

## SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE GAS PASIVO SOBRE UNA COLINA UTILIZANDO UN MODELO ACOPLADO

César A. Aguirre<sup>a,b</sup> y Armando B. Brizuela<sup>b,c</sup>

<sup>a</sup>*Cátedra de Mecánica de Fluidos, FRP-UTN, Almafuerde 1033,  
3100 Paraná, Entre Ríos, Argentina, [cesar.aguirre.a@gmail.com](mailto:cesar.aguirre.a@gmail.com),  
<http://www.frp.utn.edu.ar>*

<sup>b</sup>*Centro de Investigaciones Científicas, CICyTTP-CONICET,  
Materi y España, s/n, Diamante, Entre Ríos, Argentina,  
<http://www.cicytpp.org.ar>*

<sup>c</sup>*Cátedra de Climatología Agrícola, FCA- UNER, Ruta 11 Km 10 Oro verde,  
CC N°24, 3100 Paraná, Entre Ríos, Argentina, [armando.brizuela@gmail.com](mailto:armando.brizuela@gmail.com)  
<http://www.cicytpp.org.ar/climatologiafca>*

**Palabras Clave:** Dispersión atmosférica, Simulación de las Grandes Escalas, Modelos Estocásticos, Colina.

**Resumen.** En los últimos años se ha tornado de fundamental importancia la realización de estudios de impacto ambiental al momento de presentar proyectos de ingeniería vial o instalación de usinas industriales. Estos estudios permiten realizar una evaluación del proyecto desde el punto de vista de inocuidad al medio en el cual se inserta la obra y sustentabilidad en el caso de explotación de los recursos naturales. Uno de los efectos perjudiciales es el de la polución atmosférica por emanación de gases producto de los procesos industriales. Existen actualmente herramientas de simulación que permiten predecir con cierto grado de precisión sus efectos nocivos. La Simulación de las Grandes Escalas plantea la resolución de las ecuaciones de *Navier-Stokes* hasta un cierto tamaño de las escalas de la turbulencia debido a las limitaciones actuales de la informática. Mientras las grandes escalas atmosféricas son las responsables del transporte de grandes cantidades de materia, la simulación de las pequeñas escalas es fundamental para obtener la concentración y dispersión de los agentes de polución. El acople entre un código de Simulación de Grandes Escalas y un modelo Estocástico Lagrangiano para las pequeñas ha sido postulado en trabajos anteriores bajo ciertas hipótesis acerca de las características de la turbulencia. En este trabajo se plantean nuevas hipótesis, aumentando el grado de complejidad del modelo anterior, se muestran los resultados de la simulación numérica y se comparan los mismos con mediciones de dispersión de gases emitidas a barlovento de una colina de suave pendiente realizadas en túnel de viento.

## 1 INTRODUCCIÓN

Desde hace varias décadas, la reducción de la polución atmosférica a escala mundial ha tomado importancia primordial para organismos Nacionales e Internacionales dedicados a la vigilancia del ambiente. Una de las herramientas que se está utilizando para evaluar los efectos nocivos de instalaciones industriales a escala local es la simulación de episodios de polución atmosférica bajo condiciones medias y extremas de funcionamiento. En tal sentido, los avances en informática han llevado a implementar códigos de cálculo basados en la resolución de las ecuaciones de la mecánica de fluidos en conjunción con modelos de reacción química para obtener los valores de concentración y distribución espacial de especies químicas dispersadas en la atmósfera bajo distintas condiciones meteorológicas y de producción de las plantas industriales. Sin embargo, existen limitaciones de tipo informático debido a la gran cantidad de cálculos necesarios para resolver flujos turbulentos de elevado *número de Reynolds* ( $Re$ ) como los que habitualmente se presentan en la capa límite atmosférica. La *Simulación de las Grandes Escalas* (*SGE*) permite resolver las ecuaciones de *Navier-Stokes* (*N-S*) hasta una determinada escala de la turbulencia que debería encontrarse en el rango inercial de la cascada de energía de *Kolmogorov*. Esta técnica de discretización espacio-temporal de los fenómenos de transporte turbulento ha sido desarrollada a partir de los primeros trabajos de [Deardorff \(1970\)](#), [Deardorff \(1973\)](#) y [Schumann \(1975\)](#). La resolución de las grandes escalas permite obtener una descripción tridimensional del campo de viento con una resolución espacial limitada por el tamaño de la grilla en que ha sido subdividido el dominio de cálculo. Si bien en determinadas aplicaciones de meso y macro-escala esta limitante no presenta mayores dificultades, en situaciones en las que interesa obtener una descripción detallada de los fenómenos de difusión molecular y reacción química en flujo turbulento de gran  $Re$ , como por ejemplo en la zona próxima a las fuentes de emisión de gases, adquiere importancia primordial el trabajar con dimensiones de grilla reducidas. Una opción para resolver este problema es considerar partículas fluidas portadoras de especies químicas reactivas que son transportadas en el seno del fluido. Este enfoque requiere concebir un modelo que permita obtener las trayectorias de estas partículas calculando en cada paso de tiempo de la simulación la posición y velocidad de las mismas. Cada una de estas partículas puede 'transportar' una o más especies químicas en concentraciones variables. Estos modelos son conocidos como *Modelos Lagrangianos* (*ML*). Cuando la dinámica del fluido es descrita por un *SGE*, las partículas son transportadas siguiendo el movimiento de las grandes escalas de la turbulencia. Algunos autores ([Pope, 1985](#); [Haworth and Pope, 1986](#); [Pope, 1994](#); [Gicquel and Givi, 2002](#); [Aguirre, 2005](#); [Aguirre et al. 2006a, b](#); [Vinkovic et al. 2006a, b](#)) adicionan al movimiento inducido por *SGE* una componente de movimiento aleatorio que simule el comportamiento de las pequeñas escalas acorde a la teoría *browniana*. Los modelos basados en esta técnica reciben el nombre de *Modelos Estocásticos Lagrangianos* (*MEL*). A continuación serán desarrolladas las hipótesis sobre las cuales se basa el acople de estos modelos con la *SGE*. Por último se muestran resultados de la simulación de la experiencia de medición de concentración de  $CO_2$  emitida desde una fuente a barlovento de una colina de suave pendiente realizadas en túnel de viento por [Gong \(1991\)](#).

## 2 MODELO ESTOCÁSTICO LAGRANGIANO

El *MEL* permite obtener las trayectorias de partículas inmersas en un fluido haciendo una analogía con la hipótesis del modelo de desplazamiento microscópico de una molécula siguiendo la teoría del movimiento *browniano*. [Wiener \(1923\)](#) ideó un proceso estocástico para representar la posición de una partícula sometida a este tipo de movimiento. Dos fuerzas caracterizan el efecto del fluido sobre la partícula:

- La fuerza de viscosidad del fluido  $-m\mu U_i$ , donde  $m$  representa la masa de la partícula,  $\mu$  el coeficiente de rozamiento y  $U_i$  es el vector velocidad relativa entre la partícula y el fluido.
- La fuerza aleatoria  $F(t)$  que representa los efectos del impacto incesante de moléculas del fluido sobre la partícula. Esta fuerza es supuesta independiente de la posición y velocidad relativa de la misma y es llamada *Fuerza de Langevin*.

Si no existe otra fuerza exterior, la partícula está en movimiento “libre”. La ecuación que describe este movimiento está dada por la ley de *Newton*:

$$m \frac{dU_i}{dt} = -m\mu U_i + F(t) \quad (1)$$

La fuerza de rozamiento y la fuerza aleatoria son consecuencias de un mismo fenómeno físico, las colisiones de la partícula con las moléculas del fluido. La mayoría de los modelos que representan este fenómeno postulan la hipótesis de que la posición de la partícula evoluciona de forma *Markoviana*, es decir que la posición futura depende sólo de su estado precedente sin importar sus estados anteriores. Esto significa que las aceleraciones a la que se somete la partícula son mucho más importantes que los efectos de inercia. [Monin and Yaglom \(1975\)](#) muestran que este efecto es más pronunciado cuanto mayor sea el número de *Reynolds*.

## 2.1 La ecuación de Langevin

La forma general de la ecuación (1) se conoce como la *Ecuación de Langevin* ([Langevin, 1908](#)):

$$\frac{dU_i}{dt} = h_{(U_i,t)} + q_{(U_i,t)}\eta(t) \quad (2)$$

donde  $h_{(U_i,t)}$  representa el término determinista de la velocidad de la partícula fluida y  $q_{(U_i,t)}\eta(t)$  el término aleatorio asociado a las propiedades estadísticas de la turbulencia.  $\eta(t)$  es la variable aleatoria propiamente dicha cuyo valor medio es nulo y posee un desvío estándar igual a la unidad.

## 2.2 La ecuación de Fokker-Planck

Una forma de estudiar los procesos estocásticos es a través de la función de distribución de probabilidad (*ddP*). [Pope \(1985\)](#) describe los métodos *ddP* para tener en cuenta las características de la turbulencia en flujos que transportan especies químicas reactivas y problemas asociados a la combustión. La ecuación de *Fokker-Planck* permite obtener los coeficientes del sistema de ecuaciones lagrangiano (2) según el tipo de turbulencia que rige el movimiento del fluido:

- Turbulencia homogénea isotrópica estacionaria y no-estacionaria.
- Turbulencia inhomogénea isotrópica no-estacionaria.
- Turbulencia inhomogénea anisotrópica no-estacionaria.

Este procedimiento es válido siempre y cuando la evolución de la velocidad pueda ser caracterizada como un proceso *Markoviano*.

Si se designa con  $S_{(t)}$  a la cupla posición-velocidad de una partícula en el seno de un fluido turbulento de manera tal que  $S_{(t)} = [X_{i(t)}, U_{i(t)}]$ . La probabilidad de encontrar una

partícula en el estado  $S_{(t)}$  al instante  $t$  sabiendo que ella estaba en el estado  $S_{(t_0)}$  al instante  $t_0$ , puede obtenerse si se resuelve la ecuación de evolución de la  $ddP$  o *ecuación de Fokker-Planck* :

$$\frac{\partial P_{(S_{(t)},t)}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial s_i} \left[ h_{i(S_{(t)},t)} P \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial s_i \partial s_j} \left[ q_{ik(S_{(t)},t)} q_{jk(S_{(t)},t)} P \right] \quad (3)$$

que está asociada al sistema de ecuaciones *lagrangiano* siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} (S_{(t)}) = h_{i(S_{(t)},t)} + q_{ij(S_{(t)},t)} \eta_j(t) \\ \overline{\eta_i(t') \eta_j(t'')} = \delta_{ij} \delta_{(t'-t'')} \end{array} \right. \quad (4)$$

La última de las ecuaciones (4) indica que la variable aleatoria no posee correlación ni en el tiempo ni en el espacio, es decir, se supone un proceso de *Markov*.

Suponiendo que para la evolución de la velocidad en la ecuación (4) se propone el término determinista de la forma  $\alpha_{ij} U_j$  donde  $\alpha_{ij}$  es un coeficiente tensorial que tiene en cuenta las fluctuaciones de velocidad en las tres dimensiones, la ecuación de *Langevin* puede escribirse de la siguiente forma:

$$dU_i = (\alpha_{ij} U_j) dt + q_{ij} \eta_j(t) dt \quad (5)$$

que está asociada a la ecuación de *Fokker Planck*:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial u_i} \left[ (\alpha_{ij} u_j) P \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} \left[ q_{ik} q_{jk} P \right] \quad (6)$$

La ecuación de evolución de los momentos de orden  $n$  del campo de velocidades nos brinda la información estadística necesaria para acoplar las grandes y pequeñas escalas turbulentas. La misma se obtiene multiplicando la ecuación (6) por  $u_i^n$  e integrando:

$$\overline{U_i^n} = \int_{R^3} u_i^n P du_i \quad (7)$$

$$\frac{d\overline{U_i^n}}{dt} = \alpha_{ij} n \overline{U_j^n} + \frac{q_{ik} q_{jk}}{2} n(n-1) \overline{U_j^{n-2}} \quad (8)$$

Para  $n = 1$  se obtiene la ecuación de evolución de la velocidad media:

$$\frac{d\overline{U_i}}{dt} = \alpha_{ij} \overline{U_j} \quad (9)$$

Para  $n = 2$ , la evolución de la media cuadrática:

$$\frac{d\overline{U_i^2}}{dt} = 2\alpha_{ij} \overline{U_j^2} + q_{ij}^2 \quad (10)$$

Para el desarrollo de las hipótesis se considerará la descomposición del campo de velocidades en un valor medio y su fluctuación (descomposición *Reynolds*):

$$U_i = \overline{U}_i + u'_i \Rightarrow \begin{cases} U &= \overline{U} + u' \\ V &= \overline{V} + v' \\ W &= \overline{W} + w' \end{cases} \quad (11)$$

### 2.3 Caso de turbulencia homogénea isotrópica estacionaria bidimensional

El caso más simple es el de turbulencia homogénea isotrópica estacionaria bidimensional con fluctuaciones sólo en la componente vertical de la velocidad:

$$\begin{cases} U(x,y,z,t) = \overline{U} & , \text{es constante.} \\ V(x,y,z,t) = 0 & , \text{es nula.} \\ W(x,y,z,t) = w'_{(x,y,z)} & , \text{es estacionaria.} \end{cases}$$

Para esta última condición de flujo utilizando las relaciones (9) y (10) se obtiene:

$$\begin{cases} \overline{W} = 0 \\ \frac{d\overline{W^2}}{dt} = 2\alpha_w \overline{W^2} + q_w^2 = 0 \end{cases} \quad (12)$$

Si en la expresión (12) se propone  $\alpha_w = -\frac{1}{T_L}$  entonces  $q_w = \sigma_w \sqrt{\frac{2}{T_L}}$  que responde al modelo clásico de *Langevin* obtenido por *Durbin (1980)* basándose en la aproximación discreta de *Taylor (1921)*. En este modelo  $T_L$  es el tiempo característico de la turbulencia y se obtiene integrando la función de correlación de velocidades  $\sigma_w^2 = \overline{w'w'} = \overline{W^2}$ . De esta forma, la ecuación diferencial que rige la posición y velocidad según (5) es:

$$\begin{cases} dx = U dt \\ dz = W dt \\ dW = -\frac{W}{T_L} dt + \sigma_w \sqrt{\frac{2}{T_L}} \eta_j(t) dt \end{cases} \quad (13)$$

## 3 ACOUPLE ENTRE SIMULACIÓN DE GRANDES ESCALAS Y MODELO ESTOCÁSTICO LAGRANGIANO

La *SGE* permite obtener una descripción de la dinámica de las grandes escalas de movimiento en el seno de la vena fluida a partir de la resolución de las ecuaciones de la mecánica de fluidos. Estas escalas están ubicadas en el rango inercial del espectro de la cascada de energía de *Kolmogorov* y están asociadas a los movimientos de grandes torbellinos que portan la mayor parte de la energía. Sin embargo, para simular procesos tales como la difusión, dispersión, reacciones químicas, mezclas, es necesario además una descripción del comportamiento de las pequeñas escalas de movimiento, que reciben la energía proveniente de las grandes, para realizar estos procesos. El *MEL* aplicado en el seno de las celdas de una malla de cálculo de *SGE* permite simular las trayectorias de partículas fluidas en su interior siguiendo las pequeñas escalas de movimiento.

Para acoplar el *SGE* con el *MEL*, es necesario considerar que en *SGE* el cálculo de las ecuaciones de la mecánica de fluidos se realiza en cada celda que representa el tamaño

mínimo de subdivisión del dominio espacial considerado para la simulación numérica, obteniéndose un solo valor de cada magnitud a calcular para cada una de estas celdas. En general, este tamaño está condicionado por el  $Re$  característico de la turbulencia por un lado y la potencia de cálculo del sistema informático por el otro. Los fenómenos de micro-escala se producen por debajo de la resolución del tamaño de la celda de cálculo y se denominan *fenómenos de submalla*. El problema que se plantea es el de obtener una descripción a nivel de *submalla* de estos procesos de micro-escala que sea coherente con el movimiento de las grandes escalas calculadas por *SGE*. Uno de los factores más importantes es el del *balance de energía* entre estas dos escalas de movimiento. La teoría de la cascada de energía de *Kolmogorov* afirma que 'en promedio' la energía se transmite desde las escalas más grandes hacia las más pequeñas y los procesos de mezcla, difusión, dispersión, reacción química, que éstas son capaces de fomentar están ligados a esta transferencia de energía. Es necesario considerar una forma de conexión o acople entre los resultados obtenidos por *SGE* para la malla de cálculo y el *MEL* que se propone implementar con el fin de representar los *fenómenos de submalla*. Esto se logra relacionando los coeficientes del *MEL* con la energía cinética turbulenta calculada a partir de *SGE* en el seno de cada celda de cálculo y para cada paso de tiempo. Se propone un cálculo dinámico de estos coeficiente a partir de los resultados de *SGE*. De esta forma es posible considerar los cambios bruscos de circulación en cada instante producidos por cizallamiento entre torbellinos y con superficies sólidas, recirculación, etc. Los modelos que son planteados en el cálculo de dichos coeficientes responden a las hipótesis que se postulan acerca de las características de la turbulencia.

### 3.1 Descomposición del campo de velocidades

En el desarrollo correspondiente a la descripción del *MEL*, se consideró la descomposición *Reynolds* para el campo de velocidades (11). La partícula fluida se desplaza por el dominio espacial siguiendo el valor medio y la fluctuación. Para el caso de *submalla* será necesario restringirse al ámbito de una celda de cálculo en un *SGE*. La partícula fluida se desplaza por el interior de esa celda siguiendo la evolución de las grandes escalas y 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 es ahora postulada como un valor calculado por *SGE* ( $u_i^\oplus$ ) (que resulta de aplicar una operación de "filtro pasa bajo") y una fluctuación que será simulada por el *MEL* ( $u_i^\ominus$ ):

$$\left\{ \begin{array}{l} U_i = u_i^\oplus + u_i^\ominus \\ u_i^\oplus = \int_{R^3} U_i(\vec{x}', t) G_{(\vec{x}' - \vec{x})} d\vec{x}' \end{array} \right. \quad (14)$$

De igual manera, la posición de la partícula fluida es descompuesta en  $X_i = x_i + x'_i$  donde  $\vec{x}$  es el vector posición del centro de la celda ( $m$ ) y  $\vec{x}'$  es el vector posición relativa de la partícula a dicho centro (Figura 1). Además  $G_{(\vec{x}' - \vec{x})}$  es el *operador de convolución o función de filtro* que satisface la condición de normalización:  $\int_{R^3} G_{(\vec{x}' - \vec{x})} d\vec{x}' = 1$

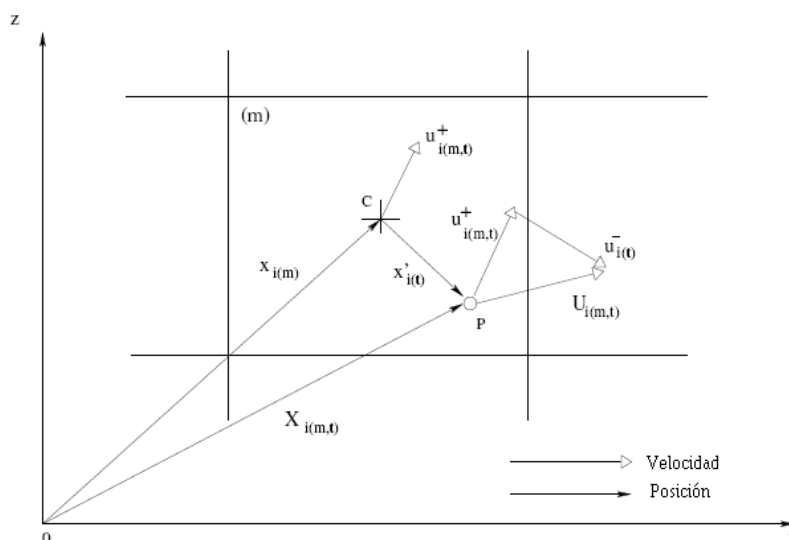


Figura 1. Descomposición de la velocidad y posición correspondiente a una partícula fluida.

Como el *SGE* permite calcular  $u^{\oplus}$  en cada celda de la malla y para cada paso de tiempo, será necesario entonces que el *MEL* simule el valor  $u^{\ominus}$  para predecir la posición de la partícula fluida.

### 3.2 La Función de Densidad de probabilidad Filtrada (*FDF*)

En la sección 2, los coeficientes del *MEL* se obtienen a partir de la relación entre la *ddP* (3) asociada al sistema de ecuaciones posición-velocidad de la partícula fluida (4). La ecuación (3) involucra el dominio entero de cálculo y está condicionada a los valores iniciales de la cupla posición-velocidad. Sin embargo, es necesario restringir la *ddP* al tamaño de una celda de cálculo ya que lo que se pretende es encontrar un sistema de ecuaciones que describa las variables de estado *lagrangiano* (posición-velocidad) en el seno de dicha celda para obtener las trayectorias que tendrán las partículas fluidas en su interior, simulando la *turbulencia de submalla*. Esto es equivalente a encontrar una expresión para la *ddP* local ( $P_L$ ). Un segundo condicionante, derivado del que se acaba de exponer, es que la *ddP* debe estar condicionada a los valores iniciales de posición y velocidad que posean las partículas fluidas al ingresar a la celda de cálculo en vez de hacerlo al iniciar su recorrido en el dominio.

Para lograr expresar la *ddP* local es necesario filtrar la ecuación (3) de la misma forma que se ha realizado para la descomposición del campo de velocidades, obteniendo así la *Función de densidad de Probabilidad Filtrada (FDF)*. Esta función ha sido propuesta originalmente por Gao and O'Brien (1993) y posteriormente utilizada por Colucci et al. (1998). Estos últimos autores han desarrollado la ecuación de transporte de la *FDF* a densidad constante para un flujo reactivo en tanto que Jaber et al. (1999) han aplicado esta técnica en la simulación de una flama reactiva de especies no pre-mezcladas utilizando una aproximación *SGE*. La *FDF* tiene en cuenta los fenómenos a escalas de *submalla* descriptos con los *MEL* y ha sido validada por Cha and Trouillet (2003) con resultados de Simulaciones Numéricas Directas (*SND*) realizadas por Boersma (1999). Gicquel and Givi (2002) han mostrado la utilización de la *FDF* aplicada al campo de velocidades de *submalla*, llamando a esta función en particular: *Función de Densidad Filtrada del campo de Velocidad (FDFV)*.

### 3.2.1 La Función de Densidad Filtrada del Campo de Velocidad (FDFV)

La Función de densidad de probabilidad del campo de velocidad restringida al seno de una celda de cálculo ( $m$ ) es una función local ( $P_L$ ) obtenida realizando una operación de filtro espacial a la  $ddP$  de velocidad. Esta función es llamada *Función de Densidad Filtrada del campo de Velocidad (FDFV)* y ha sido propuesta por [Gicquel and Givi \(2002\)](#):

$$P_L(\vec{v}; \vec{x}, t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \vartheta[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G_{(\vec{x}' - \vec{x})} d\vec{x}' \quad (15)$$

donde  $\vec{v}$  es un valor particular del campo de velocidad  $\vec{u}(\vec{x}, t)$ .  $\vartheta[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}, t)]$  es la  $ddP$  refinada según la definió [Pope \(1985\)](#):

$$\vartheta[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}, t)] = \delta[\vec{v} - \vec{u}(\vec{x}, t)] \equiv \prod_{i=1}^3 \delta[v_i - u_i(\vec{x}, t)] \quad (16)$$

Como  $\vec{v}$  es un valor particular del campo de velocidad, entonces esta función representa una función de probabilidad condicionada. La *FDFV* depende de la posición de la malla ( $m$ ) ya que la integral (15) es una operación de convolución. Además,  $P_L$  posee todas las propiedades de una función de densidad de probabilidad.

Puede definirse el valor condicionado filtrado de una función de velocidad como por ejemplo la derivada temporal local:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i(\vec{x}, t)}{\partial t} &\equiv Q(\vec{x}, t) \\ \left( Q(\vec{x}, t) \Big|_{\vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{v}} \right)^\oplus &\equiv \left( Q \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus \\ \left( Q \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus P_L(\vec{v}; \vec{x}, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\vec{x}', t) \vartheta[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G_{(\vec{x}' - \vec{x})} d\vec{x}' \end{aligned} \quad (17)$$

$\left( Q \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus$  donde es el valor filtrado de la función  $Q$  condicionada por un valor particular  $\vec{v}$  del campo de velocidades.

### 3.2.2 La ecuación de transporte de la FDFV

Si se considera la derivada temporal de la *FDFV* (15) se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_L(\vec{v}; \vec{x}, t)}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} \left( \vartheta[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] \right) G_{(\vec{x}' - \vec{x})} d\vec{x}' \\ \frac{\partial P_L(\vec{v}; \vec{x}, t)}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\frac{\partial \vartheta[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]}{\partial u_i}}_{(a)} \frac{\partial u_i(\vec{x}', t)}{\partial t} G_{(\vec{x}' - \vec{x})} d\vec{x}' \end{aligned} \quad (18)$$



El término (a) puede escribirse según (16) como:

$$\frac{\partial \vartheta [\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]}{\partial u_i} = \frac{\partial \delta [\vec{v} - \vec{u}(\vec{x}, t)]}{\partial u_i} \neq 0 \quad \text{cuando} \quad \vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{v}$$

Es posible entonces reemplazar la derivada respecto de  $u_i$  por la derivada respecto de  $v_i$ :

$$\frac{\partial \vartheta [\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]}{\partial u_i} = - \frac{\partial \vartheta [\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]}{\partial v_i} \quad (19)$$

Reemplazando (19) en (18):

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_L(\vec{v}; \vec{x}, t)}{\partial t} &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial u_{i\vec{x}', t}}{\partial t} \frac{\partial \vartheta [\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]}{\partial v_i} G_{(\vec{x}' - \vec{x})} d\vec{x}' \\ \frac{\partial P_L(\vec{v}; \vec{x}, t)}{\partial t} &= - \frac{\partial}{\partial v_i} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial u_{i(\vec{x}', t)}}{\partial t} \vartheta [\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G_{(\vec{x}' - \vec{x})} d\vec{x}'}_{(b)} \end{aligned} \quad (20)$$

Si se utiliza la igualdad (17), la integral (b) puede escribirse como:

$$\left( \frac{\partial u_{i(\vec{x}', t)} |_{\vec{v}}}{\partial t} \right)^{\oplus} P_L(\vec{v}; \vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial u_{i(\vec{x}', t)}}{\partial t} \vartheta [\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G_{(\vec{x}' - \vec{x})} d\vec{x}' \quad (21)$$

Por lo que la expresión (20) resulta:

$$\frac{\partial P_L(\vec{v}; \vec{x}, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial v_i} \left[ \underbrace{\left( \frac{\partial u_{i(\vec{x}', t)} |_{\vec{v}}}{\partial t} \right)^{\oplus} P_L(\vec{v}; \vec{x}, t)}_{(c)} \right] \quad (22)$$

El término (c) de la ecuación (22) se obtiene a partir de la resolución de la ecuación de la cantidad de movimiento para el campo de velocidades (Xue et al., 1995; Xue et al., 2000):

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial (u_i u_j)}{\partial x_j} = g_i B - \frac{\partial p'}{\partial x_i} + 2\epsilon_{ijk} \Omega_j u_k + 2 \frac{\partial (\nu S_{ij}^a)}{\partial x_j} \quad (23)$$

Donde  $g_i$  es la aceleración de la gravedad,  $B$  representa el término de *Boyancia* debido a las fluctuaciones de la densidad del aire,  $\Omega$  es la velocidad angular de la tierra,  $\nu$  es la viscosidad cinemática del fluido y  $S_{ij}^a$  es la parte anisotrópica del tensor deformación del campo de velocidades representando la disipación de energía por viscosidad.

Reemplazando (23) en (c) de (22):

$$\frac{\partial P_L(\vec{v}; \vec{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v_i} \left\{ \left[ -\left( \frac{\partial(u_i u_k)}{\partial x_k} \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus + (g_i B \Big|_{\vec{v}})^\oplus - \left( \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus + 2\epsilon_{ijk} \Omega_j \underbrace{\left( u_k \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus}_{v_k} + 2 \left( \frac{\partial(\nu S_{ik}^a)}{\partial x_k} \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus \right] P_L(\vec{v}; \vec{x}, t) \right\} \quad (24)$$

La derivada convectiva de la cantidad de movimiento puede ser expresada como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial v_i} \left[ \left( \frac{\partial(u_i u_k)}{\partial x_k} \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus P_L(\vec{v}; \vec{x}, t) \right] &= \frac{\partial}{\partial v_i} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial(u_i u_k)}{\partial x_k} \vartheta[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}' \right] \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial u_i} \left( \frac{\partial(u_i u_k)}{\partial x_k} \right) \vartheta[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}' \\ &= - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \underbrace{\left( u_k \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus}_{v_k} P_L(\vec{v}; \vec{x}, t) \right] \\ \frac{\partial}{\partial v_i} \left[ \left( \frac{\partial(u_i u_k)}{\partial x_k} \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus P_L(\vec{v}; \vec{x}, t) \right] &= -v_k \frac{\partial P_L(\vec{v}; \vec{x}, t)}{\partial x_k} \end{aligned} \quad (25)$$

Además, se utilizan las siguientes equivalencias:

$$\left\{ \begin{aligned} v_k P_L &= u_k^\oplus P_L + (v_k - u_k^\oplus) P_L \\ (g_i B \Big|_{\vec{v}})^\oplus P_L &= g_i B^\oplus P_L + \left[ (g_i B \Big|_{\vec{v}})^\oplus - g_i B^\oplus \right] P_L \\ \left( \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus P_L &= \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'^\oplus}{\partial x_i} P_L + \frac{1}{\bar{\rho}} \left[ \left( \frac{\partial p'^\oplus}{\partial x_i} \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus - \frac{\partial p'^\oplus}{\partial x_i} \right] P_L \\ \left( \frac{\partial(\nu S_{ik}^a)}{\partial x_k} \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus P_L &= \frac{\partial(\nu S_{ik}^a)}{\partial x_k} P_L + \left[ \left( \frac{\partial(\nu S_{ik}^a)}{\partial x_k} \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus - \frac{\partial(\nu S_{ik}^a)}{\partial x_k} \right] P_L \end{aligned} \right. \quad (26)$$

Reemplazando las expresiones (25) y (26) en la ecuación de transporte de la FDFV (24) y reagrupando términos se obtiene:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P_L}{\partial t} = & -u_k^\oplus \frac{\partial P_L}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ (v_k - u_k^\oplus) P_L \right] - g_i B^\oplus \frac{\partial P_L}{\partial v_i} \\
& + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p'^\oplus}{\partial x_i} \frac{\partial P_L}{\partial v_i} - 2\epsilon_{ijk} \Omega_j \frac{\partial (u_k^\oplus P_L)}{\partial v_i} - 2 \frac{\partial (\nu S_{ik}^a)^\oplus}{\partial x_k} \frac{\partial P_L}{\partial v_i} \\
& - \frac{\partial}{\partial v_i} \left\{ \left[ (g_i B|_{\vec{v}})^\oplus - g_i B^\oplus \right] P_L \right\} + \frac{\partial}{\partial v_i} \left\{ \frac{1}{\rho} \left[ \left( \frac{\partial p'}{\partial x_i} \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus - \frac{\partial p'^\oplus}{\partial x_i} \right] P_L \right\} \\
& - 2 \frac{\partial}{\partial v_i} \left\{ \left[ \left( \frac{\partial (\nu S_{ik}^a)}{\partial x_k} \Big|_{\vec{v}} \right)^\oplus - \frac{\partial (\nu S_{ik}^a)^\oplus}{\partial x_k} \right] P_L \right\}
\end{aligned} \tag{27}$$

La ecuación (27) es una ecuación exacta de transporte de la *FDFV*. El primer y segundo términos del miembro de la derecha representan respectivamente la derivada convectiva de las grandes escalas turbulentas y de *submalla* ya que siendo  $v_k$  un valor particular de velocidad del campo  $U_k$ , entonces  $(v_k - u_k^\oplus) = u_k^\ominus$  según la descomposición (14). El tercer, cuarto, quinto y sexto términos representan los efectos de la gravedad, la convección de velocidad debida al gradiente de la presión, la *Fuerza de Coriolis* y la convección de la velocidad debida a la difusión molecular de las grandes escalas turbulentas. Los tres últimos términos representan los efectos convectivos de la fuerza de gravedad, el gradiente de la presión y la difusión molecular en *submalla*. El efecto de la *Fuerza de Coriolis* de *submalla* es despreciable frente a los demás términos. Los términos que actúan en *submalla* no pueden calcularse directamente por *SGE* y por lo tanto se propone un *MEL* para su resolución.

### 3.2.3 Modelo Estocástico Lagrangiano (*MEL*) en la ecuación de transporte de la *FDFV*

Es posible modelar los tres últimos términos de la ecuación de transporte de la *FDFV* utilizando un *MEL* generalizado. Haworth and Pope (1986) proponen una variante para la *Ecuación de Langevin* (2) expresando el término determinista para el campo de fluctuaciones de velocidad en una descomposición *Reynolds* (11) de la forma  $\alpha_{ij} u'_j$ . Gicquel and Givi (2002), Aguirre (2005); Aguirre et al. (2006a, b); Vinkovic et al. (2006a, b) utilizaron la descomposición en grandes y pequeñas escalas para introducir el *MEL* según la forma  $\alpha_{ij} (v_j - u_j^\oplus)$ . En todos los casos se han tenido en cuenta en este término los efectos de las características de la turbulencia del fluido. Particularmente Haworth y Pope (1986) y Gicquel and Givi (2002) expresaron el mismo para turbulencia homogénea isotrópica y los demás autores para turbulencia inhomogénea e isotrópica. El término aleatorio  $q_{ij} \eta(t)$  se lo consideró libre de estos efectos y por lo tanto según la relación (13) los autores propusieron:

$$q_{ij} = \sigma_{u_i} \sqrt{\frac{2}{T_L}} \tag{28}$$

Esto implica que el tensor  $q_{ij}$  puede ser expresado en función de la energía cinética turbulenta del fluido  $K$  y de su tasa de disipación  $\varepsilon$  haciendo uso de la expresión obtenida por Pope (1994) para el tiempo característico en turbulencia homogénea isotrópica:

$$K = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} \sigma_{u_i}^2 \tag{29}$$

$$T_L = \frac{2\sigma_{u_i}^2}{C_0\varepsilon} = \frac{4}{3} \frac{K}{C_0\varepsilon} \delta_{ij} \quad (30)$$

Utilizando (29) y (30) en (28), el tensor  $q_{ij}$  se expresa como:

$$q_{ij} = \sqrt{C_0\varepsilon} \delta_{ij} \quad (31)$$

En las expresiones anteriores  $C_0 = 2,1$  es la *Constante de Kolmogorov*, (Kolmogorov, 1941).

De la misma forma que se asoció la ecuación de Langevin para el campo de velocidades (5) con la ecuación de Fokker-Plank (6), se escribe la ecuación de transporte de la FDFV (24) modelando los términos de *submalla* con un MEL aplicado a las pequeñas escalas no resueltas por SGE:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_L}{\partial t} = & -u_k^\oplus \frac{\partial P_L}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ (v_k - u_k^\oplus) P_L \right] - g_i B^\oplus \frac{\partial P_L}{\partial v_i} \\ & + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p'^{\oplus}}{\partial x_i} \frac{\partial P_L}{\partial v_i} - 2\epsilon_{ijk} \Omega_j \frac{\partial (u_k^\oplus P_L)}{\partial v_i} - 2 \frac{\partial (\nu S_{ik}^a)^\oplus}{\partial x_k} \frac{\partial P_L}{\partial v_i} \\ & - \frac{\partial}{\partial v_i} \left[ \alpha_{ij} (v_j - u_j^\oplus) P_L \right] + \frac{1}{2} C_0 \varepsilon \frac{\partial^2 P_L}{\partial v_i \partial v_j} \end{aligned} \quad (32)$$

Esta ecuación es similar a (3) sólo que es local y condicionada a la posición y velocidad que tenía la partícula fluida al instante de ingresar al dominio de la celda ( $m$ ). La misma está asociada al sistema posición-velocidad de la partícula fluida (4) que, en este caso, representan la posición relativa respecto del centro de la malla y la velocidad de la partícula fluida según la descomposición (14). De esta forma, el parámetro  $S_{(t)}$  en (3) y en (4) representa:  $S_{(t)} \equiv \{x'_{i(t)}, U_{i(m,t)}\}$  Por lo tanto, el sistema de ecuaciones para la dupla posición-velocidad (4) se escribe como:

$$\begin{cases} dx'_{i(t)} & = U_{i(m,t)} dt \\ dU_{i(m,t)} & = h_{i(U_{i(m,t)}, t)} dt + q_{ij}(U_{i(m,t)}, t) \eta_j(t) dt \end{cases} \quad (33)$$

asociada a la ecuación de Fokker-Planck (3) escrita para la misma dupla:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_L}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ U_{i(m,t)} P_L \right] - \frac{\partial}{\partial v_i} \left[ h_{i(U_{i(m,t)}, t)} P_L \right] \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} \left[ q_{ik}(U_{i(m,t)}, t) q_{jk}(U_{j(m,t)}, t) P_L \right] \end{aligned} \quad (34)$$

Comparando (34) con la ecuación de transporte de la FDFV (32) se pueden observar las siguientes equivalencias:

$$\left\{ \begin{array}{l} U_{i(m,t)} = v_{i(m,t)} = u_{i(m,t)}^{\oplus} + \left( v_{i(m,t)} - u_{i(m,t)}^{\oplus} \right) \\ h_{i(U_{i(m,t)},t)} = g_i B^{\oplus} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p'^{\oplus}}{\partial x_i} + 2\epsilon_{ijk} \Omega_j u_k^{\oplus} + 2 \frac{\partial (\nu S_{ik}^a)^{\oplus}}{\partial x_k} \\ \quad + \alpha_{ij} \left( U_{j(m,t)} - u_{j(m,t)}^{\oplus} \right) \\ q_{ij(U_{i(m,t)},t)} = \sqrt{C_0 \epsilon} \delta_{ij} \end{array} \right. \quad (35)$$

Donde  $h_{i(U_{i(m,t)},t)}$  es el término determinista del MEL, cuyos cuatro primeros términos son calculados a partir de SGE y el último resta a determinar.

### 3.3 El tensor determinista del MEL según las hipótesis de la turbulencia del flujo

La elección de la expresión para el tensor  $\alpha_{ij}$  dependerá de las características de la turbulencia del flujo a que se encuentra sometida la partícula. Estas características responden a los efectos de anisotropía, que pueden ser importantes en el caso de un fluido confinado por superficies sólidas donde los fenómenos de mezclas, transporte y dispersión turbulenta están condicionados en una o más direcciones por la presencia de paredes sólidas. Otra propiedad es la inhomogeneidad estadística del flujo turbulento, es decir, la existencia de gradientes de velocidad media que impliquen un comportamiento no homogéneo de la turbulencia en diferentes regiones del flujo. Este aspecto también es muy usual cuando se tratan flujos de fluidos confinados por paredes sólidas que imparten al campo de velocidades un gradiente. Se consideran además los flujos estacionarios y no estacionarios en relación a la energía cinética turbulenta. Este aspecto también se debe tener en cuenta ya que si no existen aportes de energía externos, la energía turbulenta decae corriente abajo a un ritmo igual a su tasa de disipación por viscosidad molecular.

#### 3.3.1 El tensor determinista en turbulencia homogénea isotrópica estacionaria y no estacionaria de submalla

El caso más simple es el de turbulencia homogénea isotrópica estacionaria que se presentó en la sección 2.3 considerando un movimiento bidimensional obteniendo así el sistema de ecuaciones (13) para una descomposición *Reynolds*. Ahora bien, para adecuar estas ecuaciones al ámbito de la *submalla*, es necesario observar que la fluctuación de velocidad en la descomposición *Reynolds* ( $u'_i$ ) es equivalente a la fluctuación de la velocidad alrededor del valor calculado por SGE en la descomposición (14). Esta última fluctuación es justamente la magnitud del campo de velocidades que afecta al tensor  $\alpha_{ij}$  en la ecuación (35), es decir:  $u_{i(m,t)}^{\ominus} = U_{i(m,t)} - u_{i(m,t)}^{\oplus}$ . Otra premisa a tener en cuenta es que la energía cinética turbulenta de *submalla* es la energía que presentan estas fluctuaciones. Esta energía tiene como expresión:

$$K^{\ominus} = \frac{1}{2} \left( u_i^{\ominus} u_i^{\ominus} \right)^{\oplus} \quad (36)$$

Según las consideraciones precedentes y de la expresión (30) para el tiempo característico de la turbulencia se tiene:

$$\alpha_{ij} = -\frac{3}{4} \frac{C_0 \varepsilon}{K^\ominus} \delta_{ij} \quad (37)$$

En el caso de turbulencia homogénea isotrópica no estacionaria se considera el decaimiento de la energía turbulenta a tasa  $\varepsilon$ .

$$\frac{dK^\ominus}{dt} = -\varepsilon \quad (38)$$

Considerando una expresión análoga a (10) se obtiene:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left( u_i^\ominus u_i^\ominus \right)^\oplus = \alpha_{ij} \left( u_j^\ominus u_j^\ominus \right)^\oplus + \frac{q_{ij}^2}{2} \quad (39)$$

Si se admite como antes la relación (28) para el tensor  $q_{ij}$ , operando en (39) se obtiene:

$$\alpha_{ij} = -\left( \frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right) \frac{\varepsilon}{K^\ominus} \delta_{ij} \quad (40)$$

que corresponde a la expresión para el tensor determinista de MEL en turbulencia homogénea isotrópica no estacionaria.

### 3.3.2 El tensor determinista en turbulencia inhomogénea isotrópica no estacionaria de submalla

El caso de inhomogeneidad de turbulencia de *submalla* se presenta en las celdas de la malla de cálculo que se ubican próximas a zonas de perturbación externa al flujo, como por ejemplo en proximidad de una pared que contenga o canalice el fluido. En estas celdas, existirá un gradiente en el perfil de velocidad media que no permitirá considerar que la disminución temporal de la energía cinética turbulenta se deba solamente a la tasa de disipación por viscosidad molecular (38) sino que habrá además producción y difusión por efectos de las variaciones de presión debidas a los gradientes de velocidad. Para este caso, debe resolverse la ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta de *submalla*. Deardorff (1980) expresa esta ecuación para la descomposición Reynolds, Aguirre (2005), Aguirre et al. (2006b) la reescribe en forma de la descomposición en grandes y pequeñas escalas turbulentas (14):

$$\begin{aligned} \frac{dK^\ominus}{dt} = & \underbrace{- \left( u_i^\ominus u_i^\ominus \right)^\oplus \frac{\partial u_i^\oplus}{\partial x_k}}_{\text{Producción}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ u_i^\ominus \left( K^\ominus + R_{ik} + \frac{p'^\ominus}{\bar{\rho}} \right) \right]^\oplus}_{\text{Difusión}} \\ & - \underbrace{g_i \left[ \frac{u_i^\ominus}{\bar{\rho}} B^\ominus \right]^\oplus}_{\text{Gravedad}} - \underbrace{\varepsilon}_{\text{Disipación}} \end{aligned} \quad (41)$$

La expresión para el tensor  $\alpha_{ij}$  en turbulencia inhomogénea isotrópica no estacionaria de *submalla* se obtiene de forma análoga al caso anterior pero considerando (41):

$$\alpha_{ij} = \left( \frac{1}{2K^\ominus} \frac{dK^\ominus}{dt} - \frac{3}{4} \frac{C_0 \varepsilon}{K^\ominus} \right) \delta_{ij} = \frac{3}{2K^\ominus} \left( \frac{1}{3} \frac{dK^\ominus}{dt} - \frac{C_0 \varepsilon}{2} \right) \delta_{ij} \quad (42)$$

### 3.3.3 El tensor determinista en turbulencia inhomogénea anisotrópica no estacionaria de submalla

En este caso, se tendrán en cuenta los efectos de anisotropía de la turbulencia a la escala de *submalla* ocasionados por fuerza externas al flujo que no se ejercen de la misma forma en todas las direcciones (como por ejemplo esfuerzos de cizallamiento debidos a la presencia de una pared que influyen en los fenómenos transferencia de energía turbulenta en dirección normal a la misma). Para este caso, el modelo se conoce como la *forma generalizada del tensor*  $\alpha_{ij}$  y ha sido propuesta por [Haworth and Pope \(1986\)](#) como una *funcional* en la descomposición *Reynolds*:

$$\alpha_{ij} = f \left( \overline{u'_k u'_l}, \frac{\partial \overline{U}_p}{\partial x_q}, \varepsilon \right) \quad (43)$$

La forma general de esta funcional ha sido propuesta bajo una dependencia lineal de estas magnitudes:

$$\alpha_{ij} = \alpha_1 \frac{\varepsilon}{K} \delta_{ij} + \frac{\varepsilon}{K} b_{ij} + H_{ijkl} \frac{\partial \overline{U}_k}{\partial x_l} \quad (44)$$

Para la descomposición del campo de velocidades en grandes y pequeñas escalas turbulentas (27), esta funcional se escribe ([Aguirre, 2005](#)):

$$\alpha_{ij} = \alpha_1 \frac{\varepsilon}{K^\ominus} \delta_{ij} + \frac{\varepsilon}{K^\ominus} b_{ij} + H_{ijkl} \frac{\partial U_k^\oplus}{\partial x_l} \quad (45)$$

Comparando (45) con (40),  $\alpha_1$  es el coeficiente del término que traduce el efecto de isotropía en turbulencia homogénea no estacionaria y por lo tanto su expresión es:

$$\alpha_1 = - \left( \frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right) \quad (46)$$

El segundo término de (45) representa los efectos de anisotropía del tensor *Reynolds* de *submalla*:

$$b_{ij} = \frac{\left( u_i^\ominus u_j^\ominus \right)^\oplus}{\left( u_k^\ominus u_k^\ominus \right)^\oplus} - \frac{\delta_{ij}}{3} = \frac{R_{ij}}{2K^\ominus} - \frac{\delta_{ij}}{3} \quad (47)$$

El tercer término de (45) expresa la dependencia de la turbulencia de *submalla* con los gradientes de las grandes escalas del campo de velocidad en el seno de la celda de cálculo. Esto lleva a pensar que el mismo será tanto más despreciable frente a los otros cuanto menor sea el tamaño de las celdas en la dirección del gradiente. Por consiguiente, para las celdas adyacentes a la pared donde estos gradientes son importantes, resulta necesario realizar un

refinamiento de la malla (Van Driest, 1956; Deardorff, 1970; Mason and Challen, 1986; Cabot, 1995; 1996; 1997; Cabot and Moin, 2000). De lo expuesto, se considerará en adelante que este último término no se tendrá en cuenta en la formulación del modelo final para el tensor  $\alpha_{ij}$  siempre que se realice un refinado de la malla de cálculo de *SGE* en estas zonas. El tensor  $\alpha_{ij}$  para el caso de turbulencia inhomogénea anisotrópica no estacionaria de *submalla* resulta:

$$\alpha_{ij} = \underbrace{\frac{1}{2K^\ominus} \frac{dK^\ominus}{dt} \delta_{ij}}_{\text{no estacionario}} - \underbrace{\left(\frac{3}{4}C_0\right) \frac{\varepsilon}{K^\ominus} \delta_{ij}}_{\text{isotropía}} + \underbrace{\left(\frac{R_{ij}}{2K^\ominus} - \frac{\delta_{ij}}{3}\right) \frac{\varepsilon}{K^\ominus}}_{\text{anisotropía}} \quad (48)$$

En este trabajo se propone utilizar este último modelo para el tensor  $\alpha_{ij}$  y comparar los resultados con los modelos anteriormente citados en el caso de la experiencia de Gong (1991).

## 4 RESULTADOS

### 4.1 Descripción de la experiencia de Gong (1991)

Gong and Ibbetson (1989) realizaron mediciones de los valores de velocidad media y fluctuación del flujo de aire en capa límite neutra turbulenta producida en el túnel de viento del laboratorio del *Departamento de Agricultura de la Universidad de Reading (Gran-Bretaña)* utilizando la metodología de generación de flujo turbulento de Counihan (1969). Los experimentadores instalaron sobre el piso del túnel una hoja de caucho para simular un suelo rugoso y una colina de suave pendiente. Detalles de la geometría del túnel y de la colina simulada pueden encontrarse en Gong and Ibbetson (1989), Aguirre (2005) y Aguirre et al. (2007). Este último autor simuló la experiencia utilizando un código *SGE* adaptado de ARPS "Advanced Regional Prediction Storm" (Xue et al., 1995; Xue et al., 2000). Gong (1991) realizó mediciones de concentración de un gas pasivo (anhídrido carbónico) incorporando una fuente casi puntual corriente arriba de la colina. Los datos característicos de la capa límite generada en laboratorio, el diámetro y altura de la fuente de emisión del gas como así también posición de la misma son:

$$\left\{ \begin{array}{lll} \delta & = & 300,00 \text{ mm} : \text{espesor de la capa límite.} \\ U_e & = & 8,00 \text{ m/s} : \text{velocidad media del flujo exterior a la capa límite.} \\ u_* & = & 0,44 \text{ m/s} : \text{velocidad de frotamiento.} \\ z_0 & = & 0,17 \text{ mm} : \text{rugosidad media del suelo.} \\ z_s & = & 13,00 \text{ mm} : \text{altura de la fuente de emisión.} \\ d_s & = & 1,35 \text{ mm} : \text{diámetro de la fuente de emisión.} \\ x_s & = & 350,00 \text{ mm} : \text{distancia entre la fuente de emisión y la cima.} \\ h_c & = & 31,00 \text{ mm} : \text{altura de la cima de la colina.} \\ L_c & = & 200,00 \text{ mm} : \text{distancia entre la cima y el pie de la colina.} \\ C_{CO_2}^0 & = & 400,00 \text{ ppm} : \text{concentración media del gas a la salida de la fuente.} \\ Re_t & = & 15157 : \text{Número de Reynolds turbulento.} \end{array} \right.$$

El Número de *Reynolds* turbulento caracteriza la intensidad de la turbulencia:  $Re_t = \frac{u'_t \delta}{\nu}$

y  $u'_t = \sqrt{\frac{1}{3}(u_{max}^{\prime 2} + v_{max}^{\prime 2} + w_{max}^{\prime 2})}$  es la escala característica de la turbulencia.



Las mediciones de concentración de gas fueron hechas en el plano de simetría axial que contiene a la fuente obteniéndose perfiles de los valores medios en cinco posiciones:

$$x - x_s = \begin{cases} 150 & mm : \text{pie a barlovento.} \\ 250 & mm : \text{media loma a barlovento.} \\ 350 & mm : \text{cima.} \\ 450 & mm : \text{media loma a sotavento.} \\ 550 & mm : \text{pie a sotavento.} \end{cases}$$

En este trabajo se presenta la comparación entre las mediciones experimentales y los resultados de la simulación utilizando el modelo acoplado *SGE-MEL* considerando tres hipótesis para el modelo de turbulencia de *submalla*:

**TSM HI.** Turbulencia de Submalla Homogénea Isotrópica no estacionaria.

**TSM II.** Turbulencia de Submalla Inhomogénea Isotrópica no estacionaria.

**TSM IA.** Turbulencia de Submalla Inhomogénea Anisotrópica no estacionaria.

Además, se realizaron simulaciones numéricas sin utilizar el modelo estocástico para turbulencia de *submalla* (**No TSM**) a los efectos de la comparación.

#### 4.2 Resultados de la simulación de la experiencia de Gong (1991)

Para la inicialización de la simulación se han utilizado los resultados de la dinámica de la capa límite obtenidos a 8,00 s que son suficientes para considerar que el flujo se encuentra en régimen permanente y estabilizado (Aguirre et al., 2007). A partir de ese momento se ha comenzado a inyectar partículas fluidas. Para los cálculos estadísticos se han considerado los resultados luego de 4,00 s adicionales para obtener un régimen permanente de las mismas dentro del dominio de cálculo. El tiempo físico total simulado fue de 100 s. El ritmo de inyección de partículas ha sido fijado en 50.000 por segundo. La evolución temporal de la cantidad de partículas fluidas en el dominio de cálculo muestra que cerca de 130000 están presentes en régimen permanente. La cantidad total de partículas inyectadas para todo el tiempo de simulación ha sido de 10125151. El autor de la experiencia presentó los resultados de concentración de gas normalizados según la ecuación:  $C_n = \frac{C\delta U_e^2}{C_{CO_2}^0 z_s u_s^2}$  donde  $C$  es la concentración de gas y  $u_s$  es la velocidad del aire a la altura de la fuente de emisión. Las Figuras 2, 3 y 4 muestran los perfiles de la concentración media.

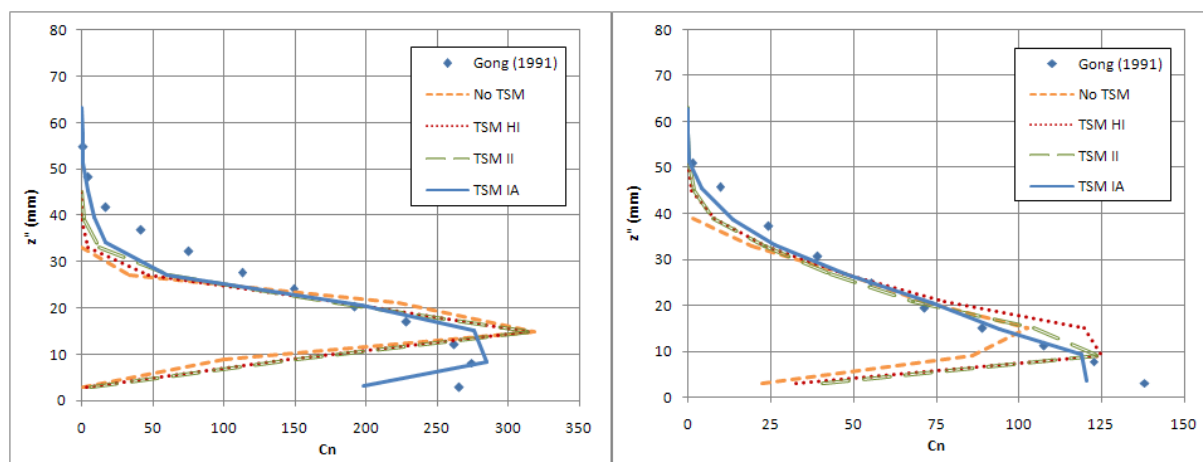


Figura 2. Perfiles de concentración normalizada a  $x - x_s = 150$  mm (izquierda) y  $x - x_s = 250$  mm (derecha).

La Figura 5 muestra el valor de concentración a nivel de suelo y la Figura 6 muestra el desvío estándar de la altura del centro de la pluma de gas.

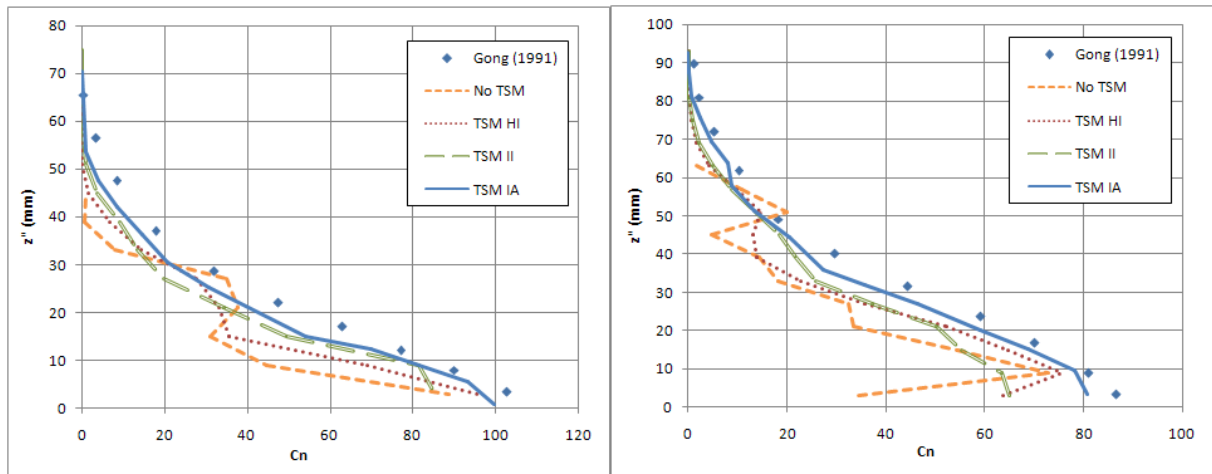


Figura 3. Perfiles de concentración normalizada a  $x - x_s = 350$  mm (izquierda) y  $x - x_s = 450$  mm (derecha).

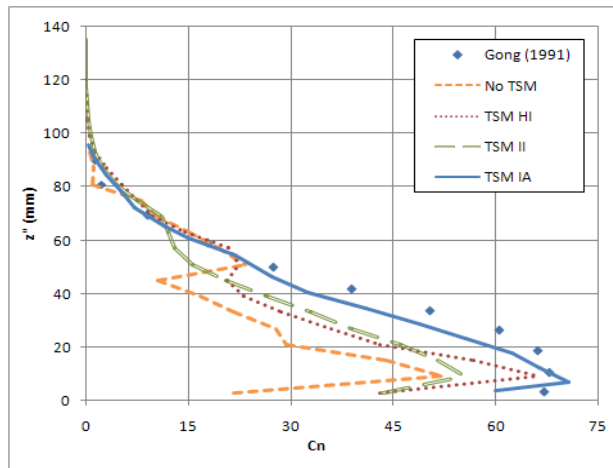


Figura 4. Perfiles de concentración media a  $x - x_s = 550$  mm

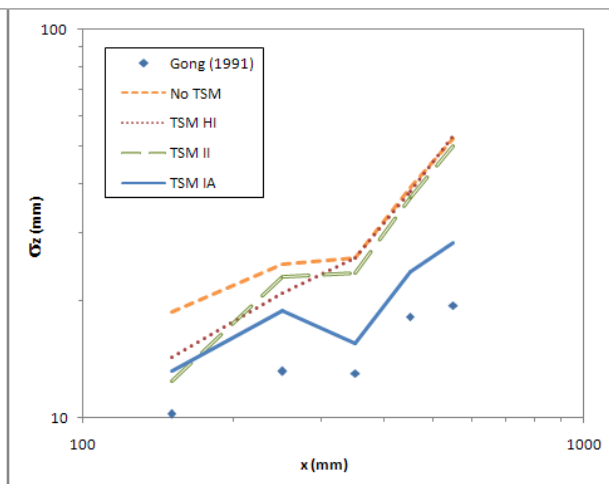
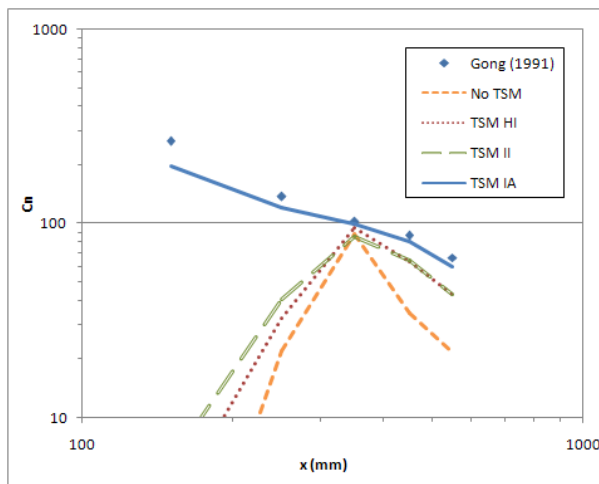


Figura 5. Concentración normalizada a nivel de suelo. Figura 6. Desvío Estándar de la altura del centro de la pluma.

La **Figura 7** muestra los niveles de concentración media de la pluma de gas sobre el plano axial que contiene a la fuente mientras que la **Figura 8** muestra los mismos a nivel de suelo, ambos corresponden al caso de Turbulencia de *submalla* Inhomogénea Anisotrópica no estacionaria (TSM IA).

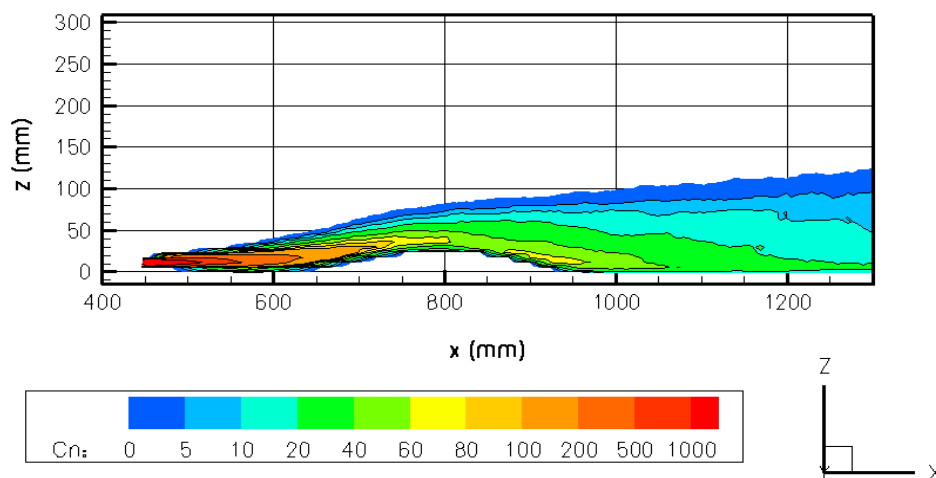


Figura 7. Valores de concentración media de gas sobre el plano axial que contiene a la fuente (caso TSM IA).

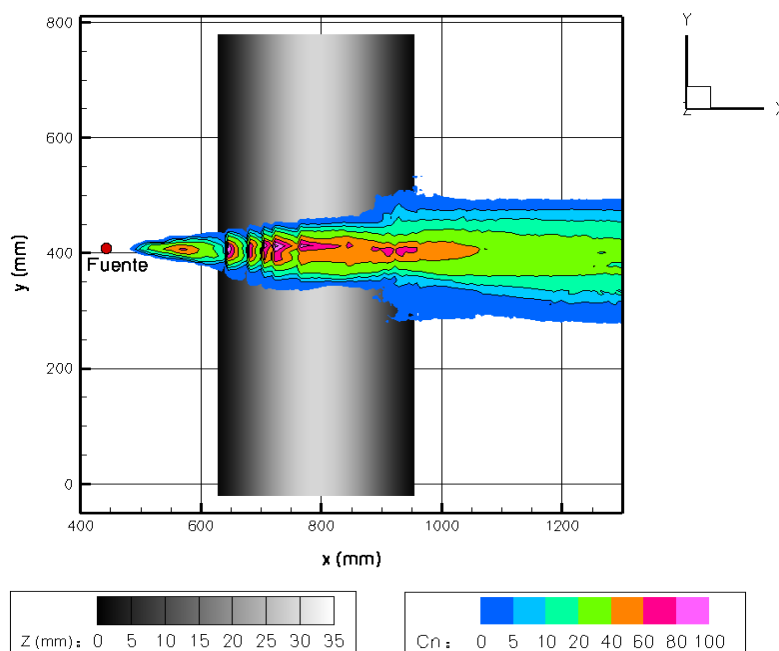


Figura 8. Valores de la concentración media de la pluma de gas a nivel de suelo (caso TSM IA).

## 5 DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

Del análisis de los resultados surge que el modelo de turbulencia de submalla TSM IA presenta mejores resultados cerca del suelo ya que ajusta mejor a las observaciones experimentales. Esto es más evidente a barlovento de la colina. A alturas mayores a la que corresponde a la fuente de emisión existen pequeñas diferencias entre los modelos TSM II y TSM IA ya que los efectos de anisotropía que representa este último se tornan despreciables lejos del suelo, sin embargo existen algunas diferencias a sotavento de la colina. Se observa que el modelo TSM HI presenta ciertas variaciones abruptas en los niveles de concentración a alturas entre 20 mm y 40 mm que posiblemente son debidas a que en esta zona comienza a refinarse el mallado y este modelo no representa bien la variación del perfil de viento dentro de la celda de cálculo. La simulación de dispersión de la pluma de gas obtenida sólo considerando la SGE (sin utilizar un modelo de turbulencia *submalla*) presenta variaciones bastante más pronunciadas en los perfiles de concentración media de la pluma de gas.

Se concluye que el modelo de turbulencia de *submalla* que considera los efectos de inhomogeneidad en el perfil medio de viento y anisotropía en las componentes de velocidad cerca del suelo debido a la presencia de paredes sólidas presenta los mejores resultados para la configuración de colina analizada. Cabría esperar que este modelo se comporte de la misma forma para configuraciones de topografía más exigentes donde podrían formarse zonas de recirculación a sotavento de la misma.

Se hace evidente la utilidad que presenta este tipo de modelos para el caso de simulación de polución en la capa límite atmosférica considerando fenómenos de difusión y reacciones químicas de especies transportadas por el viento. La ventaja de obtener la posición y velocidad en cada instante de tiempo, permite considerar las reacciones químicas que se producen si la temperatura sobrepasa ciertos umbrales, cosa que no podría considerarse con modelos que simulan la dispersión de plumas reactivas considerando sólo valores medios de velocidad de viento.

## REFERENCIAS

- Aguirre C. A. Dispersión et Mélange Atmosphérique Euléro-Lagrangien de Particules Fluides Réactives. Application à des cas simples et complexes. *Thèse de doctorat. Université Claude Bernard Lyon 1*. **115-2005**, pp: 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. *Int. J. for Heat and Fluid Flow*. **27 (4)**, pp 627-635, 2006a. URL: [www.elsevier.com/locate/ijhff](http://www.elsevier.com/locate/ijhff).
- Aguirre C. A., A. B. Brizuela, I. Vinkovic and S. Simoëns. Modelo Acoplado Eulero-Lagrangiano de Simulación de la dispersión Atmosférica de Especies Químicamente Reactivas en la Capa Límite. *Mecánica Computacional*. **Vol XXV**, pp: 185-205, 2006b.
- Aguirre C. A., J. M. Martínez Fayó, A. B. Brizuela y M. F. Moyano. Simulación de las Grandes Escalas de Flujo Turbulento sobre una Colina de Suave Pendiente. *Mecánica Computacional*. **Vol XXVI**, pp: 1215-1235, 2007.
- Boersma B. J. Direct Numerical Simulation of a Turbulent Reacting Jet. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs. NASA Ames/Stanford Univ.* pp: 59-72, 1999.
- Cabot W. Large-eddy Simulation with Wall Models. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs. NASA Ames/Stanford Univ.* pp: 41-50, 1995.
- Cabot W. Near-wall Models in Large-eddy Simulation of Flow Behind a Backward-facing Step. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs. NASA Ames/Stanford Univ.* pp: 199-210, 1996.
- Cabot W. Wall Models in Large-eddy Simulation of Separate Flow. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs. NASA Ames/Stanford Univ.* pp: 97-106, 1997.
- Cabot W. and P. Moin. Approximative Wall Boundary Conditions in the Large-eddy Simulation of High Reynolds Number Flow. *Flow Trub. Combust.* **63**, pp: 269-291, 2000.
- Cha C. M. and P. Trouillet. A subgrid-scale Mixing Model for Large-eddy Simulations of Turbulent Reacting Flows Using the Filtered Density Function. *Phys. of Fluids* **15 (6)**, pp: 1946-1504, 2003.
- Colucci P., F. Jaber, P. Givi and S. Pope. Filtered Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent Reacting Flow. *Phys. Fluids*. **10**, pp: 499, 1998.
- Counihan J. An Improved Method of Simulating an Atmospheric Boundary Layers in a Wind Tunnel. *Atmos. Environment*. **3**, pp: 197-214, 1969.
- Deardorff J. W. A Numerical Study of three-dimensional Turbulent Channel Flow. *J. of Fluid Mech.* **41**, pp: 453-480, 1970.
- Deardorff J. W. The Use of Subgrid Transport Equations in a Three-Dimensional Model of Atmospheric Turbulence. *J. of Fluid Engineering*. **Set 1973**, pp: 429-438, 1973.

- Deardorff J. W. Stratocumulus-capped mixed layer derived from a three dimensional model. *Boundary-Layer Meteorology*. **18**, pp: 495-527, 1980.
- Durbin P. A. A Random Flight Model in Inhomogeneous Turbulent Dispersion. *Phys. Fluids*. **23 (11)**, pp: 2151-2153, 1980.
- Gao F. and E. O'Brien. A Large-Eddy Simulation schema for Turbulent reacting flow. *Phys. Fluids*. **A5**, pp 1282, 1993.
- Gicquel L. and P. Givi. Velocity filtered Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent flow. *Phys. Fluids*. **14 (3)**, pp: 1196-1213. 2002.
- Gong W. A Wind Tunnel Study of Turbulent Dispersion over two – and three- dimensional Gentle Hills from Upwind Point Sources in Neutral Flow. *Boundary Layers Meteorology*, **54**, pp 211-230, 1991.
- Gong W. and A. Ibbetson. A wind tunnel study of turbulent flow over models hill. *Boundary Layers Meteorology*, **49**, pp 113-148, 1989.
- Haworth D. C. and S. B. Pope. A Generalized Langevin Model for Turbulent Flow. *Phys. Fluid*. **29 (2)**, pp: 378-405, 1986.
- Jaberi F., P. Colucci, S. James, P. Givi and S. Pope. Filtered Mass Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent Reacting Flow. *J. of Fluid Mech.* **401**, pp 85. 1999.
- Kolmogorov A. N. Local Structure of Turbulence in an Incompressible Fluid at very high Reynolds Numbers. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* **30**, pp 299-303, 1941.
- Langevin P. On the Theory of Brownian Motion. *C. R. Acad. des Sci.* **146**, pp 530-533. 1908.
- Mason P. and N. Challen. On the Magnitude of the Subgrid-Scale Eddy Coefficient in a Large-Eddy Simulation of Turbulent Channel Flow. *J. of Fluid Mech.* **162**, pp: 439-462, 1986.
- Monin A. S. and A. M. Yaglom. Statistical Fluid Mechanics. *Cambridge Mass: MIT Press*, **2**, pp: 874, 1975.
- Pope S. B. PDF Methods for Turbulent Reactive Flow. *Prog. Energy Comb. Sci.* **11**, pp: 119-192. 1985.
- Pope S. B. Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flow. *Ann. Rev Fluid Mech*, **26**, pp: 23-63, 1994.
- Schumann U. Subgrid Scale Model for Finite Difference Simulation of Turbulent Flow in Plane Channels and Annuli. *J. of Comp. Phys.* **18**, pp 376-404, 1975.
- Taylor G. I. Diffusion by Continuous Movements. *London Math. Soc.* **20**, pp 196-211, 1921.
- Van Dreist E. R. On Turbulent Flow Near Wall. *J. of Aero Science.* **23**, pp: 1007-1011, 1956.
- Vinkovic I., C. Aguirre, S. Simoëns and M. Gorokhovski. Large-Eddy Simulation of Droplet Dispersion for Inhomogeneous turbulent Wall flow. *International Journal of Multiphase Flow*. **32 (3)**, pp: 344-364. . URL: [www.elsevier.com/locate/ijmulflow](http://www.elsevier.com/locate/ijmulflow), 2006a.
- Vinkovic I., C. Aguirre, M. Ayrault and S. Simoëns. Large-Eddy Simulation of the Dispersion of Solid Particles in a Turbulent Boundary Layers. *Boundary-Layer Meteorology*. pp: 1472-1573. URL: [www.springerlink.com](http://www.springerlink.com), 2006b.
- Wiener N. Differential Space. *J. of Math. Phys.* **58**, pp 131-174. 1923.
- Xue M., K. K. Droegemeier and V. Wong. The Advanced Regional Prediction System and Real-time Storm Weather Prediction. *International Workshop on Limited-area and Variable Resolution Models. Beijing, China. World Meteorology Organization*. 1995.
- 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 Verification. *Meteorology Atmospheric Physics*. **75**, pp 161-193, 2000.