier \(1900\)](#), los trabajos de [Durbin \(1980, 1983\)](#) proponen este método, teniendo en cuenta un término determinista (con memoria del paso de tiempo anterior) y un término aleatorio (propio del movimiento "Browniano") en el modelo que predice la velocidad de las partículas. En la discretización numérica de las ecuaciones, este método es conocido con el nombre de "cadenas de Markov". [Wang & Stock \(1992\)](#) analizan las diferencias entre un modelo estocástico utilizando un proceso de "Monte Carlo" con otro que propone el uso de estas cadenas. [Sommerfeld & Huber \(1999\)](#); [Sommerfeld \(2003\)](#) presentan un modelo del fenómeno de colisiones entre partículas sólidas para flujos turbulentos confinados en paredes sólidas. Este efecto también fue estudiado por [Mabrouk et al. \(2008\)](#) pero utilizando técnicas experimentales.

[Aguirre et al. \(2002\)](#) utilizan un MEL aplicado a partículas sólidas, para simular la dispersión de partículas de diferentes propiedades físicas en un jet vertical, contrastando los resultados con la mediciones experimentales realizadas por [Snyder & Lumley \(1971\)](#) en túnel de viento. Los autores proponen simular en primer lugar, las velocidades de las partículas fluidas que se encuentran en las trayectorias de las sólidas transportadas. Para ello proponen una modificación en la ecuación estocástica que rige el movimiento de las fluidas, corrigiendo el tiempo característico de correlación para tener en cuenta las propiedades físicas de la partícula sólida (su densidad y diámetro). Finalmente, con esta ecuación corregida, utilizan otro MEL para las partículas sólidas. [Aguirre et al. \(2003\)](#) utilizan la Simulación de las Grandes Escalas (SGE) para calcular los grandes torbellinos que se presentan en flujos de elevado número de "Reynolds". Los autores adicionaron a este modelo los algoritmos que simulan el transporte y dispersión de especies químicamente reactivas acoplado un MEL al SGE. [Aguirre et al. \(2004\)](#) utilizan este modelo para simular el fenómeno de partículas sólidas que presentan un comportamiento de "saltación" cuando llegan al suelo. [Vinkovic et al. \(2006\)](#) adoptan esta técnica de simulación acoplada (SGE-MEL) para un caso de transporte de partículas sólidas, contrastando sus resultados con experiencias en túnel de viento llevados a cabo por [Nalphanis et al. \(1993\)](#) y [Tanière et al. \(1997\)](#). En relación con la dispersión aérea de enfermedades, [Mayer et al. \(2008\)](#) presentan un modelo estocástico lagrangiano aplicado al estudio este problema, en una región de relieve complejo para el caso de la fibre aftosa.

En este trabajo se presenta el marco teórico para el acople SGE-MEL de trayectorias de partículas fluidas con algunas variantes. Posteriormente, se muestran las ecuaciones que rigen el movimiento de partículas sólidas dispersadas. Por último se realiza una presentación del caso de estudio y se comparan los resultados del modelo con mediciones de concentración de Co-

bre en suelo realizadas por [Fernandez-Turiel et al. \(2001\)](#) en Lastenia, provincia de Tucumán, provocados por la contaminación de una planta de fundición que estuvo operativa durante 24 años.

## 2. MÉTODOS

En primer lugar se presenta el marco teórico utilizado en este trabajo, mostrando las variables analizadas y planteando las ecuaciones utilizadas para la resolución del estado de las mismas en el espacio-tiempo. Se indican las hipótesis, aproximaciones, supuestos y finalmente en esta sección se describen los métodos de resolución numérica de las ecuaciones, las condiciones de borde e iniciales.

### 2.1. Marco teórico, variables y ecuaciones

Se describen las ecuaciones utilizadas para la resolución del campo de viento en régimen turbulento y las técnicas de simulación de las grandes escalas acoplado a un modelo estocástico lagrangiano como una de las alternativas para la obtener una descripción completa de la turbulencia. De esta forma además, se obtienen las trayectorias de partículas fluidas que “son vistas” por las partículas sólidas transportadas. Se presentan posteriormente las ecuaciones que describen las trayectorias de estas partículas sólidas, se indican los supuestos y aproximaciones planteadas y finalmente se muestra un método para obtener las concentraciones de las mismas a nivel del suelo. Tanto para las partículas fluidas como para las sólidas, se imponen condiciones de borde e iniciales. Una técnica que permite simular las condiciones de borde del flujo turbulento utilizando una función de densidad de probabilidades obtenida a partir de datos climáticos de viento es mostrada al final de esta sección.

#### 2.1.1. La Simulación de las Grandes Escalas de la turbulencia (SGE)

En un flujo de fluido en régimen turbulento se inducen torbellinos de diferente tamaño. Una técnica que permite obtener la evolución espacio-temporal de los torbellinos más importantes, desde el punto de vista de la energía que transportan, es conocida como la Simulación de los Grandes Vórtices o Simulación de las Grandes Escalas de la turbulencia (SGE). Este tipo de flujos son los que se presentan en la gran mayoría de las situaciones de circulación de viento en la capa límite atmosférica. La base de esta técnica radica en resolver las ecuaciones de transporte de masa, cantidad de movimiento y energía desde los torbellinos más grandes y hasta un cierto tamaño ya que no es posible realizarlo para todos ellos debido a las limitaciones de cálculo y costo de cómputo. Como con esta técnica no todos los torbellinos son calculados, aparecen términos no-lineales en la resolución de estas ecuaciones. Los mismos son modelados considerando como hipótesis que el efecto promedio que tienen los torbellinos pequeños sobre los grandes implica un sumidero de energía similar al que presenta el fenómeno de “viscosidad molecular”. Es por esta razón que estos modelos son conocidos como modelos de “viscosidad turbulenta”. ARPS (Advanced Regional Prediction System) es un código de SGE concebido bajo estas características que ha sido desarrollado conjuntamente por CAPS (Center of Analysis and Prediction of Storm) y la Universidad de Oklahoma en Estados Unidos de América. El mismo resuelve las ecuaciones de balance de masa, cantidad de movimiento, energía y utiliza la ecuación de estado del aire húmedo para resolver la ecuación de la presión ([Xue et al., 2000](#)). Este modelo ha sido diseñado específicamente para el seguimiento y descripción de tormentas, posee submodelos de flujo de calor y vapor de agua, formación de nubes y precipitación. Para ello, tiene en cuenta la orografía y cobertura del terreno como así también las condiciones

iniciales tanto del suelo como del estado de la atmósfera. Es de tipo semi-compresible ya que tiene en cuenta que la densidad del aire varía sólo con la altura en las ecuaciones de balance de masa, cantidad de movimiento y transporte de escalares, pero admite la compresibilidad en la resolución de la ecuación de la presión utilizando un paso de tiempo más reducido que para las ecuaciones anteriores. Es decir, este código trabaja con dos pasos de tiempo, uno grande para las ecuaciones de balance y otro pequeño para la resolución de la ecuación de la presión. Los balances de masa, de cantidad de movimiento y de energía son resueltos utilizando el esquema de diferencias finitas centradas sobre una celda de tipo "Arakawa C-grid" y utiliza un sistema de coordenadas curvilíneo que sigue las ondulaciones de terreno. El esquema numérico utilizado para obtener la solución de las ecuaciones diferenciales integradas en el paso de tiempo grande puede ser elegido entre uno de 4° orden o uno de 2° orden, centrado de tipo explícito, mientras que el utilizado para integrar la ecuación de la presión y componente vertical de la velocidad del aire es implícito de tipo "Crank-Nicholson". En relación al modelo de "viscosidad turbulenta" ARPS ofrece las alternativas de usar el modelo Smagorinsky Estándar (Smagorinsky, 1963), un modelo basado en una ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta de sub-malla (que es producida por los torbellinos pequeños no resueltos por SGE) donde cada término de dicha ecuación de transporte es modelado en función de los gradientes de velocidad de las grandes escalas (Schumann, 1975) y el modelo Smagorinsky Dinámico propuesto por Germano et al. (1991) y modificado por Lilly (1992) que ha sido introducido como una variante por Aguirre (2005).

Se plantea una descomposición *Reynolds* del flujo en la capa límite atmosférica y de las otras magnitudes escalares considerando un estado base y una fluctuación. El estado base depende sólo de la altura, mientras que las fluctuaciones son variables tridimensionales que evolucionan en el tiempo:

$$\left\{ \begin{array}{l} u(x, y, z, t) = \bar{u}(z) + u'(x, y, z, t) \\ v(x, y, z, t) = \bar{v}(z) + v'(x, y, z, t) \\ w(x, y, z, t) = w'(x, y, z, t) \\ \theta(x, y, z, t) = \bar{\theta}(z) + \theta'(x, y, z, t) \\ p(x, y, z, t) = \bar{p}(z) + p'(x, y, z, t) \\ \rho(x, y, z, t) = \bar{\rho}(z) + \rho'(x, y, z, t) \\ q_v(x, y, z, t) = \bar{q}_v(z) + q'_v(x, y, z, t) \\ q_{li}(x, y, z, t) = q'_{li}(x, y, z, t) \\ q_h(x, y, z, t) = q'_h(x, y, z, t) \end{array} \right. \quad (1)$$

En (1)  $u, v, w$  son las tres componentes del campo de velocidad euleriano en los tres ejes cartesianos ortogonales respectivamente, donde  $x$  toma la dirección oeste-este,  $y$  toma la dirección sur-norte y  $z$  es la dirección vertical. Además,  $\theta$  es la temperatura potencial,  $p$  es la presión,  $\rho$  es la densidad del aire,  $q_v$  es la relación de mezcla del vapor de agua,  $q_{li}$  del agua en estado líquido y  $q_h$  del estado sólido. Puede observarse también que la componente vertical del estado base de la velocidad es nula  $\bar{w}(z) = 0$ .

La técnica SGE implica la resolución de las escalas del flujo turbulento mayores a una escala  $\Delta$  que se debe encontrar en el rango inercial de la cascada de energía de Kolmogorov. Esto involucra el uso de una operación de filtrado espacial con un filtro pasa bajo:

$$u_i^\oplus(\vec{x}, t) = \int_V u_i(\vec{x} - \vec{r}, t) G(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (2)$$

donde  $\vec{r}$  es el radio vector posición y  $G(\vec{r})$  es la función de convolución que cumple la condición:  $\int_V G(\vec{r}) d\vec{r} = 1$ . Esta operación de filtrado, aplicada al campo de velocidades, puede ser vista como una descomposición del mismo en grandes escalas  $\vec{u}^\oplus$  (resueltas por SGE) y pequeñas escalas residuales  $\vec{u}^\ominus$  (no resueltas) :

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{u}^\oplus(\vec{x}, t) + \vec{u}^\ominus(\vec{x}, t). \quad (3)$$

La operación de filtro aplicada a las ecuaciones de transporte de masa, cantidad de movimiento y energía resulta:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}u_i^\oplus)}{\partial x_i} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}u_i^\oplus)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_i^\oplus u_j^\oplus)}{\partial x_j} = \bar{\rho}g_i B^\oplus - \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i}\right)^\oplus + 2\epsilon_{ijk}\Omega_j \bar{\rho}u_k^\oplus - \frac{\partial(\bar{\rho}\tau_{ij})}{\partial x_j} + \frac{\partial(\bar{\rho}T_{ij})}{\partial x_j}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\theta^\oplus)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_j^\oplus \theta^\oplus)}{\partial x_j} = \mathcal{S}_\theta - \frac{\partial(\bar{\rho}h_{\theta_j})}{\partial x_j}. \quad (6)$$

donde  $\mathcal{S}_\theta$  representa las fuentes o sumideros del escalar  $\theta$ . En las ecuaciones (4), (5) y (6)  $\bar{\rho}$  representa el promedio del valor de la densidad del aire en planos horizontales, es decir, varía sólo con la altitud (de allí el carácter semi-compresible del código). Esto implica que se ha utilizado la aproximación siguiente:

$$\rho'(x, y, z, t) \ll \bar{\rho}(z) \quad (7)$$

Además, en la ecuación (5),  $B$  es el término que representa el empuje hidrostático,  $\Omega$  es la velocidad angular de la tierra en el término de la fuerza de *Coriolis* y  $T_{ij}$  es el tensor de tensiones de viscosidad molecular. En las ecuaciones (5) y (6) ha sido utilizada la identidad de *Leonard* (Leonard, 1974) de la siguiente forma. Para la ecuación de balance de cantidad de movimiento (5):

$$\begin{aligned} (u_i u_j)^\oplus &= (u_i^\oplus u_j^\oplus)^\oplus + (u_i^\oplus u_j^\ominus + u_i^\ominus u_j^\oplus)^\oplus + (u_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus, \\ &= (u_i^\oplus u_j^\oplus) + \mathcal{L}_{ij} + \mathcal{C}_{ij} + \mathcal{R}_{ij}, \\ &= (u_i^\oplus u_j^\oplus) + \tau_{ij}, \end{aligned} \quad (8)$$

mientras que para la ecuación de la energía (6):

$$(u_j \theta)^\oplus = u_j^\oplus \theta^\oplus + h_{\theta_j}. \quad (9)$$

Para la resolución del tensor de tensiones de submalla o viscosidad de submalla  $\tau_{ij}$  y del término  $h_{\theta_j}$ , ARPS dispone de dos alternativas: Una es utilizar un modelo a gradiente a partir de las escalas resueltas, denominado modelo de *Smagorinsky Estándar* (Smagorinsky, 1963). La segunda opción es estimar la energía cinética turbulenta de submalla (1.5 TKE) (Schumann, 1975) planteando una ecuación de transporte donde los términos de producción, difusión, gravedad y disipación son obtenidos a partir de modelos a gradiente propuestos por Deardorff (1980).

Aguirre (2005) adicionó una tercer alternativa consistente en la utilización del modelo *Smagorinsky dinámico* siguiendo la metodología de Germano et al. (1991).

Como se dijo anteriormente, la ecuación de la presión es resuelta a partir de la ecuación de estado de los gases para el aire húmedo siguiendo a Klemp & Wilhelmson (1978):

$$\frac{\partial p'^{\oplus}}{\partial t} = - \left( u_i \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^{\oplus} - g_i \bar{\rho} u_i^{\oplus} - V_s^2 \frac{\partial (\bar{\rho} u_i)^{\oplus}}{\partial x_i} + V_s^2 \bar{\rho} \left( \frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dt} - \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \right)^{\oplus} \quad (10)$$

En la ecuación (10)  $V_s$  representa la velocidad del sonido y  $A$  es la relación entre la constante de los gases perfectos para el aire seco y el aire húmedo (Proctor, 1987). El término de correlación velocidad-gradiente de la fluctuación de la presión es resuelto utilizando un modelo a gradiente (Deardorff, 1980). En la formulación de esta última ecuación no se ha realizado la aproximación (7), de allí el carácter semi-compresible del modelo.

El modelo de pared que permite estimar las tensiones tangenciales  $\tau_{13}|_p$  y  $\tau_{23}|_p$  en las celdas de la malla de cálculo más próximas al suelo es de tipo *ley de pared logarítmica*:

$$\begin{cases} \tau_{13}|_p = -\bar{\rho} C_{dm} \left| \vec{V}_p^{\oplus} \right| u_p^{\oplus} \\ \tau_{23}|_p = -\bar{\rho} C_{dm} \left| \vec{V}_p^{\oplus} \right| v_p^{\oplus} \end{cases} \quad (11)$$

donde el subíndice  $p$  denota el valor calculado de la variable para la celda del dominio de cálculo adyacente al suelo,  $\left| \vec{V}_p^{\oplus} \right|$  es el módulo de la componente horizontal de la velocidad y  $C_{dm}$  es el coeficiente de fricción calculado teniendo en cuenta la ley logarítmica del perfil de viento:

$$C_{dm} = \frac{k_v^2}{\ln^2 \left( \frac{\Delta z_p}{z_0} \right)} \quad (12)$$

$k_v$  representa la constante de *Von-Kármán*,  $\Delta z_p$  es la altura de la celda de cálculo adyacente al suelo y  $z_0$  es el parámetro de la rugosidad del suelo.

### 2.1.2. Modelo Estocástico Lagrangiano acoplado al SGE para simular la trayectoria de partículas fluidas

Para obtener las trayectorias de partículas fluidas en régimen turbulento debe realizarse la simulación de las pequeñas escalas no resultas por SGE. Es decir, se simula el movimiento de las mismas al interior de un elemento de la malla de cálculo SGE. Para esto puede ser utilizada la ecuación de Langevin haciendo una analogía con el movimiento Browniano:

$$\frac{dU_i}{dt} = h_{ij}(U_j, t) + q_{ij}(U_j, t)\eta_j(t), \quad (13)$$

donde  $h_{ij}(U_j, t)$  es el término determinista de la velocidad lagrangiana  $U_i(X_j, t)$  de una partícula fluida y  $q_{ij}(U_j, t)$  es el término aleatorio ligado a las propiedades estadísticas de la turbulencia.  $\eta_j(t)$  es una variable aleatoria cuyo valor medio es nulo y cuya covarianza está dada por:  $\langle \eta_i(t')\eta_j(t'') \rangle = \delta_{ij}\delta(t' - t'')$ . Esta propiedad sugiere que  $\eta_j(t)$  no está correlacionada ni en el espacio ni en el tiempo, es decir, sigue un proceso de "Markov".

Para obtener los términos de la ecuación de Langevin (13) se postulan las siguientes hipótesis:

- (a) Las pequeñas escalas de la turbulencia son estadísticamente isotrópicas, es decir, pierden la memoria de la geometría del torbellino que las originó.
- (b) Las mismas se encuentran lejos de la zona de producción de energía cinética en el espectro de energía, ubicándose luego del rango inercial.
- (c) Existe una transferencia de energía desde las grandes escalas hacia las pequeñas, disipándose la misma por viscosidad molecular.

En esta última hipótesis se basa el modelo estocástico de simulación de las pequeñas escalas. Los términos determinista y aleatorio de la ecuación (13) son obtenidos a partir de las grandes escalas resueltas por SGE. Por ende, la partícula fluida se desplaza por el interior de la celda de la malla de cálculo siguiendo la evolución de las grandes escalas resueltas por SGE y se le adiciona una fluctuación que simula el comportamiento de las pequeñas escalas de movimiento producidas en el interior de la misma. La descomposición del campo de velocidades de cada partícula fluida puede expresarse como:

$$U_i = u_i^{\oplus} + u_i^{\ominus}. \quad (14)$$

Para obtener los términos de la ecuación (13) se puede utilizar la ecuación de transporte de la densidad de probabilidad filtrada del campo de velocidades (DPFV) (Gicquel et al., 2002), denominada ecuación de “Focker-Plank”:

$$\frac{\partial P_L}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v_i} [h_{ij}(U_j, t)P_L] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} [q_{ik}(U_i, t)q_{jk}(U_j, t)P_L]. \quad (15)$$

Si se utiliza la descomposición de la velocidad lagrangiana de una partícula fluida (14) en la DPFV (15) se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_L}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial v_i} [h_{ij}^{\oplus}(u_j^{\oplus}, t)P_L] - \frac{\partial}{\partial v_i} [h_{ij}^{\ominus}(u_j^{\ominus}, t)P_L], \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} [q_{ik}^{\oplus}(u_i^{\oplus}, t)q_{jk}^{\oplus}(u_j^{\oplus}, t)P_L], \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} [q_{ik}^{\ominus}(u_i^{\ominus}, t)q_{jk}^{\ominus}(u_j^{\ominus}, t)P_L]. \end{aligned} \quad (16)$$

Si además se utiliza la misma descomposición (14) en la ecuación de Langevin (13):

$$\frac{du_i^{\oplus}}{dt} + \frac{du_i^{\ominus}}{dt} = h_{ij}^{\oplus}(u_j^{\oplus}, t) + h_{ij}^{\ominus}(u_j^{\ominus}, t) + [q_{ij}^{\oplus}(u_j^{\oplus}, t) + q_{ij}^{\ominus}(u_j^{\ominus}, t)] \eta_j(t). \quad (17)$$

En esta instancia del análisis se pueden realizar algunas simplificaciones en los términos de (17) haciendo referencia a las hipótesis mencionadas precedentemente. En particular, la hipótesis (b) propone que las pequeñas escalas están lejos del rango inercial de transferencia de energía, entonces puede suponerse que el término aleatorio  $q_{ij}$  esté completamente definido por las pequeñas escalas  $u_j^{\ominus}$ , en otras palabras  $q_{ij}^{\oplus}(u_j^{\oplus}, t) \equiv 0$ . Por lo tanto separando variables en (17) se pueden asignar las siguientes equivalencias:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{du_i^{\oplus}}{dt} = h_{ij}^{\oplus}(u_j^{\oplus}, t), \\ \frac{du_i^{\ominus}}{dt} = h_{ij}^{\ominus}(u_j^{\ominus}, t) + q_{ij}^{\ominus}(u_j^{\ominus}, t)\eta_j(t). \end{array} \right. \quad (18)$$

La primera igualdad de (18) es la derivada material de las grandes escalas turbulentas. La misma es calculada usando la técnica SGE. De (5):

$$\frac{du_i^\oplus}{dt} = g_i B^\oplus - \frac{1}{\bar{\rho}} \left( \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^\oplus + 2\epsilon_{ijk} \Omega_j u_k^\oplus - \frac{\partial(\tau_{ij})}{\partial x_j} + \frac{\partial(T_{ij})}{\partial x_j}. \quad (19)$$

Por lo tanto, el primer término del segundo miembro de (16) es obtenido desde la SGE:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial v_i} [h_{ij}^\oplus(u_j^\oplus, t) P_L] &= -g_i B^\oplus \frac{\partial P_L}{\partial v_i} + \frac{1}{\bar{\rho}} \left( \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^\oplus \frac{\partial P_L}{\partial v_i} \\ &\quad - 2\epsilon_{ijk} \Omega_j \frac{\partial(u_k^\oplus P_L)}{\partial v_i} + \frac{\partial(\tau_{ij})}{\partial x_j} \frac{\partial P_L}{\partial v_i} \\ &\quad - \frac{\partial(T_{ij})}{\partial x_j} \frac{\partial P_L}{\partial v_i}. \end{aligned} \quad (20)$$

Para los demás términos de (16) nos resta proponer un modelo de turbulencia, ya que son términos que dependen de las escalas no resueltas por SGE. Para el término determinista, que tiene en cuenta las escalas no resueltas por SGE, [Gicquel et al. \(2002\)](#), proponen que éste sea proporcional al valor de velocidad característico de las pequeñas escalas y un tensor que tenga en cuenta la energía cinética turbulenta de sub-malla. La idea de esta propuesta es que a mayor energía cinética turbulenta de sub-malla (no resuelta por SGE) mayor número de pequeños torbellinos y por ende, más importante es este término frente a los otros. Los demás son los que expresan la componente aleatoria de la turbulencia de sub-malla. Ellos pueden ser modelados teniendo en cuenta la hipótesis (a), es decir, las pequeñas escalas tienen un comportamiento isotrópico. [Pope \(1994\)](#) propone una expresión para este término que tiene en cuenta además la tasa de disipación en turbulencia homogénea isotrópica de sub-malla  $\varepsilon$ .

Con estas consideraciones, la ecuación de transporte de la densidad de probabilidad filtrada para el campo de velocidades DPFV puede sintetizarse en:

$$\frac{\partial P_L}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v_i} \left[ \frac{du_j^\oplus}{dt} P_L \right] - \frac{\partial}{\partial v_i} [\alpha_{ij}(u_j^\ominus) P_L] + \frac{1}{2} C_0 \varepsilon \frac{\partial^2 P_L}{\partial v_i \partial v_j}, \quad (21)$$

en la que  $C_0 = 2, 1$  es la constante de *Kolmogorov*.

Con las hipótesis planteadas y haciendo uso de la DPFV, los términos determinista y aleatorio de la ecuación estocástica que simula la trayectoria de las partículas fluidas (13) pueden ser expresados como:

$$\begin{cases} h_{ij}(u_j, t) &= \frac{du_j^\oplus}{dt} + \alpha_{ij} u_j^\ominus, \\ q_{ij}(u_j, t) &= \sqrt{C_0 \varepsilon} \delta_{ij}. \end{cases} \quad (22)$$

Como la derivada material de las grandes escalas de la velocidad se obtiene utilizando SGE y la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta  $\varepsilon$  es calculada con un modelo a gradiente siguiendo a [Deardorff \(1980\)](#) por el código ARPS, resta proponer una expresión para el tensor determinista  $\alpha_{ij}$ . Este término está relacionado a las propiedades estadísticas de la turbulencia



de sub-malla. [Aguirre & Brizuela \(2008\)](#) presentan las diferentes variantes que puede presentar este término en función de las mismas. Para el caso más complejo, estas características son de flujo no estacionario, inhomogéneo y anisotrópico, como los que se desarrollan en la capa límite atmosférica sobre un terreno rugoso y heterogéneo cerca de la superficie del suelo:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{2K^\ominus} \frac{dK^\ominus}{dt} \delta_{ij} - \left(\frac{3}{4}C_0\right) \frac{\varepsilon}{K^\ominus} \delta_{ij} + \left(\frac{R_{ij}}{2K^\ominus} - \frac{\delta_{ij}}{3}\right) \frac{\varepsilon}{K^\ominus}, \quad (23)$$

donde  $K^\ominus = \frac{1}{2}(u_i^\ominus u_i^\ominus)^\oplus$  representa la energía cinética turbulenta de sub-malla que es obtenida utilizando una ecuación de transporte ([Deardorff, 1980](#)).  $R_{ij}$  es el tensor “Reynolds” de sub-malla o viscosidad turbulenta de sub-malla que se calcula a partir del modelo “Smagorinsky Dinámico”. Más detalles de esta resolución pueden encontrarse en [Aguirre \(2005\)](#), [Aguirre et al. \(2006a,b\)](#) y [Aguirre & Brizuela \(2008\)](#).

### 2.1.3. Simulación de las trayectorias de partículas sólidas

La dispersión atmosférica de partículas sólidas emitidas por la planta de fundición ubicada en Lastenia son del orden de decenas de micrón. Por ende, se pueden asumir las siguientes hipótesis:

- Las fuerzas debidas a la gravedad y la viscosidad son preponderantes respecto de las demás fuerzas que actúan sobre las partículas sólidas.
- La forma de las partículas sólidas es aproximadamente esférica.
- La concentración de partículas sólidas no es lo suficientemente grande como para influenciar las propiedades cinemáticas ni termodinámicas del aire que las transporta.

La ecuación de movimiento de una partícula sólida inmersa en un flujo de fluido puede ser escrita de la forma siguiente ([Kosinski et al., 2008](#)):

$$\frac{dV_i}{dt} = \mathcal{F}_i, \quad (24)$$

donde  $V_i$  la velocidad de la partícula sólida y  $\mathcal{F}_i$  representa las fuerzas por unidad de masa a que está sometida.

La hipótesis (a) ha sido comprobada cuando la densidad de las partículas sólidas es más de 1000 veces la densidad del aire que las transporta. Específicamente, la densidad de cobre es de  $\rho_{Cu} = 8900 \text{ Kg.m}^{-3}$  mientras que la del aire es de aproximadamente  $1,2 \text{ Kg.m}^{-3}$ . Entonces el segundo miembro de (24) puede resumirse en:

$$\mathcal{F}_i = \frac{U_i - V_i}{\tau_s} - g_i \delta_{i3}, \quad (25)$$

en la cual el primer término del segundo miembro representa la fuerza de arrastre mientras que el segundo término es la fuerza de gravedad que actúa en la dirección vertical indicada con el índice 3, ambas por unidad de masa de la partícula sólida.  $\tau_s$  es una escala de tiempo de la aceleración de la partícula. La misma depende de relación de densidades entre la partícula y el aire, del diámetro de la partícula sólida  $d_s$  y de un coeficiente de arrastre  $C_D$ :

$$\tau_s = \frac{4}{3} \frac{d_s}{C_D} \frac{\rho_s}{\rho} \frac{1}{|U_i - V_i|}. \quad (26)$$

La hipótesis (b) sugiere que el coeficiente de arrastre  $C_D$  es proporcional al diámetro de la partícula sólida  $d_s$  pero además, depende de la viscosidad del fluido y de régimen del mismo alrededor de ella. Esta condición se evalúa normalmente calculando el “número de Reynolds de la partícula sólida”  $\Re_s$ :

$$\Re_s = \frac{d_s |U_i - V_i|}{\nu}, \quad (27)$$

donde  $\nu$  representa la viscosidad dinámica del fluido.

En régimen laminar (o de Stokes) el  $\Re_s \leq 1$  y el coeficiente de arrastre toma la expresión:

$$C_D = \frac{24}{\Re_s}. \quad (28)$$

En régimen turbulento muchos autores proponen diferentes expresiones. Particularmente, [Sommerfeld \(2003\)](#) utiliza la siguiente:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{\Re_s} (1 + 0,15 \Re_s^{0,687}) & , \quad 1 < \Re_s \leq 1000, \\ 0,44 & , \quad \Re_s > 1000. \end{cases} \quad (29)$$

En las ecuaciones (25), (26) y (27)  $U_i$  es la velocidad del fluido en la posición de la partícula sólida. [Aguirre et al. \(2002, 2004\)](#) estimaron ésta con una ecuación estocástica similar a la (13) pero utilizando una descomposición de “Reynolds” (RANS). Las trayectorias de las fluctuaciones de la velocidad del fluido vista por la partícula sólida fueron corregidas usando una escala de “tiempo característico ponderado” teniendo en cuenta la densidad y diámetro de las partículas sólidas.

En la descomposición en grandes y pequeñas escalas,  $U_i$  se descompone según (14) y  $u_i^\ominus$  puede obtenerse a partir de la simulación de partículas fluidas que son emitidas desde las mismas fuentes que las sólidas y dispersadas en la capa límite atmosférica siguiendo las ecuaciones de movimiento descritas en la sección 2.1.2. Sin embargo, es muy difícil que al cabo de unos pocos pasos de tiempo, las posiciones de los pares de partículas (fluida-sólida) lanzadas desde la misma fuente, estén todavía en posiciones coincidentes. Una alternativa para abordar este problema es “detectar” la partícula fluida más cercana a cada partícula sólida luego de cada paso de tiempo, para asignarle la velocidad  $U_i$ . Esto requiere, por un lado, que se computen ambos conjuntos de partículas en la simulación y por otro lado, la utilización de una mayor cantidad de partículas fluidas que de sólidas debido a que sus trayectorias son distintas. En cada nueva posición de una partícula sólida se debe encontrar una fluida cercana. En este caso es conveniente que la fuente de inyección de partículas fluidas sea mucho más grande que la de las sólidas. [Vinkovic et al. \(2006\)](#) siguieron este método. Una alternativa, que utiliza menos recursos computacionales, es la de calcular  $u_i^\ominus$  en la posición exacta de la partícula sólida a partir de la energía cinética turbulenta de sub-malla  $K^\ominus$  para luego utilizar una ecuación estocástica similar a la (13). De esta forma, no es necesario computar las trayectorias de las partículas fluidas ni utilizar algoritmos de búsqueda por cercanía a la partícula sólida. Este método es el que se utilizó en esta contribución y que a continuación se detalla.

## 2.2. Métodos de resolución numérica de las ecuaciones para la simulación de las trayectorias de las partículas sólidas

Las ecuaciones discretizadas para la posición y velocidad de las partículas sólidas pueden escribirse como:

$$\begin{cases} V_i^{(n+1)} = V_i^{(n)} + \frac{\Delta t}{\tau_s} (U_i^{(n)} - V_i^{(n)}) - g_i \Delta t \delta_{i3}, \\ X_i^{(n+1)} = X_i^{(n)} + \frac{(V_i^{(n+1)} - V_i^{(n)})}{2} \Delta t, \end{cases} \quad (30)$$

donde el superíndice indica el instante de tiempo en la simulación y  $\Delta t = t^{(n+1)} - t^{(n)}$  es el paso de tiempo.

La velocidad de la partícula fluida en la posición de la sólida se estima usando la descomposición en grandes y pequeñas escalas (14). Se pondera  $u_i^{\oplus (n)}$  utilizando la velocidad calculada por SGE en los cuatro nodos de la grilla más próximos por el método de la distancia cuadrática. Luego, la componente que representa la velocidad fluida de sub-malla (o pequeñas escalas no resueltas por SGE) es modelada discretizando la segunda igualdad del sistema (18) de la siguiente forma:

$$u_i^{\ominus (n)} = u_i^{\ominus (n-1)} + \alpha_{ij}^{(n)} u_i^{\ominus (n-1)} \Delta t + \sqrt{C_0 \varepsilon \Delta t} \chi^{(n)}, \quad (31)$$

donde  $\chi$  es una variable aleatoria independiente, de media cero y varianza uno.

Para la estimación de la fluctuación de la velocidad en el paso de tiempo anterior ( $n - 1$ ) se considera isotropía estadística:

$$u_i^{\ominus (n-1)} = \sqrt{\frac{2}{3}} K^{\ominus} \chi^{(n)}. \quad (32)$$

El tensor  $\alpha_{ij}^{(n)}$  se obtiene de (23) ponderando  $K^{\ominus}$ ,  $\varepsilon$  y  $R_{ij}$ , calculados con la SGE, desde los nodos de la grilla más cercanos a la posición de la partícula sólida.

De esta forma, según (14), la velocidad de la partícula fluida vista por la partícula sólida es:

$$U_i^{(n)} = u_i^{\oplus (n)} + u_i^{\ominus (n)}. \quad (33)$$

## 2.3. Condiciones iniciales y de borde para las partículas sólidas y la SGE

Condiciones iniciales para las partículas sólidas: Se lanzan 5 partículas sólidas por paso de tiempo desde las fuentes de emisión. Si éstas son transportadas por gases de elevada temperatura que salen desde la boca de las chimeneas, puede utilizarse una fórmula para calcular la velocidad de salida de los gases que considere el tiro de las mismas. Esa velocidad es asignada a las partículas fluidas en la simulación. Esta fórmula se deriva de aplicar el teorema de "Bernoulli" vertical y horizontalmente para tener en cuenta el "tiro natural" y la depresión que genera el viento a la boca de la chimenea. De la Figura 1:

$$W_2^2 = \frac{U_2^2 \left( \frac{T_g}{T_a} \right) + 2gh \left( \frac{T_g}{T_a} - 1 \right)}{1 + 4 \frac{hf}{D}}, \quad (34)$$

donde  $T_g$  y  $T_a$  son las temperaturas de los gases de combustión que desprende la chimenea y del aire exterior a la altura de la boca de la misma respectivamente,  $g$  la aceleración de la gravedad,

$h$  la altura de la chimenea,  $f$  representa las pérdidas primarias debidas a la fricción de los gases con las paredes de la misma y  $D$  es su diámetro.  $U_2$  es la velocidad del viento a la altura de la boca de la chimenea. Para el parámetro  $f$  se utilizó la segunda ecuación de Kármán-Prandtl con

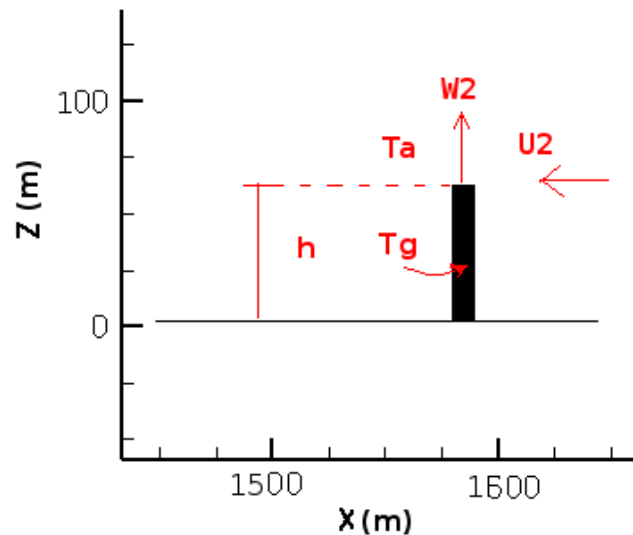


Figura 1: Esquema de cálculo de la velocidad de salida de los gases desde la boca de la chimenea.

un coeficiente de rugosidad de pared de la chimenea  $k = 10 \text{ mm}$  (chimeneas de cemento).

Condiciones de borde para las partículas sólidas: Se impusieron condiciones de no-deslizamiento para las partículas sólidas que caen por debajo de una altura de  $z = 1,5z_0$  para simular que las mismas quedan atrapadas por los elementos del terreno.

Por último, se optó por simular la dispersión atmosférica de partículas de cobre, cuya densidad  $\rho_{Cu} = 8900 \text{ Kg.m}^{-3}$  y diámetro  $d_{Cu} = 46,5 \text{ }\mu\text{m}$  son característicos de este tipo de procesos industriales.

Condiciones iniciales para la SGE: Se inicializa la simulación considerando viento calmo y atmósfera de estabilidad neutra con una temperatura potencial  $\bar{\theta}_z = 299^\circ \text{K}$ .

Condiciones de borde para la SGE: Se simula un caso de viento del ESTE. Para las condiciones de borde de la SGE se considera una función de densidad de probabilidad tipo “Weibull” con dos parámetros que servirá para forzar la velocidad del viento:

$$p(u) = \left(\frac{K}{C}\right) \left(\frac{u}{C}\right)^{K-1} e^{-\left(\frac{u}{C}\right)^K}, \quad (35)$$

donde el parámetro  $K$  representa el “factor de forma” y el parámetro  $C$  es el “factor de escala” de la distribución. Justus (1978) muestra cinco métodos para estimar  $K$  y  $C$  a partir de las estadísticas de viento. El método que utiliza sólo la velocidad media del viento y hace una suposición acerca de la varianza de la distribución considerando que el terreno presenta vegetación

arbórea y herbácea con cultivos de baja altura y zonas suburbanas como es el caso bajo estudio indica para estos parámetros:

$$\begin{cases} K = 0,94\sqrt{\bar{u}}, \\ C = \frac{\bar{u}}{\Gamma\left(1 + \frac{1}{K}\right)}. \end{cases} \quad (36)$$

La curva de “duración de velocidad de viento” se obtiene integrando (35) hasta una determinada velocidad  $u$  multiplicada por  $T$  que representa la duración total del período a simular:

$$t = T \left[ 1 - e^{-\left(\frac{u}{C}\right)^K} \right], \quad (37)$$

y la velocidad en función del tiempo necesaria para incorporar las condiciones de borde en el transcurso de la simulación es:

$$u(t) = C \left[ \ln \left( \frac{T}{T-t} \right) \right]^{\frac{1}{K}}. \quad (38)$$

En general, se elige a  $T = 3600$  s que representa la duración en días de un año. De esta forma, el tiempo en segundos de una simulación corresponde al tiempo en días de un año para el cual se presentan las estadísticas de viento; en particular la velocidad media  $\bar{u}$ .

Para el caso de estudio, el valor medio de la velocidad del viento a 10 m de altura proveniente desde el ESTE es de  $\bar{u}_{10} = 2,5$  m.s<sup>-1</sup>. Los parámetros de “Weibull” resultan:  $K = 1,486$  y  $C = 2,766$ .

Para el perfil de la velocidad media se utilizó la ecuación logarítmica hasta 100 m de altura con una velocidad de fricción de  $u_* = 0,276$  m.s<sup>-1</sup>, un parámetro de rugosidad de  $z_0 = 0,228$  m y  $k_v = 0,4$  es la constante de “Von-Kármán”. Por encima de los 100 m de altura, se utiliza la función potencial del perfil de viento con un coeficiente de potencia de  $n = 4,6$ . A continuación se muestran las ecuaciones del perfil de viento medio:

$$\bar{u} = \begin{cases} - \left[ \frac{u_*}{k_v} \ln \left( \frac{100}{z_0} \right) \right] \left( \frac{z}{100} \right)^{\frac{1}{n}}, & z > 100 \text{ m} \\ - \frac{u_*}{k_v} \ln \left( \frac{z}{z_0} \right) & 10z_0 < z < 100 \text{ m} \\ - \frac{u_*}{k_v} \ln(10) \left( \frac{z}{10z_0} \right) & z < 10z_0 \end{cases} \quad (39)$$

$$(40)$$

En la Figura 2 (a) se observa el perfil de velocidad media, en (b) la función de distribución acumulada de Weibull y en (c) la función de densidad de probabilidad de Weibull. Para generar las fluctuaciones al borde oriental se utilizaron perfiles de fluctuación en las tres componentes del campo de velocidades adimensionalizados por el cuadrado de la velocidad de fricción siguiendo las experiencias de medición en túnel de viento de [Gong & Ibbetson \(1989\)](#). A estos perfiles medios de fluctuación se le adicionaron fluctuaciones aleatorias de media nula y varianza unitaria como mostraron [Aguirre \(2005\)](#); [Aguirre & Brizuela \(2008\)](#).

Se adoptaron condiciones “Neumann” para el borde occidental y “radiativas” con relajación al estado inicial en los bordes norte y sur, utilizando una ecuación de onda para evitar reflexiones hacia el interior del dominio de la simulación ([Durrán & Klemp, 1983](#)).

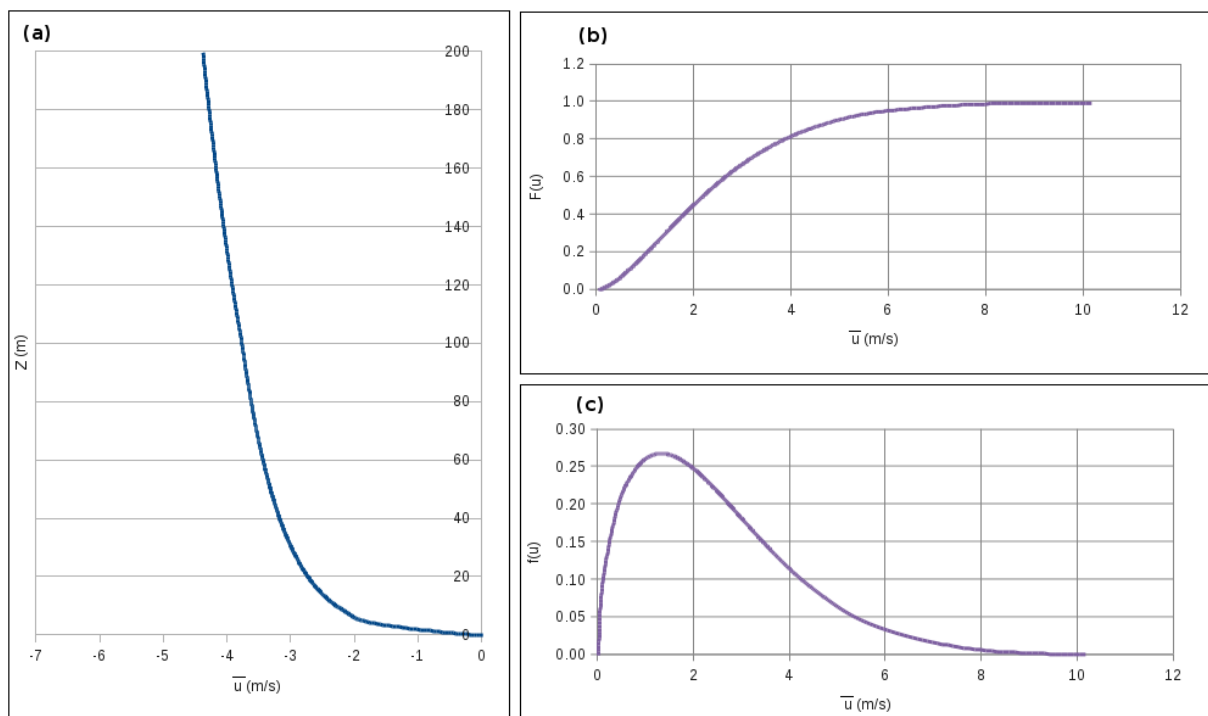


Figura 2: (a) Perfil de la velocidad media del viento sobre el borde oriental, (b) distribución acumulada y (c) función de densidad de probabilidad de Weibull utilizadas para hacer variar el perfil de velocidad media del viento con el transcurso del tiempo de simulación.

### 3. CASO DE ESTUDIO

#### 3.1. Descripción de la zona de estudio

En Lastenia, al noroeste de la ciudad de San Miguel de Tucumán, ha funcionado durante 24 años una planta de fundición de metales. La misma se encuentra en una zona residencial plana (430  $msnm$ ) y estuvo funcionando hasta su cierre, a mediados de la década de los '90. Esta planta abastecía equipos y maquinaria a las numerosas refinerías de azúcar ya que este cultivo es el más importante en la zona. La planta de fundición consta de dos chimeneas de concreto de una altura de 45  $m$  y 3  $m$  de diámetro en su boca superior. La temperatura de salida de los gases era de  $T_g = 220^\circ C$ . Además de estos gases de combustión propios de la fundición, esta planta emitía partículas de diferentes metales que, en su mayoría, eran perjudiciales para la población por su toxicidad al inhalarlos por vías respiratorias o asimilarlos indirectamente a través de los alimentos vegetales que se cultivan en la zona (citrus y hortalizas como zanahoria, lechuga, perejil y tomate). Según [Fernandez-Turiel et al. \(2001\)](#), se han encontrado concentraciones en niveles peligrosos de los siguientes metales: Ag, Ba, Be, Cd, Ce, Co, Cr, Cs, Cu, Dy, Er, Ga, Gd, Ge, La, Li, Mo, Nb, Nd, Ni, Pb, Pr, Rb, Sb, Sm, Sn, Sr, Tb, Th, Tl, U, V, W, Y, Yb, Zn y Zr. Estas mediciones fueron realizadas en laboratorio con equipamiento muy específico a partir de muestras tomadas in-situ en áreas cuadradas de 100  $m \times 100 m$ , tanto en suelo como en plantas, para un sector cercano a la planta de fundición. La ubicación de Lastenia y la zona de estudio se muestran en la Figura 3.

El área de estudio tiene forma rectangular, de 3,5  $Km$  en dirección Norte-Sur y 2,4  $Km$  en dirección Este-Oeste. Los vientos prevalentes en el área son de dirección NORTE y SUROESTE. Sin embargo, la dirección de viento más perjudicial para la zona residencial es la del sector ESTE. La Figura 4 muestra una imagen satelital donde se puede apreciar la planta con dos chi-

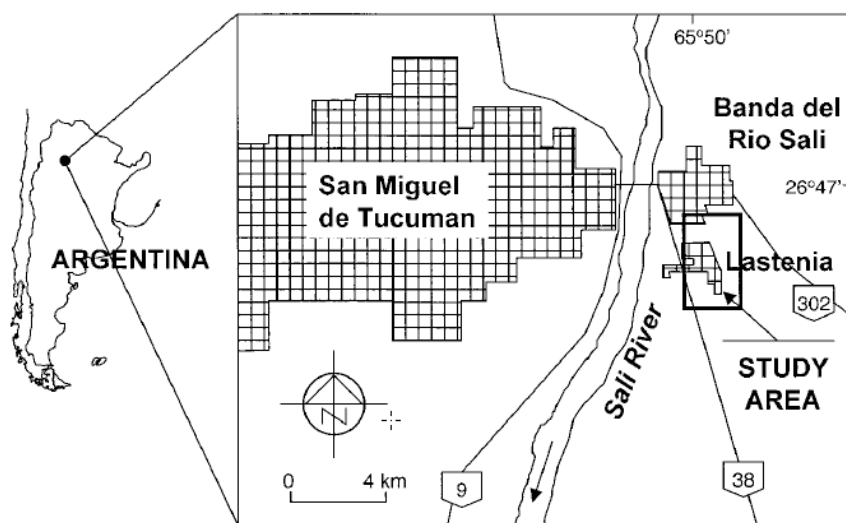


Figura 3: Área de estudio. (Tomado de [Fernandez-Turiel et al. \(2001\)](#))

meneas ubicadas al borde oriental de la zona urbana. La Figura 5 presenta la rosa de vientos con sus valores medios por dirección a 10 m obtenidos de los registros de la estación meteorológica de aeropuerto de San Miguel de Tucumán. En esta área, [Fernandez-Turiel et al. \(2001\)](#) han



Figura 4: Ubicación de la planta de fundición y zona residencial.

realizado el muestreo y como resultado de las mediciones y las determinaciones en laboratorio, han publicado mapas de concentración de algunos metales tanto en suelo como en plantas. En este trabajo se simula la dispersión atmosférica de uno de estos metales, el Cobre ( $Cu$ ), considerando una distribución de densidad de probabilidad de “Weibull” que representa la curva de duración de velocidad para el caso de viento del ESTE.

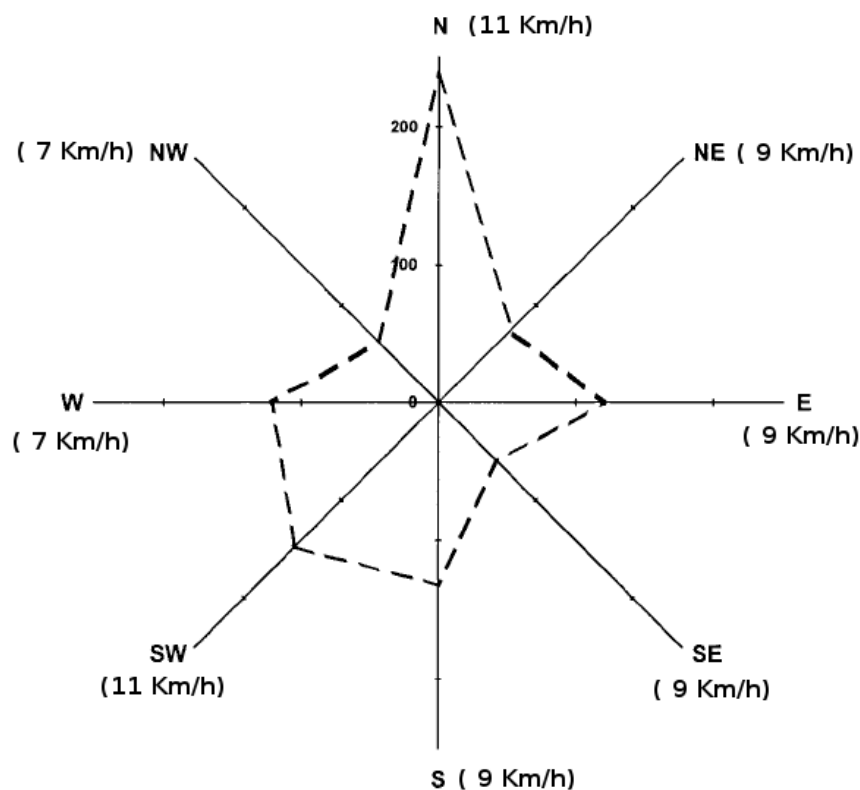


Figura 5: Rosa de vientos y valores medios por dirección. (Fuente SMN 1971-1976).

### 3.2. Descripción de la simulación

Las simulaciones han sido realizadas utilizando una computadora personal que consta de un procesador doble núcleo Intel Pentium y 4 GByte de RAM. La grilla de cálculo utilizada para la simulación está compuesta de celdas prismáticas regulares de altura variable. Las mismas tienen una dimensión horizontal de  $100\text{ m} \times 100\text{ m}$  (de iguales dimensiones a las utilizadas para el muestreo in-situ de [Fernandez-Turiel et al. \(2001\)](#)) y la altura va desde  $3\text{ m}$ , para las celdas adyacentes al terreno, hasta  $42\text{ m}$  para las que se encuentran al tope del dominio de cálculo. La ley de variación de la altura de las celdas sigue una función tangente hiperbólica. De esta forma, la grilla se compone de 37 celdas en la dirección ESTE-OESTE, 54 celdas en dirección NORTE-SUR y 52 celdas en la dirección vertical. La altura del dominio útil se ha fijado en  $1000\text{ m}$  por encima del cual se ha dispuesto una capa suplementaria de  $210\text{ m}$  (5 celdas) para eliminar las ondas de presión utilizando un amortiguador de tipo “Rayleigh”. La Figura 6 muestra la disposición vertical (a) y horizontal (b) de un sector de la grilla para SGE. Se aprecia la ubicación de las chimeneas de la planta de fundición. Las mismas están en las siguientes coordenadas:  $X_1 = 1625\text{ m}$ ;  $Y_1 = 2295\text{ m}$  y  $X_2 = 1585\text{ m}$ ;  $Y_2 = 2225\text{ m}$ .

Se utilizó un paso de tiempo  $\Delta t_G = 0,05\text{ s}$  debido a las restricciones impuestas por la escala de tiempo de la aceleración de las partículas de cobre  $\tau_s = 0,0503\text{ s}$  calculada utilizando la velocidad terminal de caída libre de la misma.



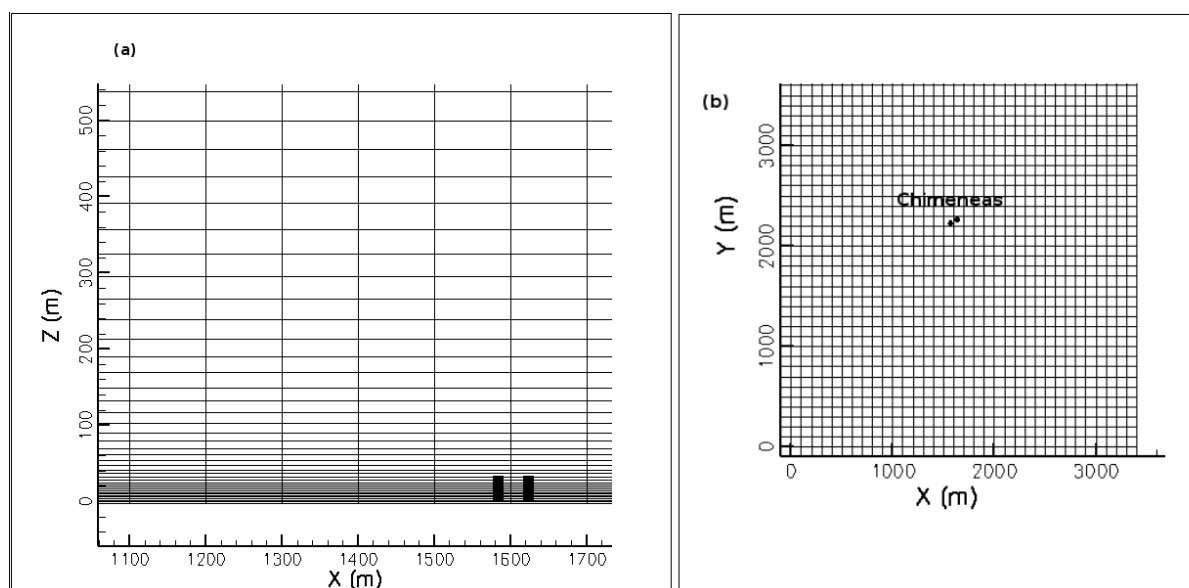


Figura 6: Configuración vertical (a) y horizontal (b) de la grilla para SGE. Se observa la ubicación de las dos chimeneas de la planta de fundición en Lastenia.

### 3.3. Datos para el modelo de suelo

En ARPS pueden utilizarse datos de las características de la superficie del suelo para ser incluidas como condiciones iniciales. En este trabajo se tuvieron en cuenta las características de la cobertura del terreno para asignar el parámetro de rugosidad del perfil de viento. A partir de la imagen mostrada en la Figura 4 se obtuvieron datos de la cobertura del terreno como el tipo de vegetación en zonas de cultivos, áreas con hierbas y pocos árboles, bosques y zonas residenciales urbanas. Estos tipos de vegetación fueron llevados a categorías según la tipología de *Olson World Ecosystem Classes* (Olson et al., 1985) y a partir de la correspondencia que proponen los autores, se obtuvo el mapa del parámetro de rugosidad del suelo. La zona de estudio no presenta elevaciones ni relieve complejo por lo que el terreno se consideró plano. Sin embargo, en la zona residencial se tuvo en cuenta la altura media de las casas de 5 m y una zona forestal con árboles de 15 m de altura. En la Figura 7 se observa la imagen del parámetro de rugosidad  $Z_0$  y en la Figura 8 la elevación del terreno para tener en cuenta la zona residencial y forestal.

## 4. RESULTADOS

Se comparan cualitativamente las concentraciones de  $C_u$  obtenidas a los 3599,9 s de simulación con las presentadas por Fernandez-Turiel et al. (2001). En la Figura 9 se muestran las plumas de partículas sólidas en ese instante. En la Figura 10 se observan las concentraciones de  $C_u$  a nivel de suelo (en número de partículas por  $m^2$ ) calculadas usando cuadrículas de 100 m x 100 m y las isoclinas de concentración (en mg de  $C_u$  por Kg de suelo) publicadas en Fernandez-Turiel et al. (2001). La Figura 11 compara concentraciones de  $C_u$  a nivel de suelo (en número de partículas por  $m^2$ ) pero éstas se han calculado utilizando cuadrículas de 10 m x 10 m. La Figura 12 muestra las mismas concentraciones que la Figura 11 sobre una imagen satelital con el propósito de observar los sitios afectados.

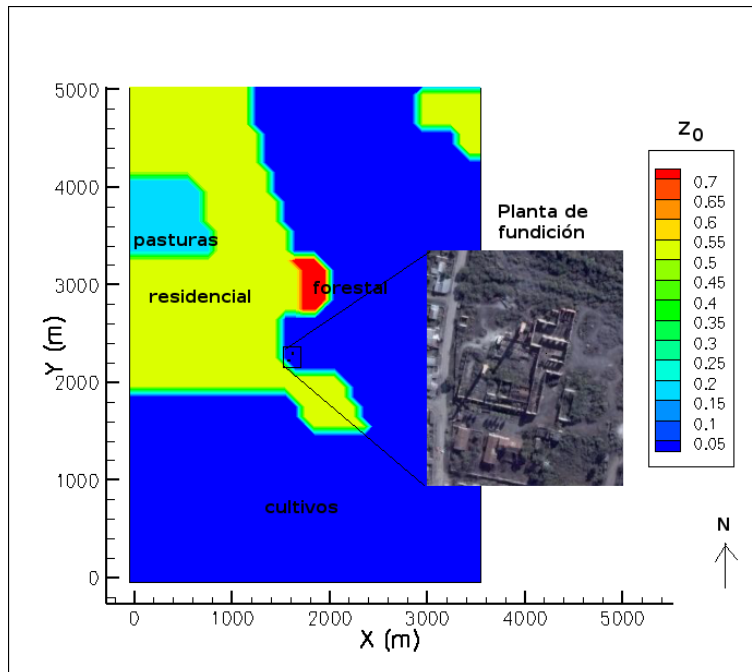


Figura 7: Parámetro de rugosidad del perfil de viento según los tipos de cobertura del terreno y ubicación de la planta de fundición en Lastenia.

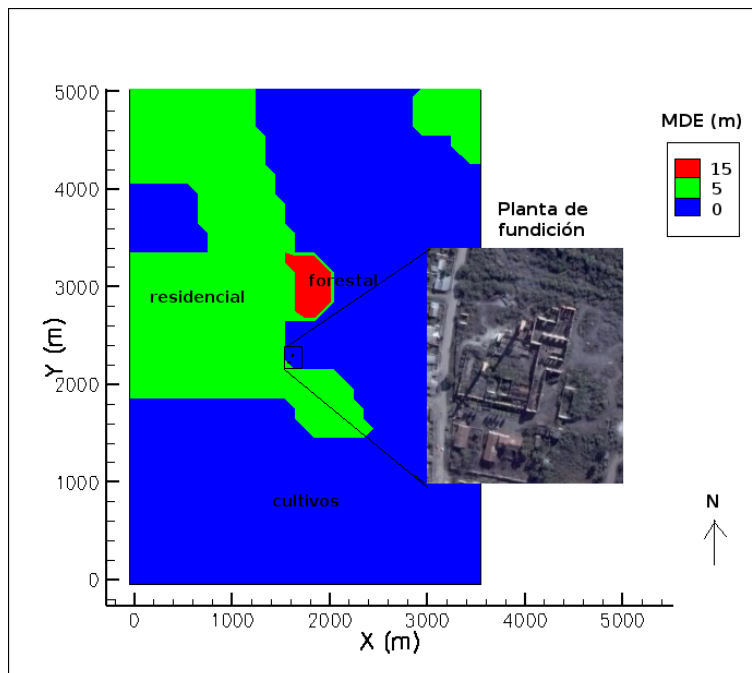


Figura 8: Elevación de terreno considerando la zona forestal y residencial. Se muestra la ubicación de la planta de fundición en Lastenia.

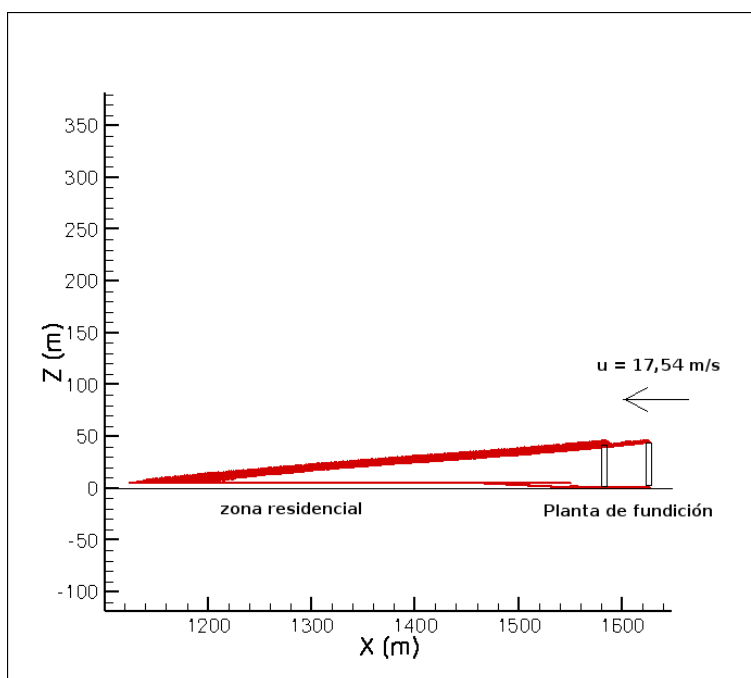


Figura 9: Plumas de partículas de  $C_u$  emitidas por la planta de fundición a  $t = 3599,9$  s de simulación. Se muestra la velocidad del viento medio a la altura de las chimeneas.

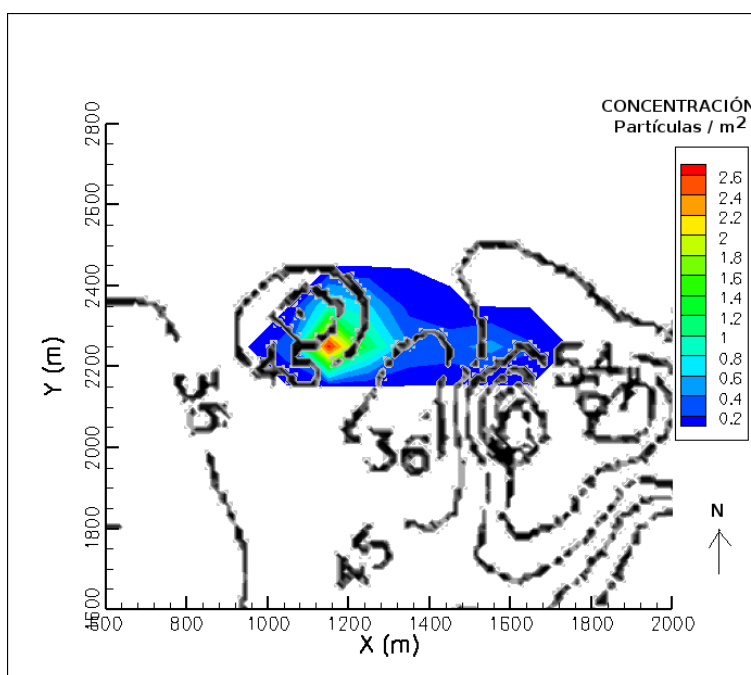


Figura 10: Comparación cualitativa de concentraciones de  $C_u$  a nivel de suelo. En colores, los obtenidos en este trabajo de simulación a  $t = 3599,9$  s calculadas usando cuadrículas de  $100\text{ m} \times 100\text{ m}$ . En líneas, los relevados por [Fernandez-Turiel et al. \(2001\)](#).

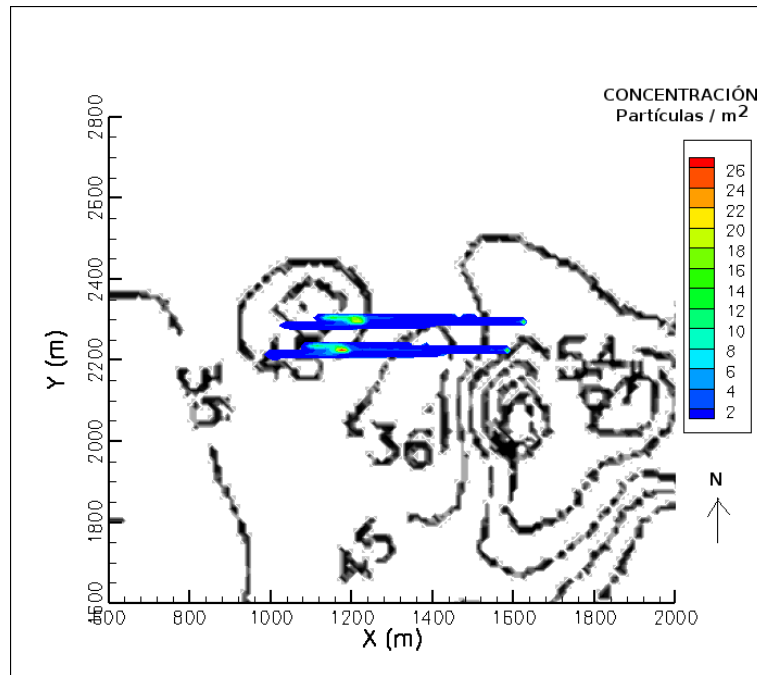


Figura 11: Comparación cualitativa de concentraciones de  $C_u$  a nivel de suelo. En colores, los obtenidos en este trabajo de simulación a  $t = 3599,9 s$  calculadas usando cuadrículas de  $10 m \times 10 m$ . En líneas, los relevados por Fernandez-Turiel et al. (2001).

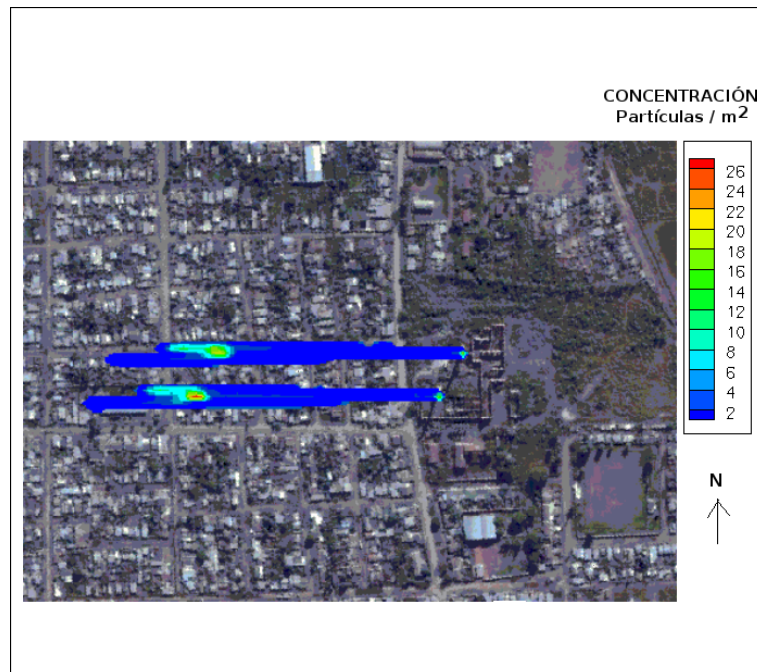


Figura 12: Concentraciones de  $C_u$  a nivel de suelo simuladas por el modelo a  $t = 3599,9 s$  calculadas usando cuadrículas de  $10 m \times 10 m$  sobre una imagen satelital.

## 5. DISCUSIÓN

Observando la Figura 10, se hace notar que las concentraciones simuladas por el modelo son calculadas contando el número de partículas de  $C_u$  que caen en retículas de  $100\text{ m} \times 100\text{ m}$  similares a las muestras que se utilizaron en el trabajo de campo de [Fernandez-Turiel et al. \(2001\)](#). Las isolíneas de concentración del citado trabajo reflejan la contaminación del suelo que ha producido la planta de fundición durante su funcionamiento mientras que, la simulación de este trabajo, sólo considera la contaminación cuando el viento sopla del ESTE. Teniendo en cuenta esta situación, puede observarse que existe una buena coincidencia entre el máximo valor que indica el modelo con la isolínea cerrada de  $45\text{ mg.Kg}^{-1}$  de concentración de  $C_u$  que también muestra un máximo en ese sector. Si observamos la rosa de vientos en la Figura 5, puede verse que los vientos del ESTE tienen una frecuencia del 12 %. Si bien no es la dirección más importante, tiene una alta frecuencia relativa. Se observa en el trabajo de [Fernandez-Turiel et al. \(2001\)](#) que existen otros máximos de concentración más importantes que el mencionado anteriormente, pero ellos están asociados a otras direcciones de viento.

Si en cambio, las concentraciones simuladas por el modelo se calculan tomando retículas de  $10\text{ m} \times 10\text{ m}$ , como las que presenta la Figura 11, se observa que pueden individualizarse las plumas de cada chimenea. El modelo muestra que las plumas de las partículas de  $C_u$  no tienen una dispersión lateral importante. Esto hace que si calculamos las concentraciones utilizando retículas más pequeñas, las mismas serán mucho más elevadas que con retículas más grandes en la zona donde se encuentran las plumas. Es por esta razón que las leyendas de ambas figuras difieren en un factor 10.

Las concentraciones mostradas por [Fernandez-Turiel et al. \(2001\)](#) hacia el OESTE de la ubicación de la planta de fundición, siguen indicando la existencia de partículas de  $C_u$  más allá de las que se muestran en la simulación. Esto puede deberse a que la misma se realizó utilizando un diámetro medio de partículas sólidas de  $d_s = 46,5\ \mu\text{m}$  como si todas ellas fuesen iguales. Seguramente las partículas de  $C_u$  tiene diferentes diámetros y es probable que las partículas más pequeñas hayan recorrido mayor distancia antes de llegar al suelo.

## 6. CONCLUSIONES

Se presenta en este trabajo una descripción teórica del acople entre la Simulación de las Grandes Escalas Turbulentas y un modelo estocástico lagrangiano para obtener las trayectorias de partículas fluidas y sólidas.

Se muestra un método para forzar las condiciones de borde del campo de viento utilizando datos estadísticos y una función de densidad de probabilidad ajustada.

Se logra simular la dispersión de partículas de cobre del orden de decenas de micrón dispersadas por dos chimeneas pertenecientes a una planta de fundición que funcionó durante más de dos décadas en Lastenia, provincia de Tucumán, para el caso de viento del ESTE.

Se calcularon las concentraciones de cobre a nivel de suelo y se compararon con las obtenidas utilizando técnicas de muestreo in-situ y determinaciones en laboratorio de [Fernandez-Turiel et al. \(2001\)](#).

Se observa un buen ajuste cualitativo entre las concentraciones simuladas por el modelo

numérico y las publicadas en la bibliografía para el caso de viento del ESTE a pesar de los supuestos y consideraciones establecidas tanto en el marco teórico, el forzado del campo de viento y las características físicas de las partículas sólidas.

**Reconocimientos:** Este trabajo se ha realizado con el apoyo de los proyectos PICT2008-1417 y PICT2010-2492, ambos de la Agencia Nacional de Promoción Científica (ANPCyT).

## REFERENCIAS

- Aguirre C. A., S. Simoëns and M. Ayrault. Dispersion of solid heavy particles in a homogeneous turbulence. *Air Pollution*, **X**, *Wessex Institute of Technology Press, Southampton, UK*: 591 – 600, 2000.
- Aguirre C. A., S. Simoëns and M. Ayrault. Chemically reactive dispersion into atmospheric boundary layer. *International Workshop on Physical Modeling of Flow and Dispersion Phenomena. Proceeding of PHYSMOD2003*. Prato, Italy, 154–158, 2003.
- Aguirre C. A., Y. Guo and M. Ayrault. Dispersion de particules solides en mouvement de salutation dans un écoulement turbulent. *Journal Comptes Rendus Mécanique*, **332**: 627 – 632, 2004.
- Aguirre C. A. *Dispersión et Mélange Atmosphérique Euléro-lagrangien de Particules Fluides Réactives. Application à des cas simples et complexe. Thèse de doctorat. Université Claude Bernard Lyon 1, France*, **115-2005**, 1–323, 2005.
- Aguirre C. A., A. B. Brizuela, I. Vinkovic and S. Simoëns. A subgrid Lagrangian stochastic model for turbulent passive and reactive scalar dispersion. *International Journal of Heat and Fluid Flow. Editorial: Elsevier Science*. **27 (4)**. ISSN: 0142–727X: 627–635, 2006.
- Aguirre C. A., A. B. Brizuela, I. Vinkovic y S. Simoëns. Modelo acoplado Eulero-Lagrangiano de simulación de la dispersión atmosférica de especies químicamente reactivas en la capa límite. *Serie Mecánica Computacional, Argentina*, **Vol XXV**: 185–205, 2006.
- Aguirre C. A. y A. B. Brizuela. Simulación Numérica de la Dispersión Atmosférica de Gas Pasivo sobre una Colina utilizando un Modelo Acoplado. *Serie Mecánica Computacional, Argentina*, **XXVII (4)**: 217–237, 2008.
- [URL:www.cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/issue/view/229](http://www.cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/issue/view/229)
- Bachelier L. Théorie de la spéculation. *Thèse publiée dans les Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure*, **17, 21**, 1900. Réédité aux Éditions Jacques Gabay, Paris, 1995.
- Deardorff J. W. Stratocumulus-capped mixed layer derived from a three dimensional model. *Boundary-Layer Meteorology*, **18**: 495–527, 1980.
- Durbin P. A. A random flight model in inhomogeneous turbulent dispersion. *Phys. Fluids*. **23 (11)**: 2151–2153, 1980.
- Durbin P. A. Stochastic Differential Equations and Turbulent Dispersion. *Lewis Research Center. NASA.*, **1103**. Cleveland, Ohio: 1–69, 1983.
- Durrán D. R., & J. B. Klemp. The effects of moisture on trapped mountain lee waves. *J. Atmos. Sci.*, **39**: 2490–2506, 1983.
- Fernandez-Turiel J.L., P. Aceñolaza, M. E. Medina, J. F. Llorenz and F. Sardi. Assesment of a smelter impact area using surface soils and plants. *Environmental Geochemistry and Health*, **23**: 65 – 78, 2001.
- Germano M., U. Piomelli, P. Moin and W. H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *J. of Physics Fluids*, **A 3**: 1760–1765, 1991.

- Gicquel L. Y. M., P. Givi, F. A. Jaber and S. B. Pope. Velocity filtered Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent flow. *Physic Fluids*, **14 (3)**: 1196 – 1213, 2002.
- Gong W. and A. Ibbetson. A wind tunnel study of turbulent flow over models hill, *Boundary Layers Meteorology*, **49**: 113–148, 1989.
- Justus C. G. Wind and system performance. *The Franklin Institute Press, Philadelphia, Penn, USA*: 1 – 120, 1978.
- Klemp J. B. and R. B. Wilhelmson. The Simulation of three-dimensional convective storm dynamics. *J. Atmos. Sci.*, **35**: 1070–1096, 1978.
- Kosinski P., A. Kosinska and A. C. Hoffmann. Simulation of Solid Particles Behaviour in a Driven Cavity Flow. *Powder Technology*, 2008.
- Leonard A. Energy Cascade in Large Eddy Simulation of Turbulent Fluid Flow. *Adv. Geophysics*, **18 A**: 237–248, 1974.
- Lilly D. K. A Proposed Modification of the Germano Subgrid-scale Closure Method. *Physic Fluid*, **A 4**: 633 – 635, 1992.
- Mabrouk R., J. Chaouki and C. Guy. Wall surface effects on particle–wall friction factor in upward gas–solid flows. *Powder Technology*, **186**: 80 – 88, 2008.
- Mayer D., J. Reiczigel and F. Rubel. A Lagrangian particle model to predict the airborne spread of foot-and-mouth disease virus. *Atmospheric Environment*, **42**: 466 – 479, 2008.
- Nalpanis P., J. R. C. Hunt and C. F. Barrett. Saltating particles over flat beds. *J. Fluid Mech.*, **251**: 661–685, 1993.
- Olson, J. S., J. A. Watts, and L. J. Allison. Major world ecosystem complexes ranked by carbon in live vegetation: a database. *Carbondioxide Information Center, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, NDP-017*: Tennessee, 1985.
- Pope S. B. Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **26**: 23–36, 1994.
- Proctor F. H. The Terminal Area Simulation System. *Volume I: Theoretical Formulation*. NASA Contractor Report. **CR-4046**: 176 pp, 1987.
- Schumann, U. Subgrid Scale Model For Finite Difference Simulations Of Turbulent Flow In Plane Channels And Annuli. *J. Comp. Phys.* **18**: 376 – 404, 1975.
- Smagorinsky J. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I. The Basic Experiments", *Mon. Weather Rev.*, **91**: 99 – 164, 1963.
- Snyder W. H. and J. L. Lumley. Some measurements of particle velocity autocorrelation functions in a turbulent flow. *J. Fluid Mech.*, **48**: 41 – 71, 1971.
- Sommerfeld M. and N. Huber. Experimental analysis and modelling of particle-wall collisions. *International Journal of Multiphase Flow*, **25**: 1457 – 1489, 1999.
- Sommerfeld M. Analysis of collision effects for turbulent gas–particle flow in a horizontal channel: Part I. Particle transport. *International Journal of Multiphase flow* **29**, 675 – 699, 2003.
- Tanière A., B. Oesterlé, and J. C. Monnier. On the behaviour of solid particles in a horizontal boundary layer with turbulence and saltation. *Exp. in Fluids*, **23**:463–471, 1997.
- Wang Lian-Ping and D. Stock. Sochastic trajectory models for turbulent difussion: Monte Carlo Process versus Markov Chains. *Atmospheric Environment*, **26 - 9**: 1599 – 1607, 1992.
- Vinkovic I., C. A. Aguirre, M. Ayrault and S. Simoëns. Large-eddy simulation of the dispersion of solid particles in a turbulent boundary layer- *Boundary-Layer Meteorology*, **121**: 283–311, 2006.
- Xue M., K. Droegemeier and V. Wong. The Advanced Regional Prediction System (ARPS). A Multi-Scale Nonhydrostatic Atmospheric Simulation and Prediction Model. Part I: Model Dynamics and Verificatio. *Meteorology Atmospheric Physics*, **75**: 161–193, 2000.